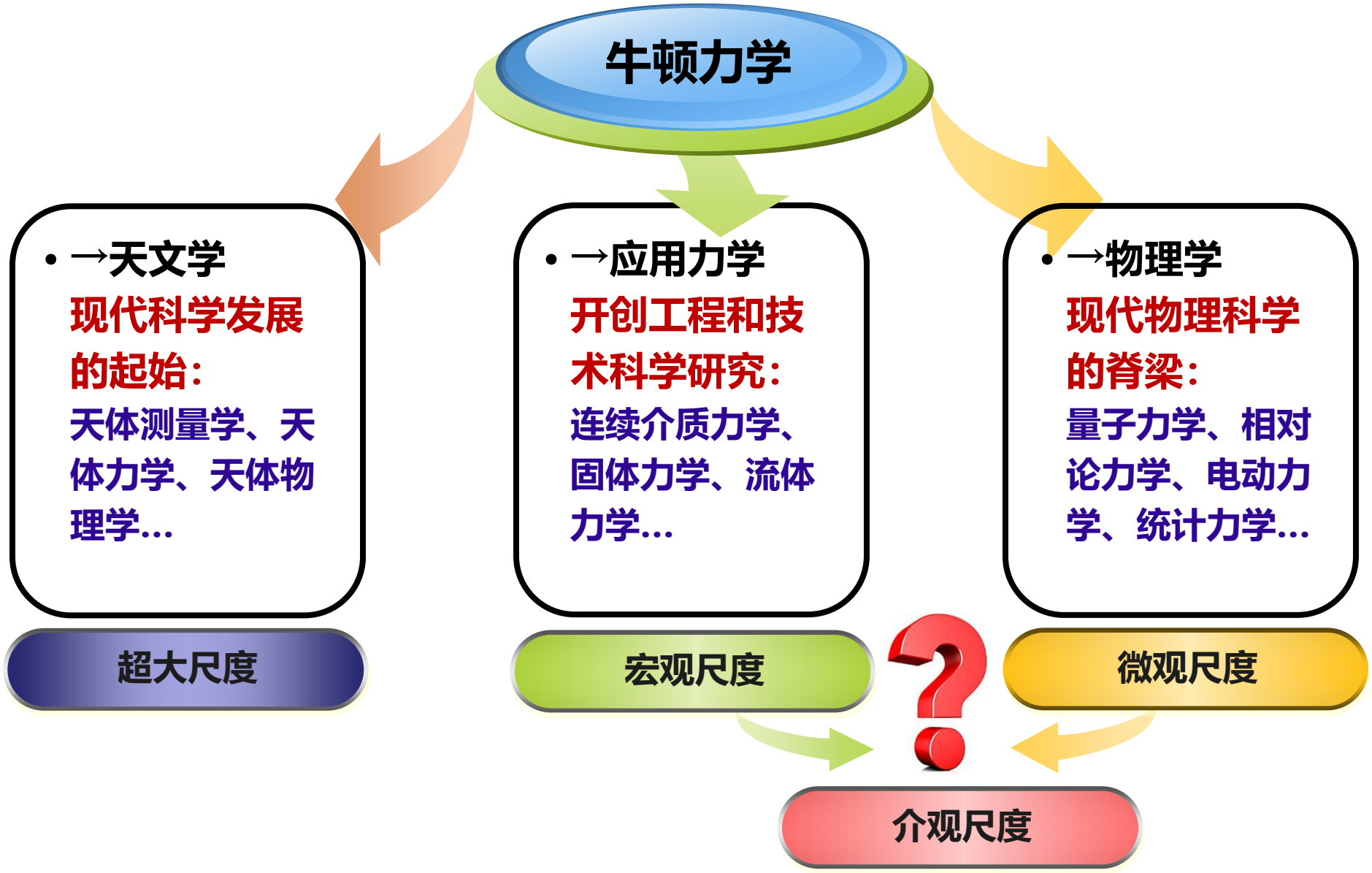
计算力学：从纳米到宏观，从材料到结构

吴恒安

中国科学技术大学 工程科学学院 近代力学系

2026年10月29日，物理学院

力学与物理的分手又重逢



物理力学、微纳米力学

(*Reprinted from Journal of the American Rocket Society, January-February 1953*)
Copyright, 1953, by the American Rocket Society, Inc., and reprinted by permission of the copyright owner.

Physical Mechanics, a New Field in Engineering Science

H. S. TSIEN[1]

Daniel and Florence Guggenheim Jet Propulsion Center, California Institute of Technology, Pasadena, Calif.

The purpose of physical mechanics is to predict the engineering behavior of matter in bulk from the microscopic properties of its molecular and atomic constituents. The constants and basic concepts of this new engineering science, of particular importance to rocket and jet propulsion, are discussed in this paper.

The statistical mechanics and the kinetic theory are not used to verify the atomic theory through the bulk properties of matter, but rather should be used to predict the bulk behaviors of matter from the known properties of the molecules and atoms. Since engineers always deal with matter in bulk, the prediction of bulk properties is then of vital interest to



钱学森院士，我系首任系主任，曾为我系讲授过"星际航行概论"等课程

钱学森先生在1953年提出“物理力学----工程科学的新领域”， 其目的是从微观尺度预测材料的宏观力学行为。



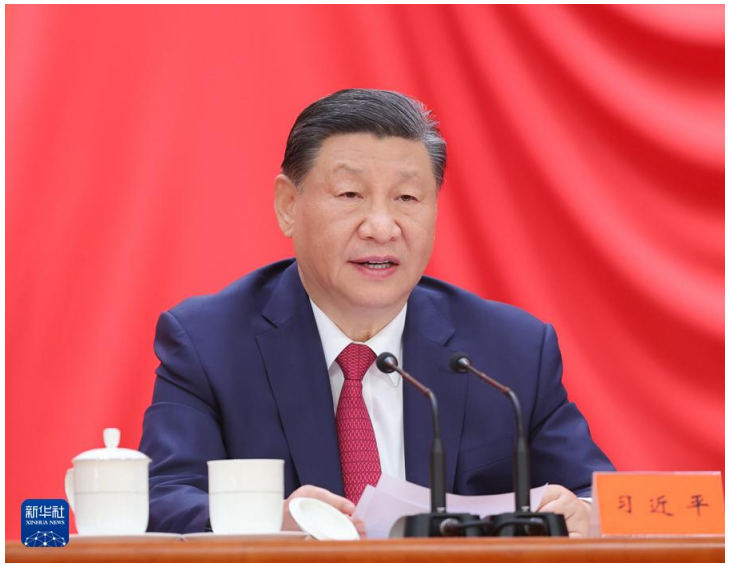
There's Plenty of Room at the Bottom

An Invitation to Enter a New Field of Physics

This transcript of the classic talk that Richard Feynman gaveon December 29th 1959 at the annual meeting of the AmericanPhysical Society at the CaliforniaInstitute of Technology (Caltech) was first published in the February1960 issue of Caltech's *Engineeringand Science*.

费曼先生在1959年提出“纳米技术----物理学的新领域”

“极宏观、极微观、极端条件、极综合交叉”



2024年6月24日，习近平总书记在全国科技大会、国家科学技术奖励大会、两院院士大会上的讲话中指出：

“当前，新一轮科技革命和产业变革深入发展。科学研究**向极宏观拓展、向极微观深入、向极端条件迈进、向极综合交叉发力**，不断突破人类认知边界。”

中国科大计算力学实验室



吴恒安 教授



王奉超 教授 青A
固液界面限域传质



朱银波 特任教授 青B
先进结构材料设计

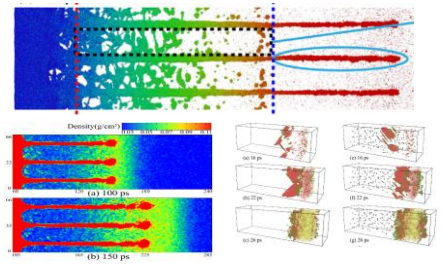


余昊 副教授
计算力学数值方法

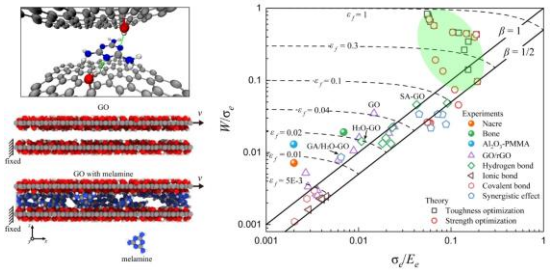


中国科大计算力学实验室

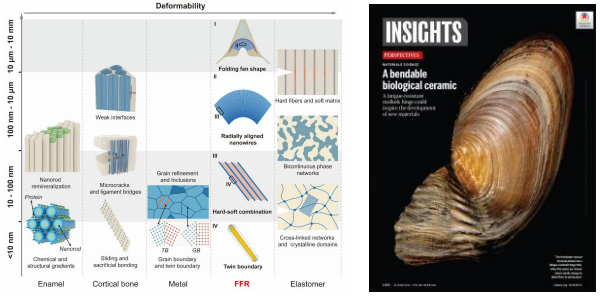
- 材料力学行为和材料力学设计
- 固液界面微尺度力学与限域传质
- 计算力学数值方法及其工程应用



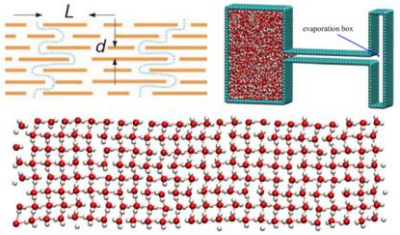
国防科工局科学挑战专题



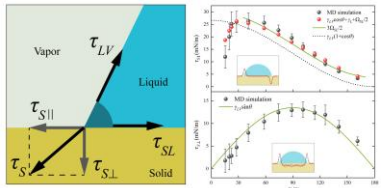
JMPS 2019, 2022



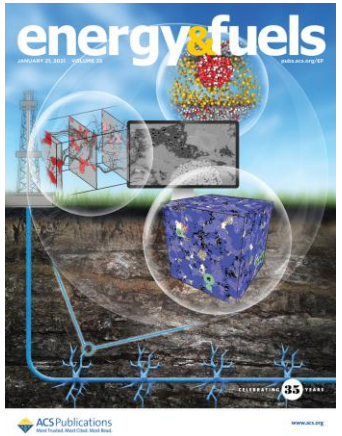
Science 2023



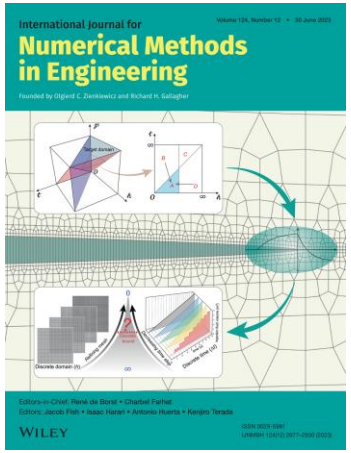
Science 2012



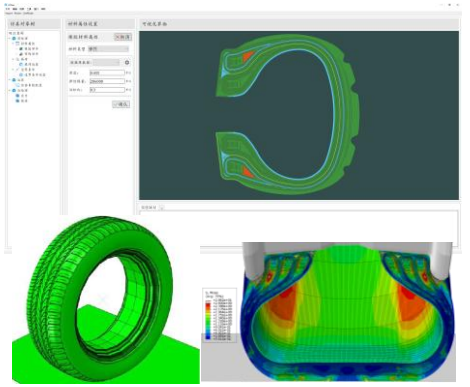
PRL 2020



Energy Fuels 2021



PRL 2026, CMAME 2025, IJNME 2023



中科院先导专项 (航空轮胎)

石墨烯纳通道限域传质

- **访问邀请函**

MANCHESTER 1824

The University of Manchester

Telephone 0161-275 4120 Fax 0161-275 4056 Email: geim@man.ac.uk

Andre K Geim FRS
Langworthy and Royal Society Centennial Research Professor
Director of Manchester Centre for Mesoscience & Nanotechnology
Chair of Condensed Matter Physics

School of Physics
Schuster Building
The University of
Oxford Road
Manchester
M13 9PL

www.manchester.ac.uk



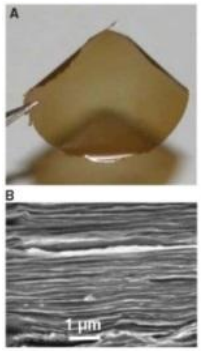
安德烈.盖姆（诺奖得主）

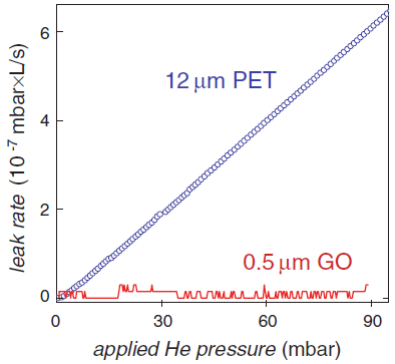
Dr Hengan Wu
Department of Modern Mechanics

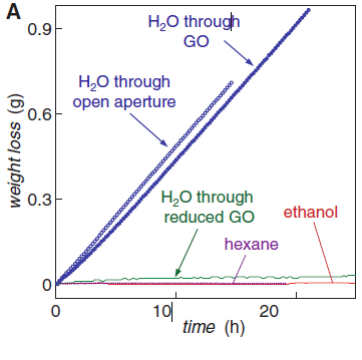
Recently, my focus has started shifting from the electronic properties of graphene to its other aspects, among which are the mechanical properties of this first strictly two-dimensional crystal. I believe that this new area is to start booming within the next few years, the view expressed in my recent review on graphene published in Science this summer. To address the mechanical and thermodynamic properties of graphene would require a theoretical effort that I cannot imagine in this case without numerical modelling. My group does not have yet theoretical tools to progress in this direction. Your Visiting Scholarship would be an ideal match. I have been impressed by your recent work and modelling tools at your disposal. I believe that when working with us you could apply them very successfully for a number of hot experimental topics.

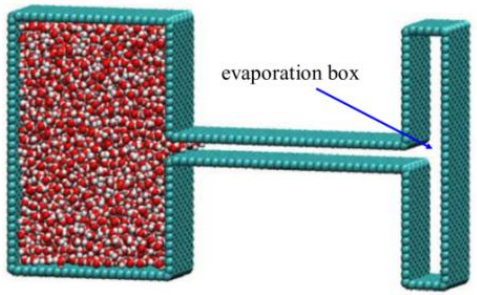
…最近，我的**研究焦点**从石墨烯电学性质转向**力学性质**…理论和数值模拟很重要，**我的实验组不具备相应的力量**，你的访问将是**完美的结合**…我对你最近的**工作印象深刻**…我相信你可以把它们成功应用到很多地方。

氧化石墨烯薄膜的透水机理

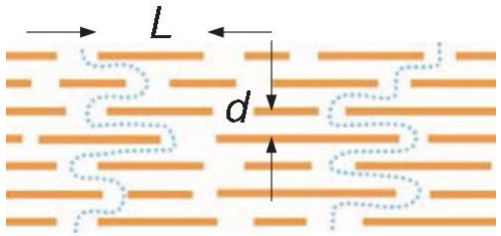




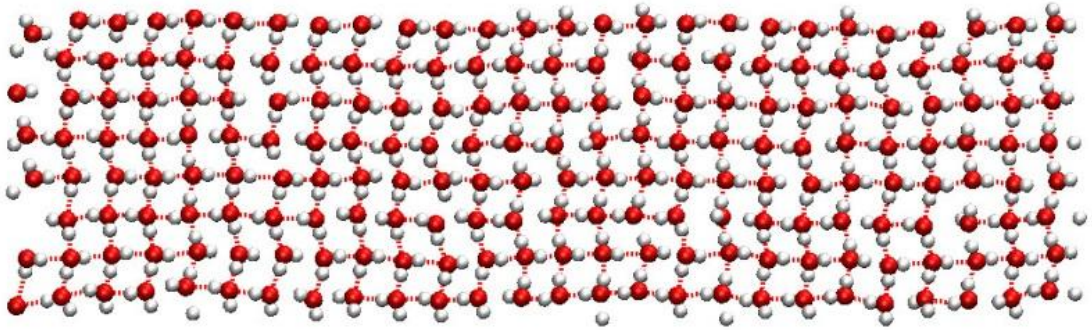




对氦气有超高气密性，却允许水蒸汽快速通过



输运水分子的通道



★理论和实验的结合：对实验进行模拟，提出机理解释，理论指导进一步实验，验证理论。

- **揭示了水在纳通道中特殊的分子形态，发现了纳尺度不同于经典流体力学的流动行为：蒸发和毛细联合驱动水定向输运**

Science, 2012.

氧化石墨烯薄膜的透水机理

- **访问结束时的评价报告**

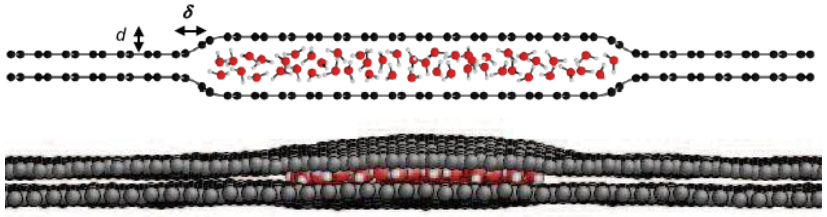
Dr Wu joined us on June 1st 2010. He has worked intensively and successfully from the very start. Previously, we have carried out some work on permeability of water through graphene membranes and obtained interesting but most unexpected results. The mechanism behind this anomalous behaviour was unclear. Dr Wu suggested to simulate the experiment and to develop a theoretical model explaining the unknown mechanism. Dr Wu has managed to solve this problem by using molecular dynamics simulations and further theoretical analysis. The water transport through graphene membranes is found to be driven by capillary-like pressure and limited by an evaporation rate from the surface. This work is currently prepared for submission in a high-quality journal such as Nature or Science. Since our group is experimental and does not have computational facilities, Dr Wu used the facilities of his group in China.



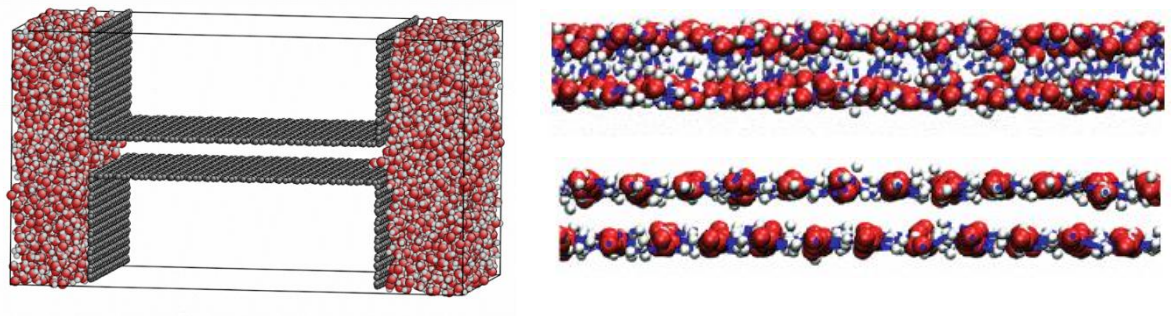
“…… 之前，我们得到一些有趣但出乎意料的实验结果，这些反常行为的机理不明。吴建立理论模型并对实验进行模拟以解释未知的机理。通过分子动力学模拟和进一步的理论分析，吴最终解决了这一问题，发现水在石墨烯薄膜中的输运受毛细压驱动和蒸发速率控制……”

受限水二维方冰结构

- **定义了新的毛细压概念，阐明压力控制机理，理论预测发现了一种新的冰结构，突破了长久以来对冰的已有认识**

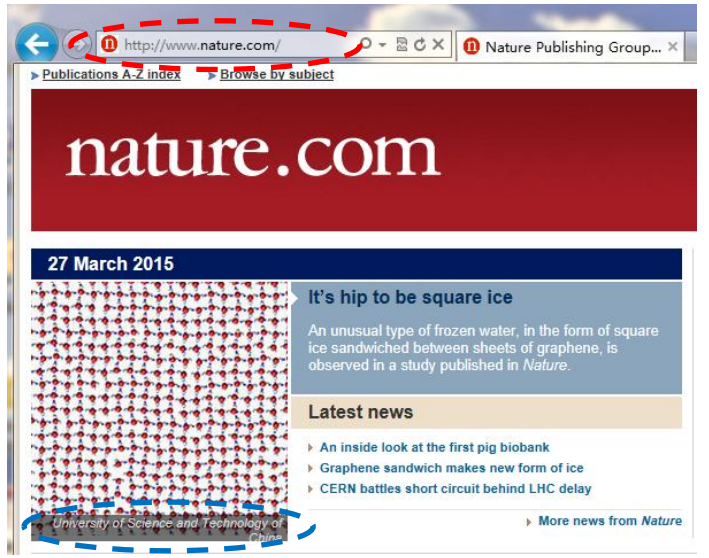


范德华压力概念和计算



受限水的相态受压力控制，在1 GPa附近会发生氢键网络从离面转向面内，形成双层方形冰。

Nature, 2015.





模拟结果图片被**标注中国科大**并在**Nature主页头条重点报道**

报告提纲

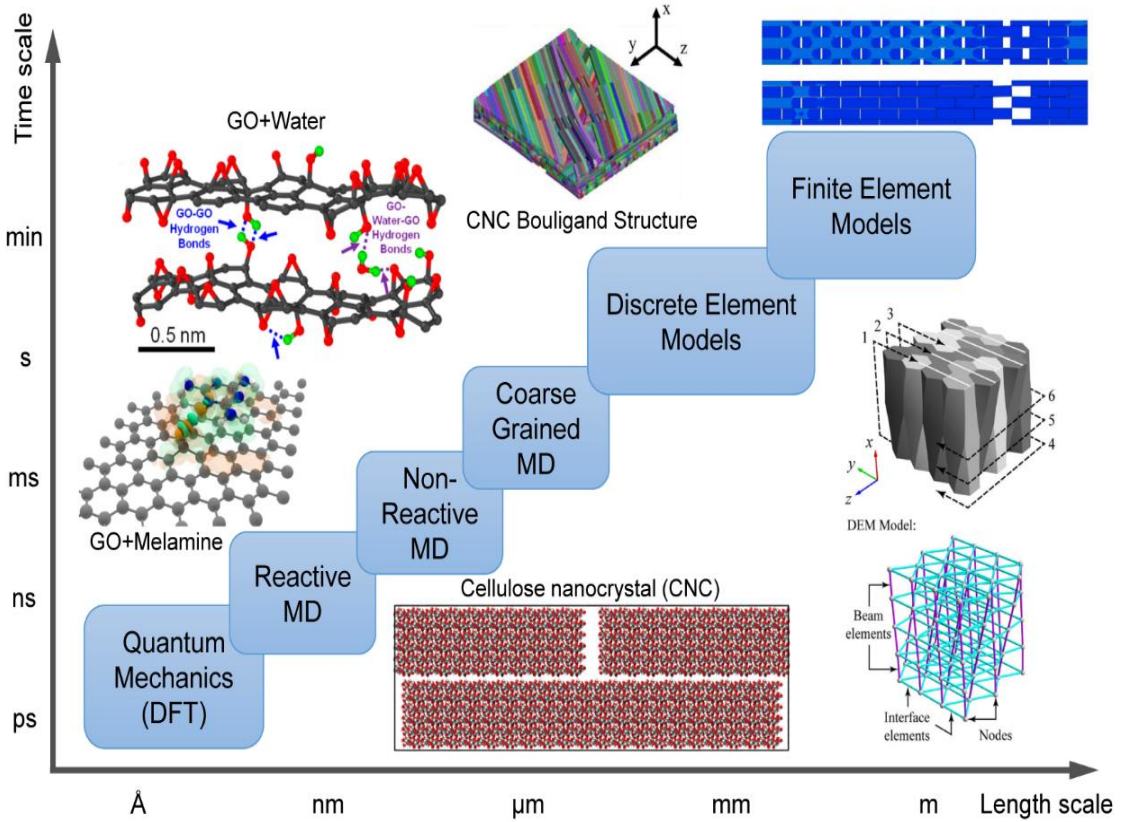
1. 材料多尺度力学建模和设计
   - ① 研究背景
   - ② 微纳结构材料力学设计
   - ③ 纳米孔隙膜材料力学设计
2. 油气开发计算方法及工程应用
   - ① 研究背景
   - ② 数值模型和求解算法
   - ③ 油田现场应用

计算力学指导材料力学设计

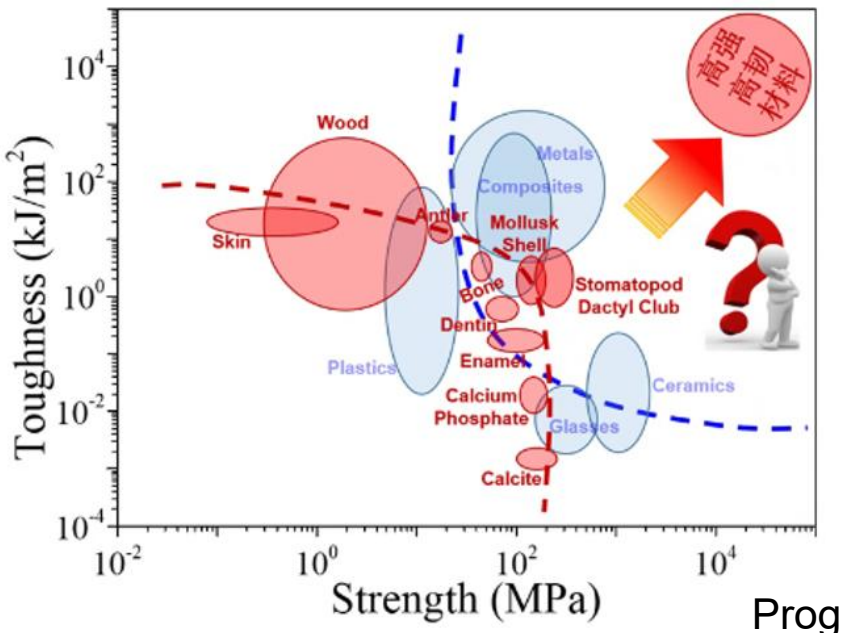
➢ 材料力学设计定量化模型

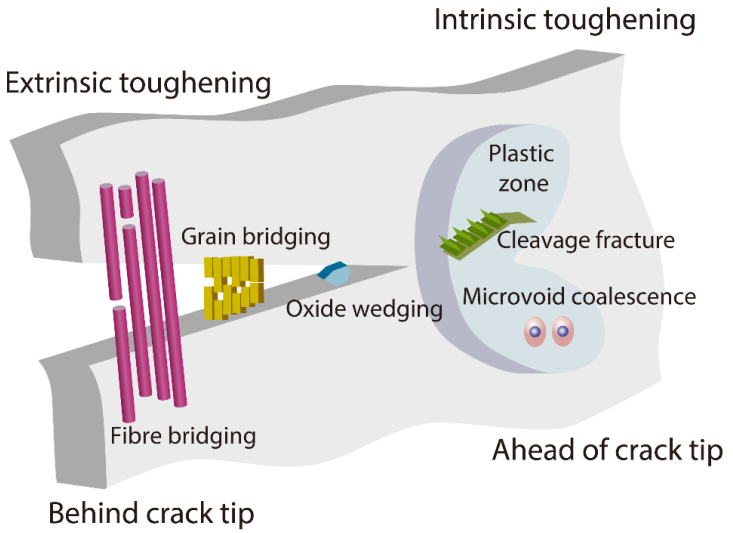


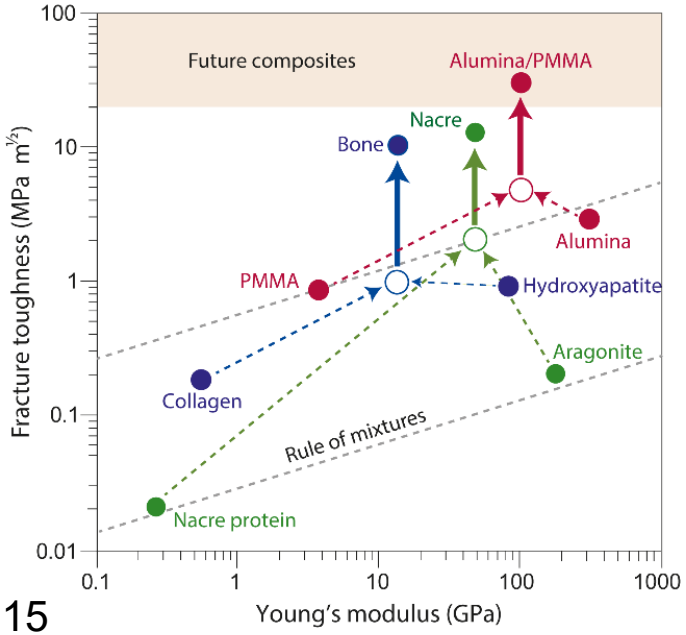
➢ 多尺度数值模拟仿真手段



材料力学设计相关背景简介





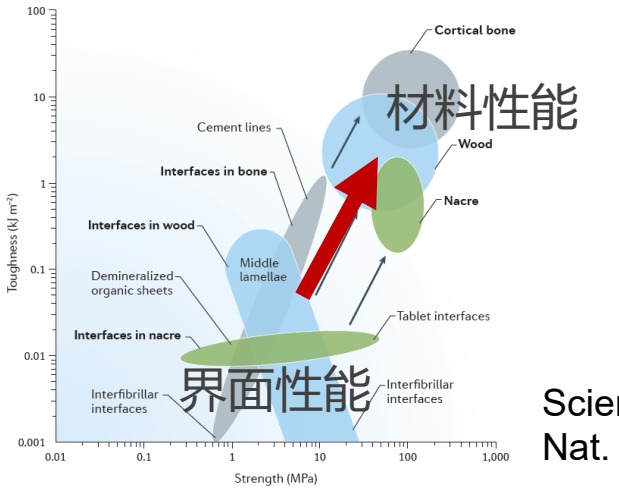


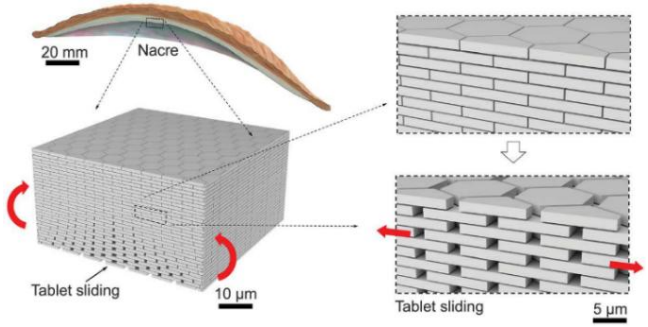
Prog. Mater. Sci., 2009; Nat. Mater., 2011 & 2015

- 先进结构材料设计面临**强韧性互斥的难题**，其根源在于延性材料的韧性主要来源于内在增韧机制，而脆性材料则需要借助外在增韧机制提高韧性
- 生物结构材料通过精细的多层次架构和界面设计有效实现了强度和韧性的协同提升，通过学习生物材料的设计原理，有望实现“师法自然，超越自然”

材料力学设计相关背景简介

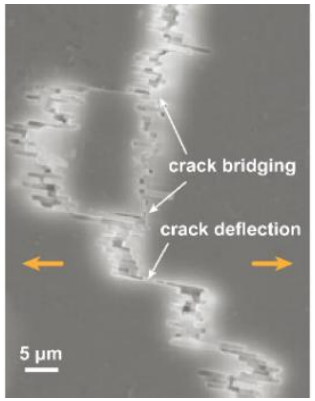
- 生物结构材料普遍存在**弱界面**，与宏观强韧性有密切关联





Science, 2019
Nat. Rev. Mater., 2016

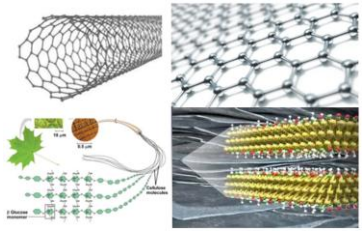
砖块滑移拔出



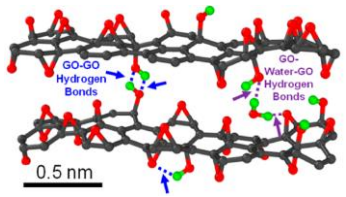
裂纹偏转与桥接

- ✓ 珍珠母微结构增韧关键在于弱界面协同作用促进砖块的滑移拔出；
- ✓ 以石墨烯为代表的高强度纳米片层材料，如何通过界面设计实现宏观材料强韧性同步提升？

- 层状序构材料的“纳米基元-界面-序构”设计



纳米材料



界面设计



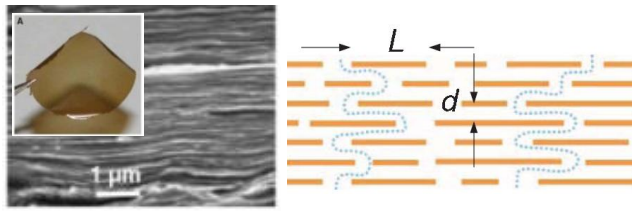
层状序构设计



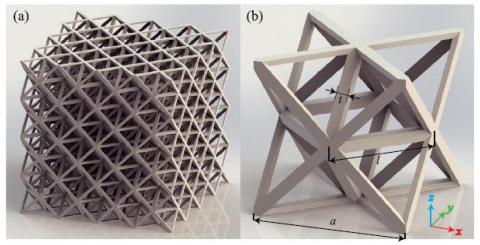
大尺寸、高力学性能层状序构材料

- 界面太强会导致砖块片层过早断裂，界面太弱会导致结构承载力严重不足

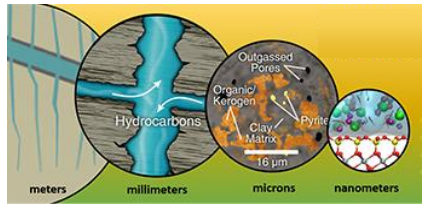
多孔材料相关研究背景简介



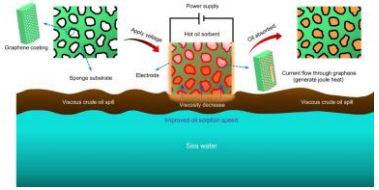
膜材料与限域传质



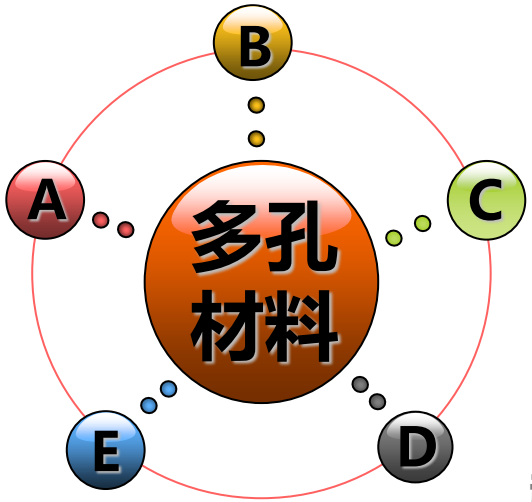
轻质、强韧超材料

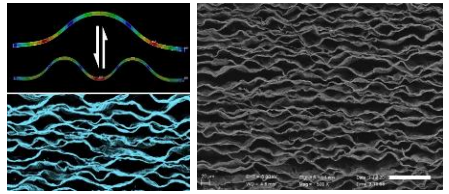


非常规油气开采



功能性吸附材料



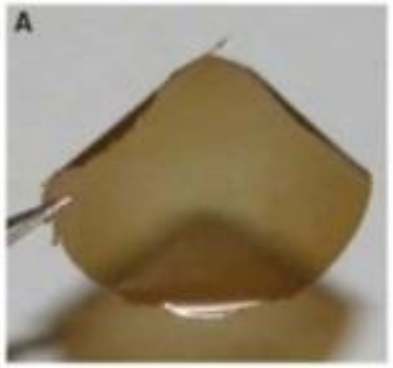


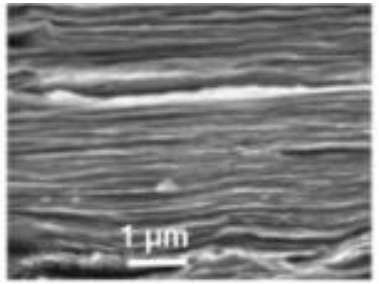
超弹性耐疲劳气凝胶

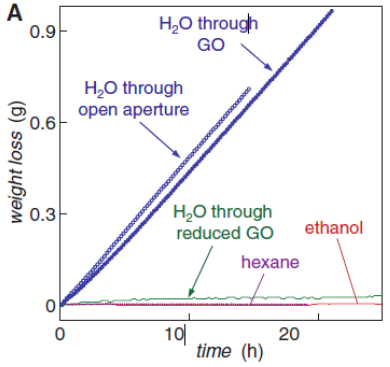
多孔材料具有丰富的微纳尺度孔隙，在航空航天、清洁能源、化工等领域具有广泛应用，通常涉及物质和能量交换以及表界面相关物理力学过程，计算力学通过多尺度数值模拟仿真能够阐明相应的宏微观力学机制。

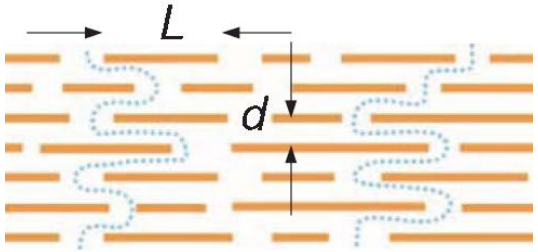
纳米孔隙膜材料力学设计相关背景简介

- 二维材料中形成的纳米通道可实现快速水输运和离子筛选

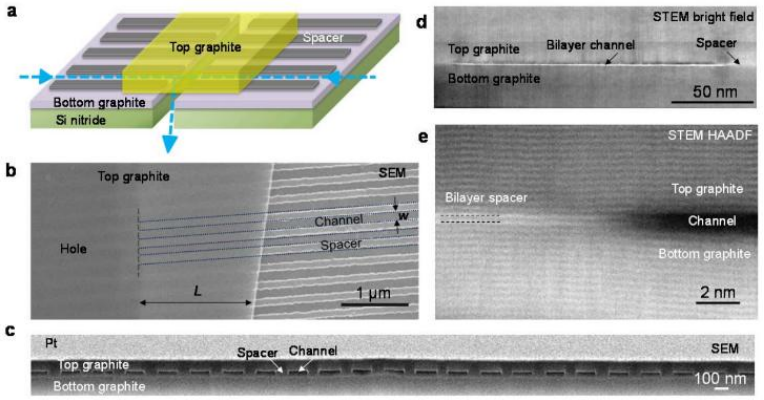


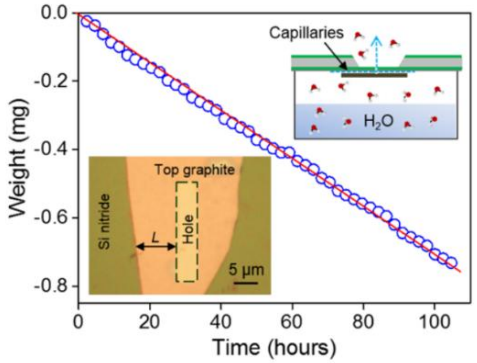


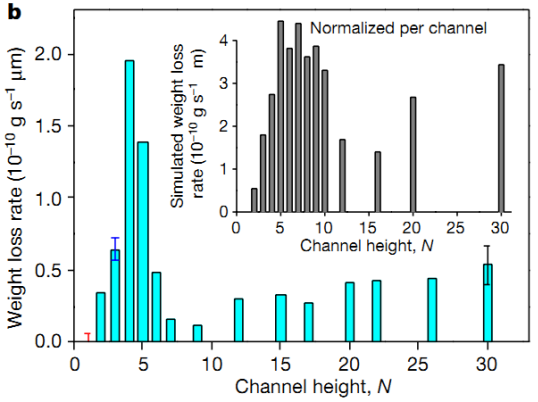




- 纳米通道的反常输运行为和限域力学经典理论拓展







- ✓ 快速水输运和离子筛选的关键在于纳米通道尺寸的精确控制；
- ✓ 如何通过纳米限域力学和固液界面相关基础理论研究实现纳米孔隙膜的高通量限域传质？

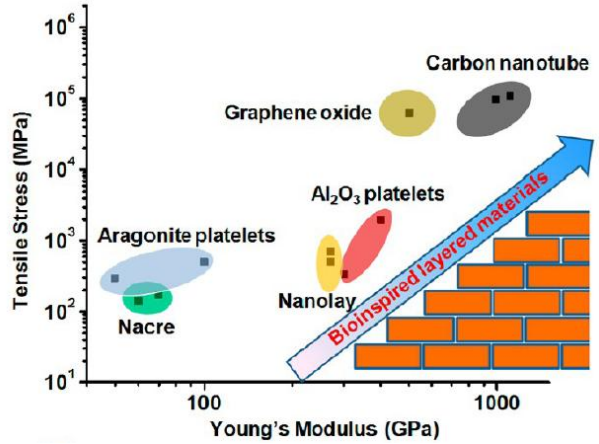
- 纳米孔隙膜的高通量限域传质行为涉及纳米限域和固液界面相关基础难题

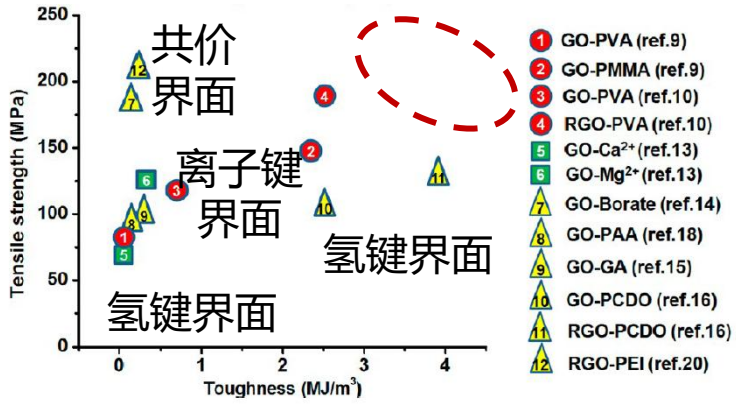
报告提纲

1. 材料多尺度力学建模和设计
   - ① 研究背景
   - ② 微纳结构材料力学设计
   - ③ 纳米孔隙膜材料力学设计
2. 油气开发计算方法及工程应用
   - ① 研究背景
   - ② 数值模型和求解算法
   - ③ 油田现场应用

层状序构材料强韧化设计的跨尺度力学思路

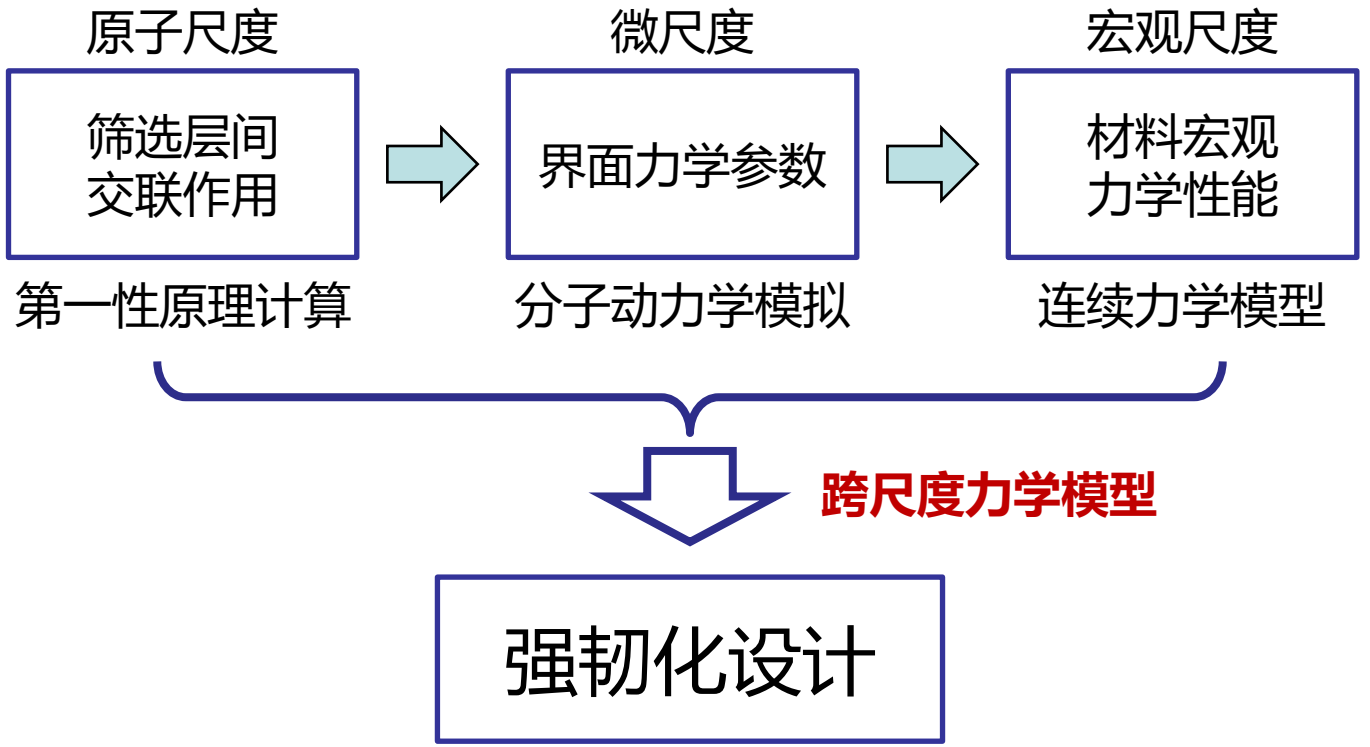
- 面临的问题：氢键界面普遍较弱导致**强度低**；共价键界面太强会导致**韧性很低**





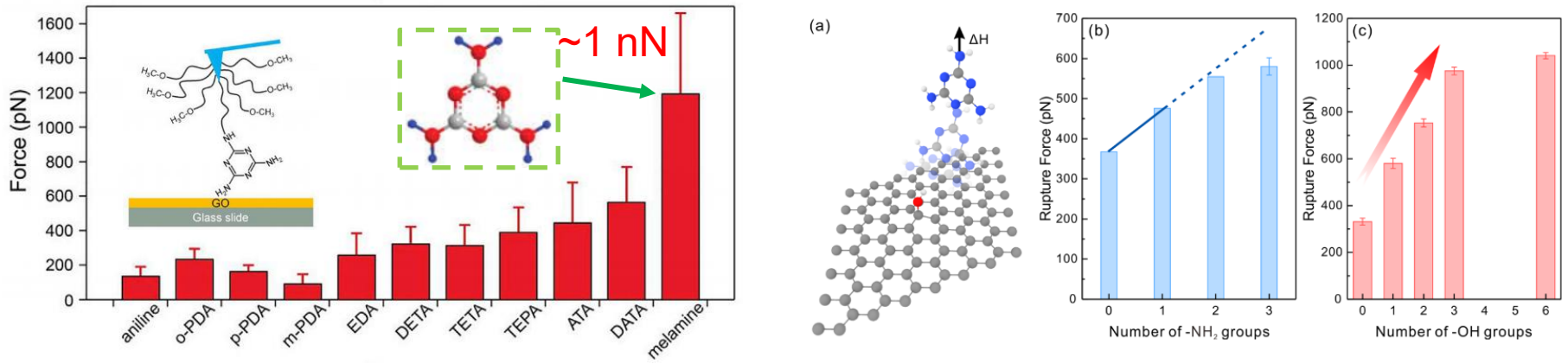
Acc. Chem. Res., 2014

✓解决思路：界面作用强并且界面可滑移重构



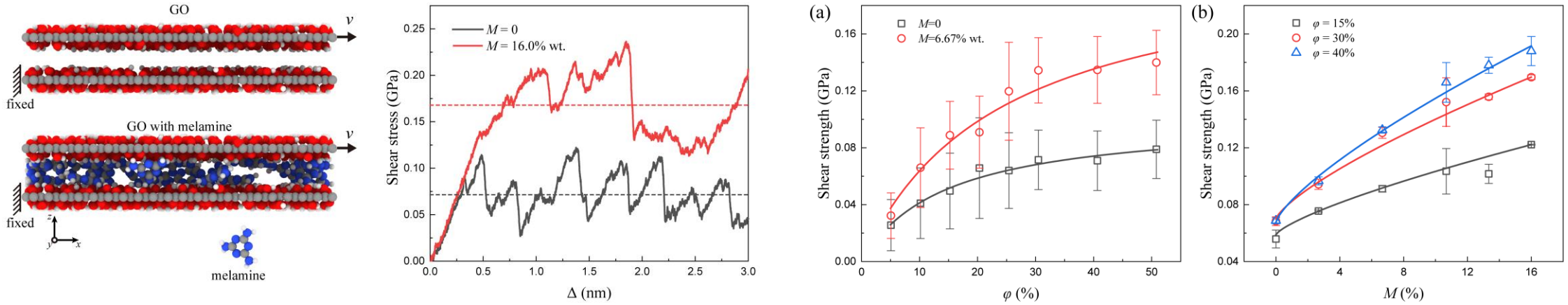
层状序构材料非共价界面分子尺度力学机制

- 通过实验和第一性原理计算筛选小分子，发现三聚氰胺分子与氧化石墨烯形成强非共价作用



Melamine与GO的非共价作用可以达到1 nN水平，接近于共价键强度

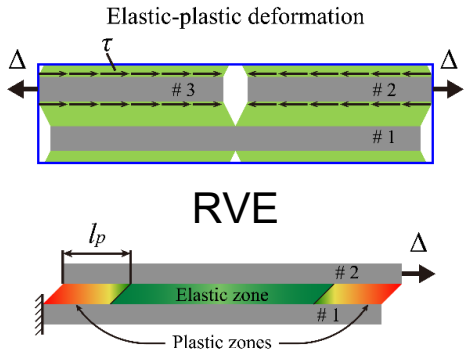
- 通过分子动力学模拟发现Melamine可以显著提高GO片层间的界面力学性能

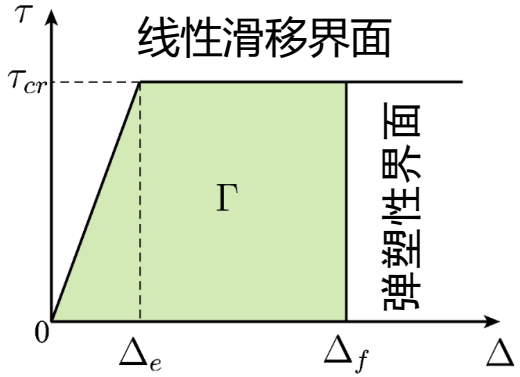


ACS AMI, 2019.

层状序构材料耦合界面滑移的非线性剪滞模型

➢ 弹塑性变形阶段





等效单元体的有效强度σ_e与界面力学参数（剪切强度τ_{cr}、剪切韧性Γ）和片层尺寸l_g的关系：

$$\sigma_e = \sigma_e(\tau_{cr}, \Gamma, l_g)$$

强度与界面力学性质

$$\sigma_e = \min\begin{cases} \dfrac{\Phi\sigma_{cr}}{2}, & \text{mode G} \\ \dfrac{2\Phi\tau_{cr}l_0}{h_g}\left\{2\bar{l}_p^{\,m}k + \tanh\left[\dfrac{1}{2}k\left(1-4\bar{l}_p^{\,m}\right)\right]\right\}, & \text{mode I} \end{cases}$$

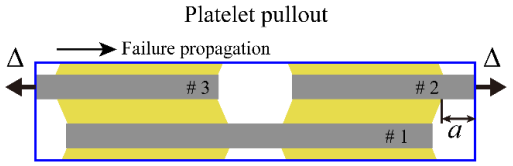
石墨烯断裂

界面失效或全局滑移

界面韧性与塑性变形

$$\bar{\Gamma} = 1 + 4\bar{l}_p^{\,m2}k^2 + 4\bar{l}_p^{\,m}k\tanh\left[\frac{1}{2}k\left(1-4\bar{l}_p^{\,m}\right)\right]$$

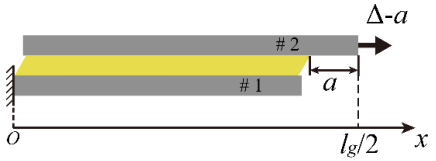
➢ 片层均匀拔出阶段



系统势能

$$U_{tot} = \boxed{U_E} + \boxed{2\Gamma_{int}b\left(\frac{l_g}{2} - a\right)}$$

弹性能　黏附能



稳定性分析：施加小扰动 $\delta = \Delta - a$

$$\delta U_{tot} = 0, \text{平衡}$$

$$\delta^2 U_{tot} = \begin{cases} >0, & \text{稳定} \\ <0, & \text{不稳定} \\ =0, & \text{亚稳态} \end{cases}$$

临界拔出长度 a_f：　$k(1+2\bar{a}_f) - \sinh[k(1-2\bar{a}_f)] = 0$

等效单元体的有效应力σ_{ea}关于拔出长度为a的函数可通过将$\sigma_e = \sigma_e(\tau_{cr}, \Gamma, l_g)$中的$l_g$替换为$l_g - 2a$来得到，即：

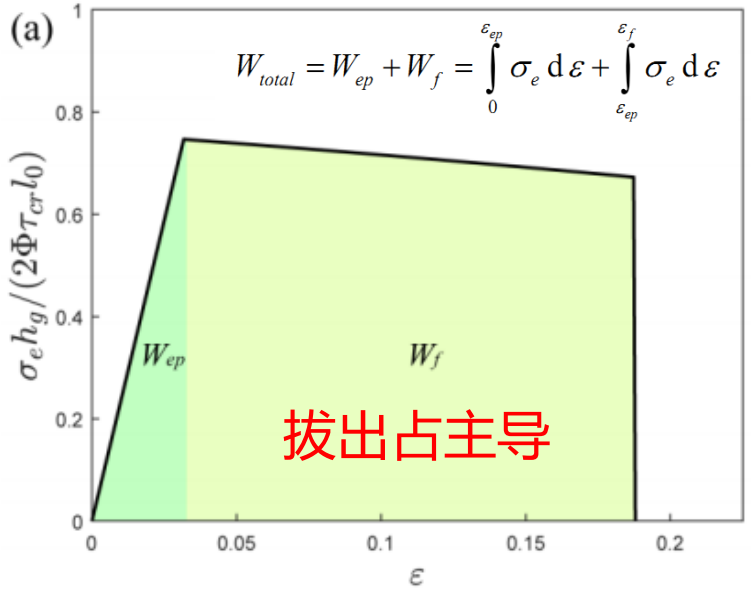
$$\bar{\Gamma} = 1 + 4\bar{l}_p^{\,m2}k^2(1-2\bar{a})^2 + 4\bar{l}_p^{\,m}k(1-2\bar{a})\tanh\left[\frac{1}{2}k(1-2\bar{a})\left(1-4\bar{l}_p^{\,m}\right)\right]$$

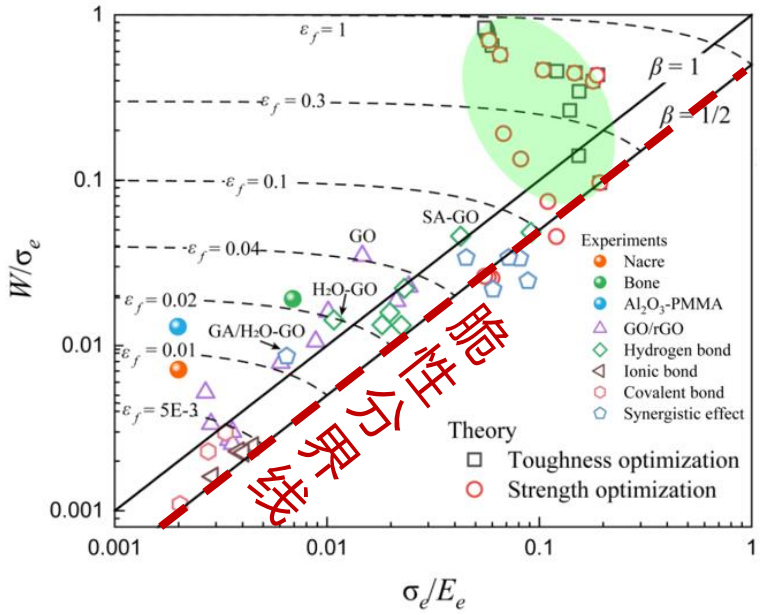
$$\sigma_{ea} = \frac{2\Phi\tau_{cr}l_0}{h_g}\left\{2\bar{l}_p^{\,m}k(1-2\bar{a}) + \tanh\left[\frac{1}{2}k(1-2\bar{a})\left(1-4\bar{l}_p^{\,m}\right)\right]\right\}$$

结合弹塑性变形阶段和片层均匀拔出阶段的变形分析，可以得到完整的有效应力应变曲线。

层状序构材料强韧化设计的宏微观内在关联

- 基于非线性剪滞模型得到的韧性计算公式，提出了一个新的标度律作为关联仿贝壳层状序构材料的宏观力学性能和微观非弹性变形之间关系的准则





宏观力学性能与微观变形失效的关联：

$$W \sim \frac{\sigma_e^2}{2E_e} + \left(\varepsilon_f - \varepsilon_{ep}\right)\sigma_e$$

标度律：

$$W/\sigma_e \sim \beta\left(\sigma_e/E_e\right)$$

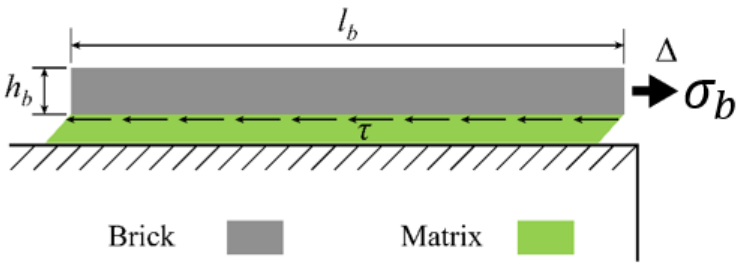
$$\beta \sim \varepsilon_f/\varepsilon_{ep} - 1/2$$

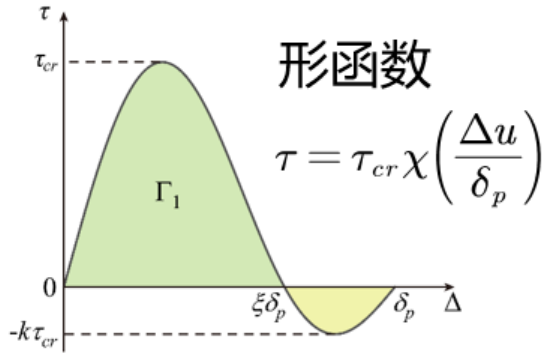
片层滑移拔出消耗的能量占断裂功的主要部分，该标度律通过关联宏观韧性和强度与微观变形模式，能够一定程度上揭示层间滑移等塑性形变对石墨烯基层状序构材料强韧性优化的贡献。

J. Mech. Phys. Solids, 2019.

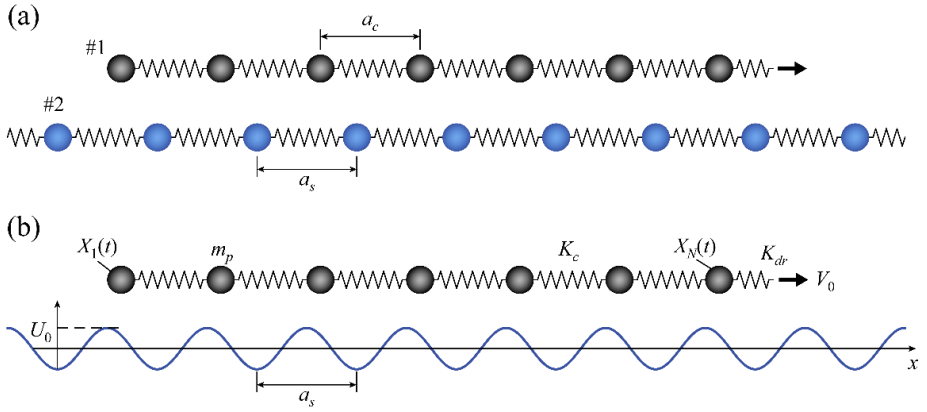
层状序构材料强韧化设计的跨尺度力学模型

➢ 一般剪滞模型（RVE尺度）

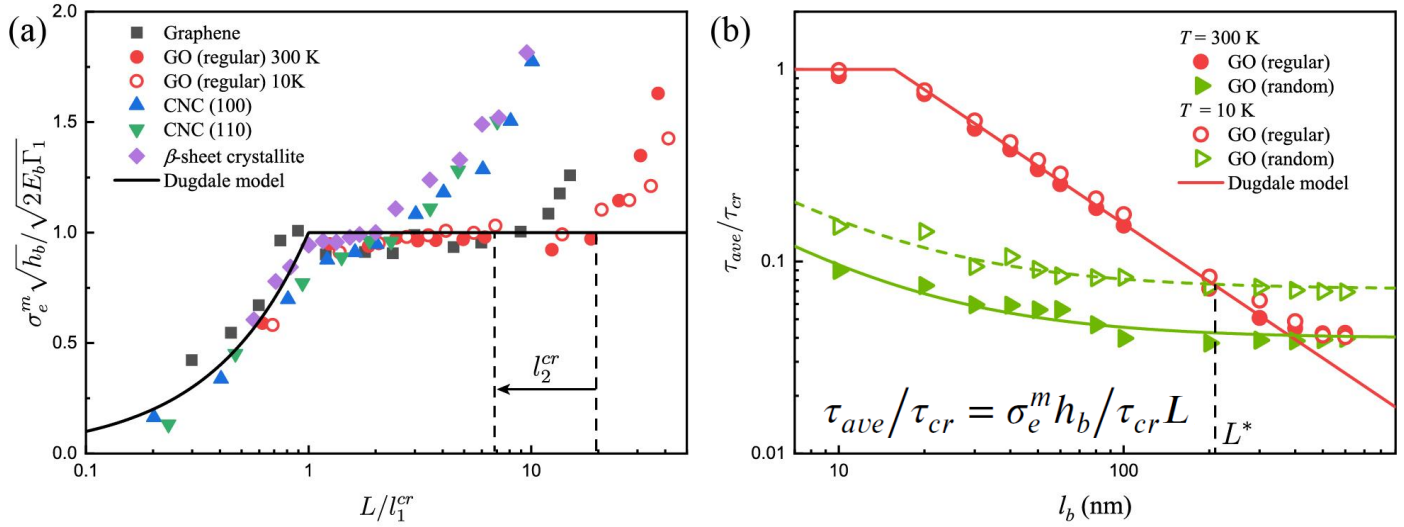




➢ Frenkel-Kontorova模型（跨尺度）



➢ 关键特征尺寸



- 规则界面存在三种变形模型：
  (1) 均匀　$L < l_1^{cr}$
  (2) 局域化　$l_1^{cr} < L < l_2^{cr}$
  (3) 扭结　$L > l_2^{cr}$
- 随机界面表现为均匀滑移

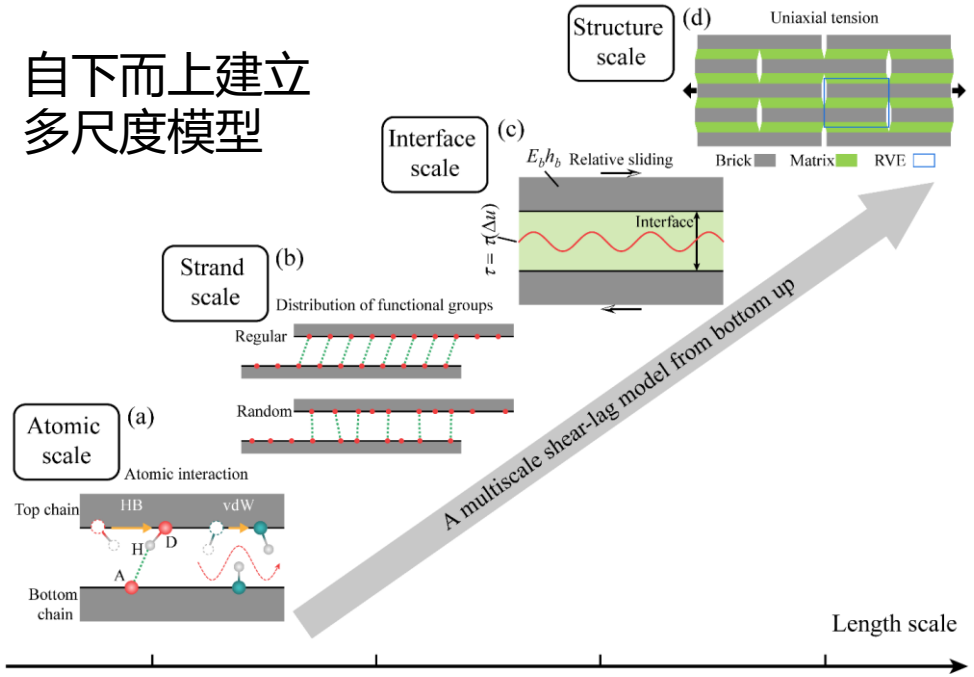
$$\sigma_s^m = \begin{cases} \dfrac{\tau_{cr} l_b}{h_b}, & l_b \le l_1^{cr} \\ \sqrt{\dfrac{2E_b\Gamma_1}{h_b}}, & l_b > l_1^{cr} \end{cases}$$

Dugdale 模型

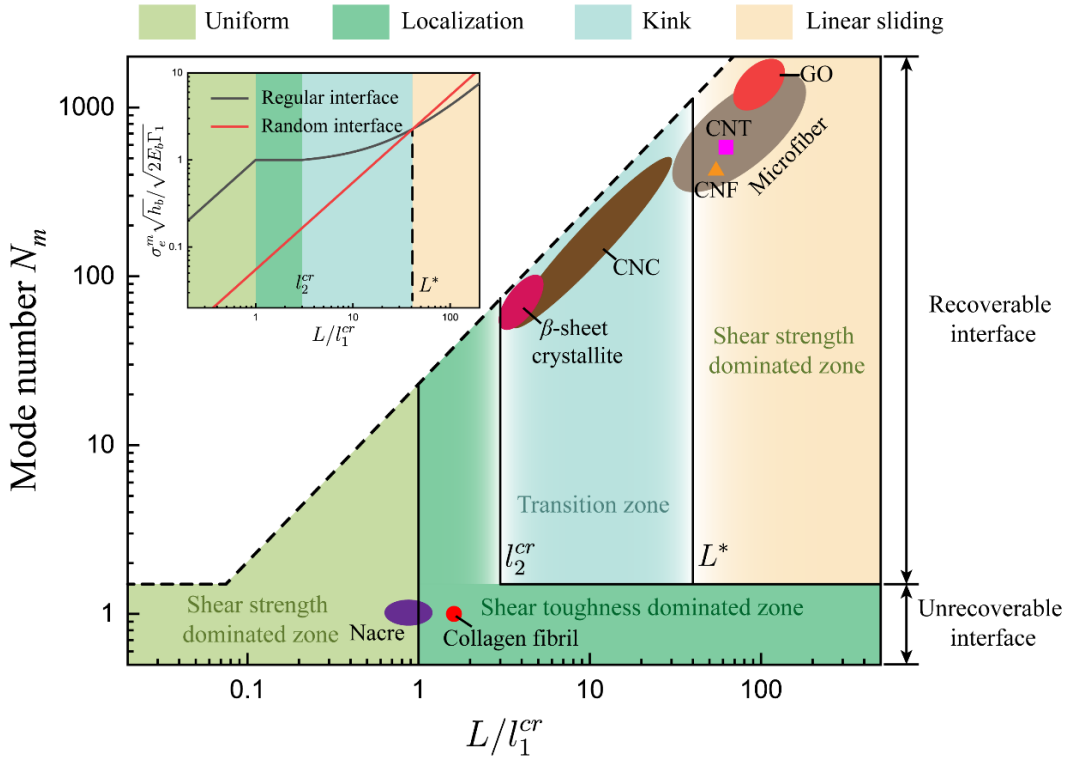
l_1^{cr}：临界滑移长度；l_2^{cr}：临界转换长度

层状序构材料强韧化设计的跨尺度力学模型

- 砖块-界面系统中非共价界面的自下而上的多尺度力学分析框架



- 基于界面变形模式和关键特征长度给出材料设计相图



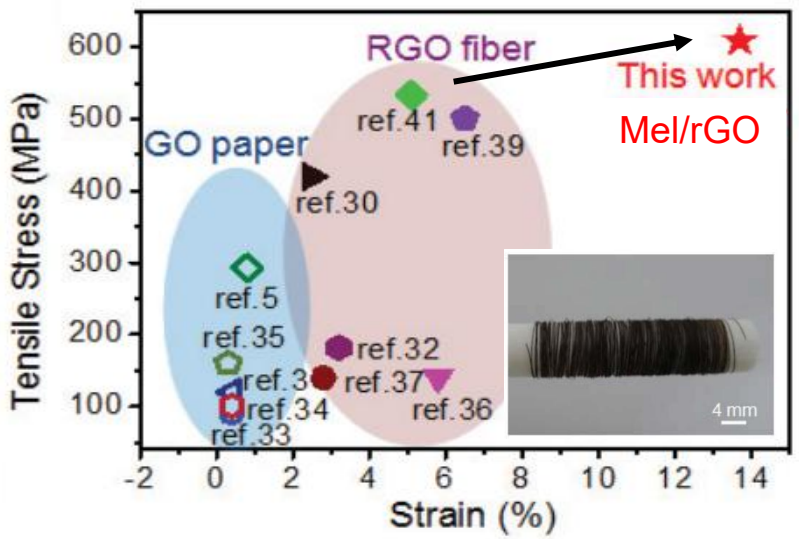
✓ 建立材料宏观力学性能与非共价界面分子机制之间的联系

✓ 汇总了不同长度尺度下界面类型，变形模式和材料性能之间的关系，提供了材料设计图景

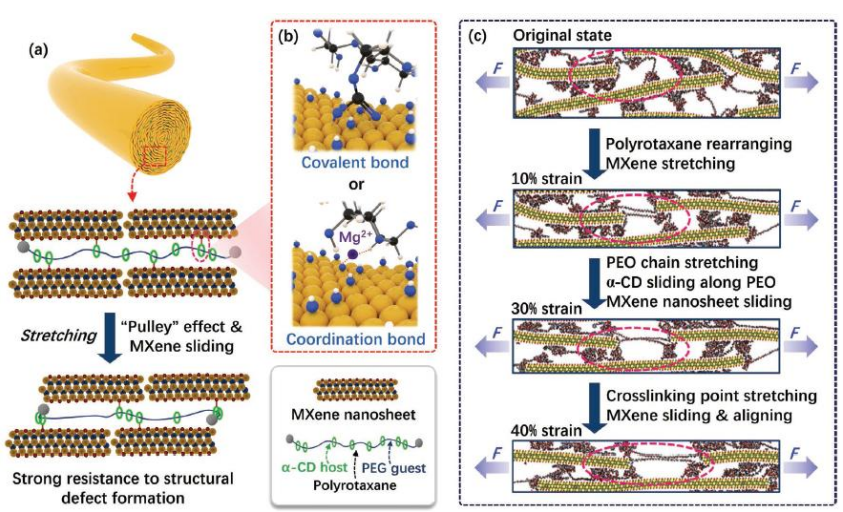
J. Mech. Phys. Solids, 2022.

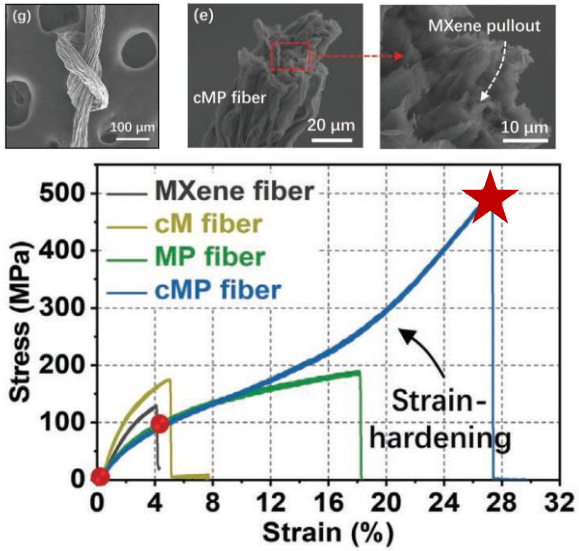
层状序构材料强韧化设计的相关应用

- 高强高韧Melamine/rGO纤维



- 高强高韧MXene纤维强非共价界面设计





在湿法纺丝过程中加入三聚氰胺小分子，可以大幅提升石墨烯基序构材料的断裂韧性；
通过设计“滑移牵引”强非共价界面，使得MXene纤维的强度和韧性同时大幅度提升。

Adv. Mater., 2023.　　*Nat. Commun.*, 2025.

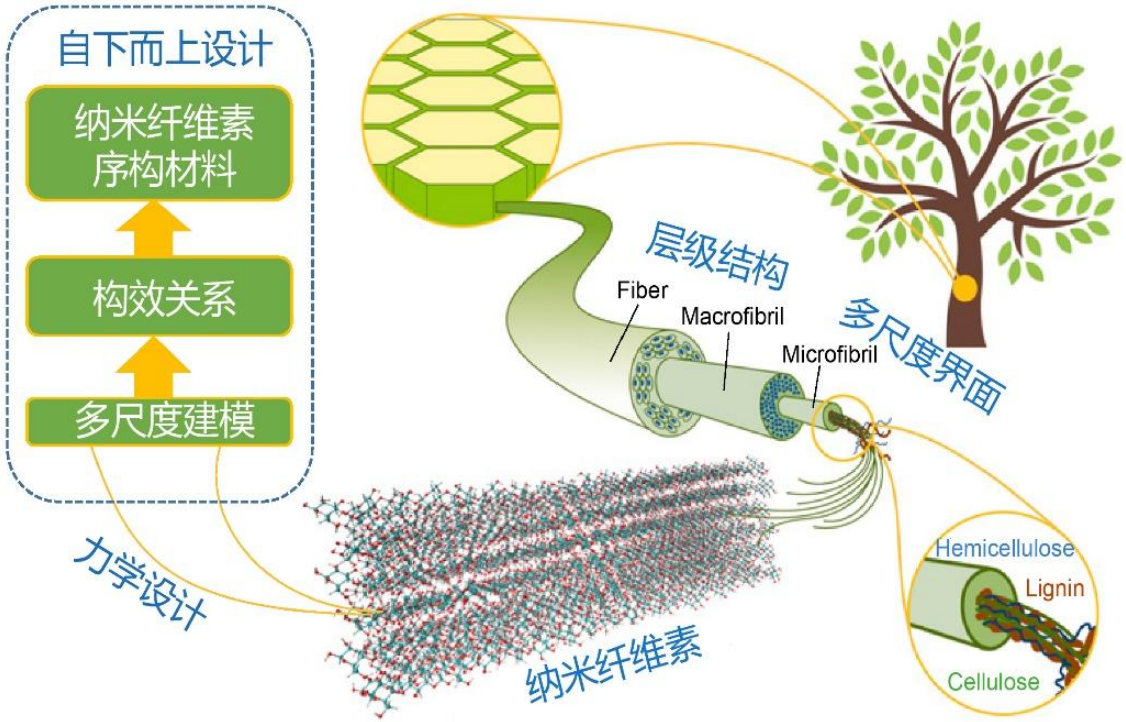
纳米纤维素序构材料从强韧化设计到高效降解

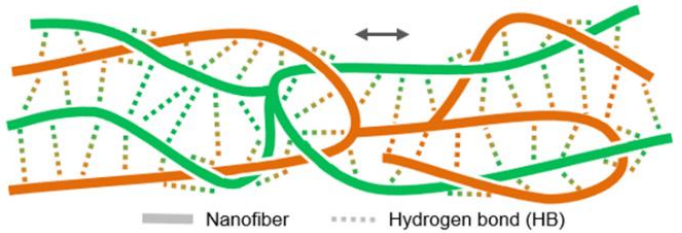
非共价界面
多层级微结构

多尺度力学

理论建模+实验验证

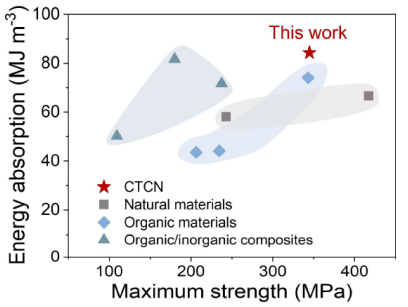
理性设计



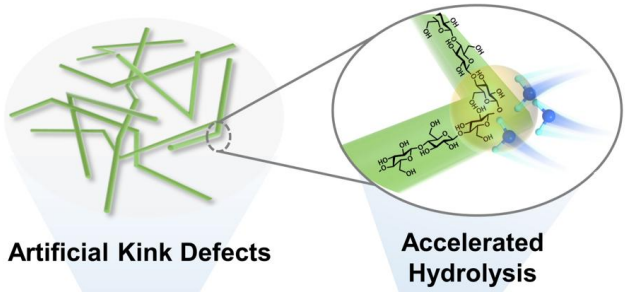


微结构
调控





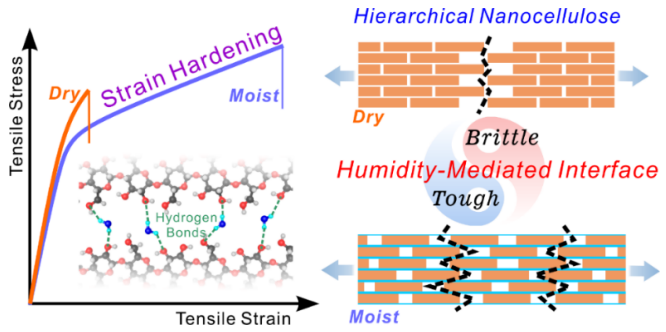
强韧化
设计



高效
降解

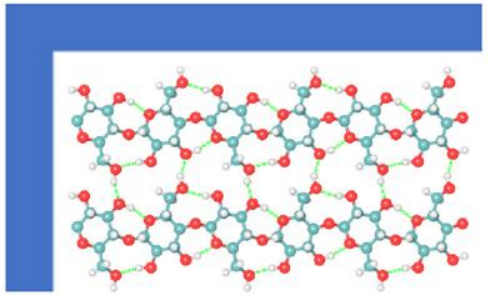
构建了纳米纤维素材料从高性能构筑到高效降解的可持续设计框架

纳米纤维素序构材料从强韧化设计到高效降解



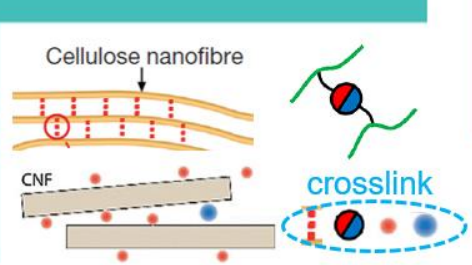
□ 强韧化设计：
自下而上

分子尺度



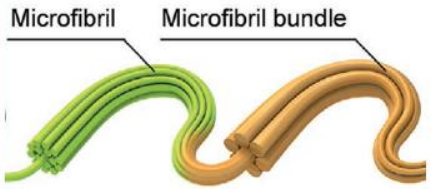
➢ 氢键构型

纳米尺度



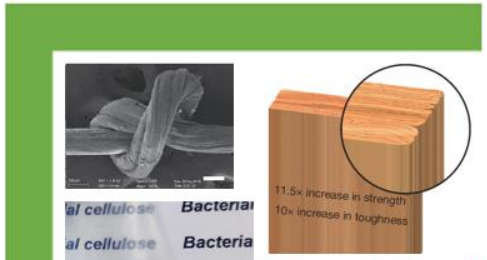
➢ 不同类型界面交联

细观尺度



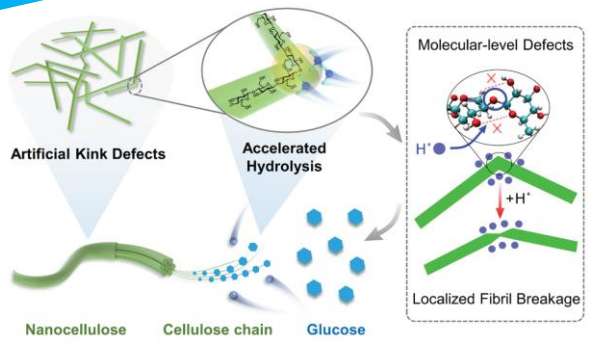
➢ 界面本构

宏观尺度



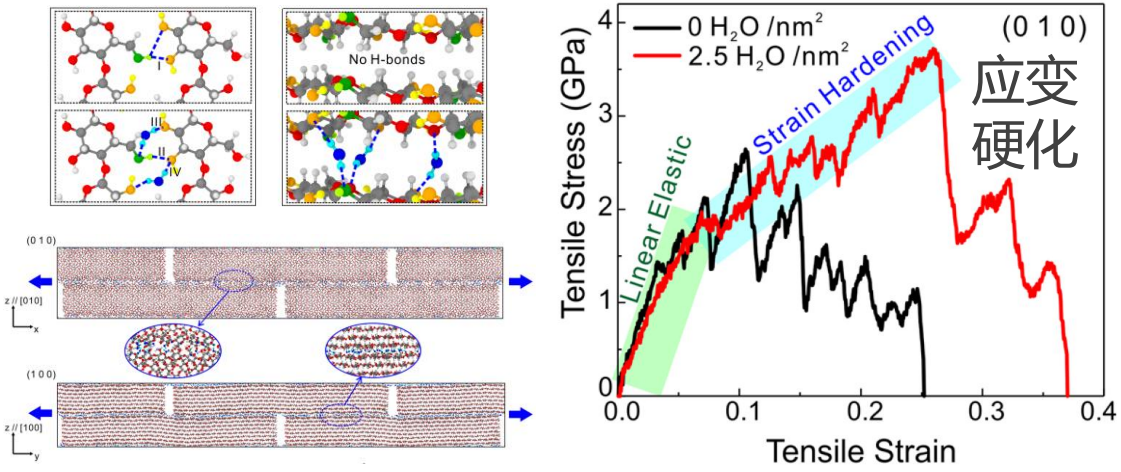
➢ 强韧化设计

□ 高效降解：
自上而下

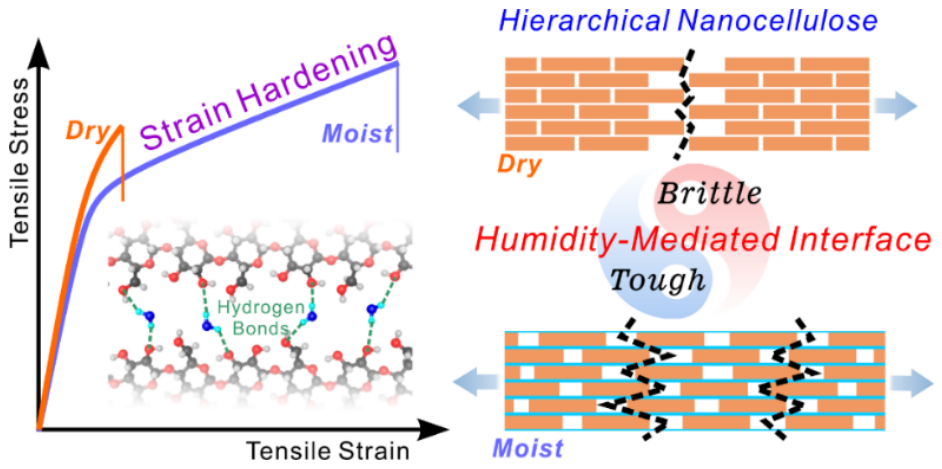


纳米纤维素序构材料湿度界面调控强韧化设计

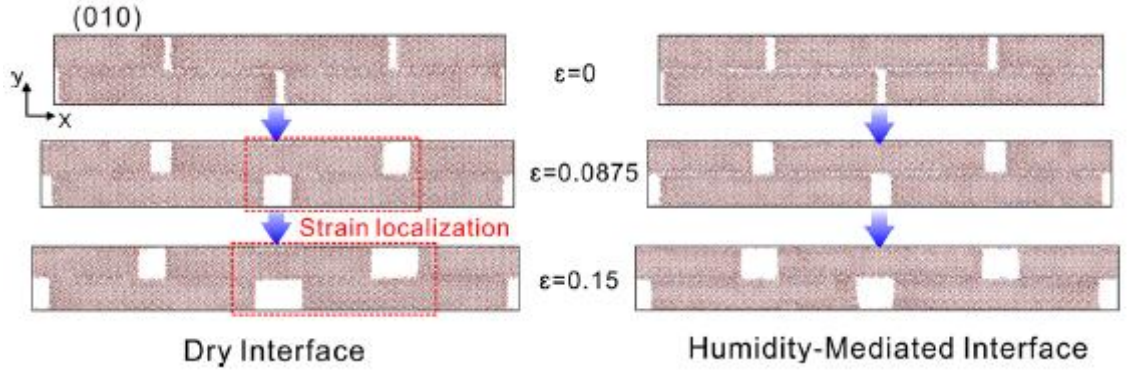
➢ 纳米纤维素湿度界面的分子机制



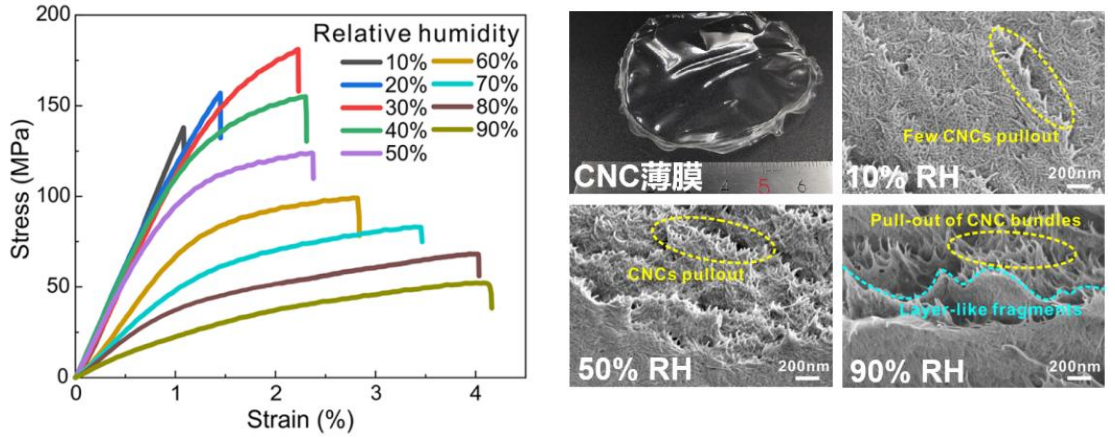
➢ 湿度界面应变硬化与变形模式



➢ 变形模式：应变局域化→非局域化



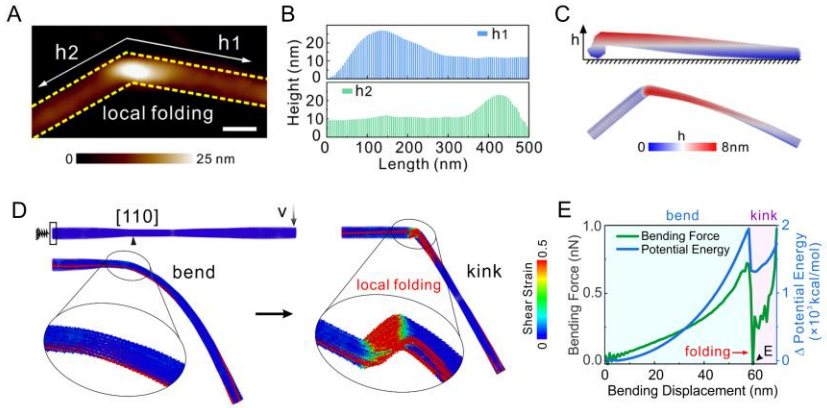
➢ 实验验证



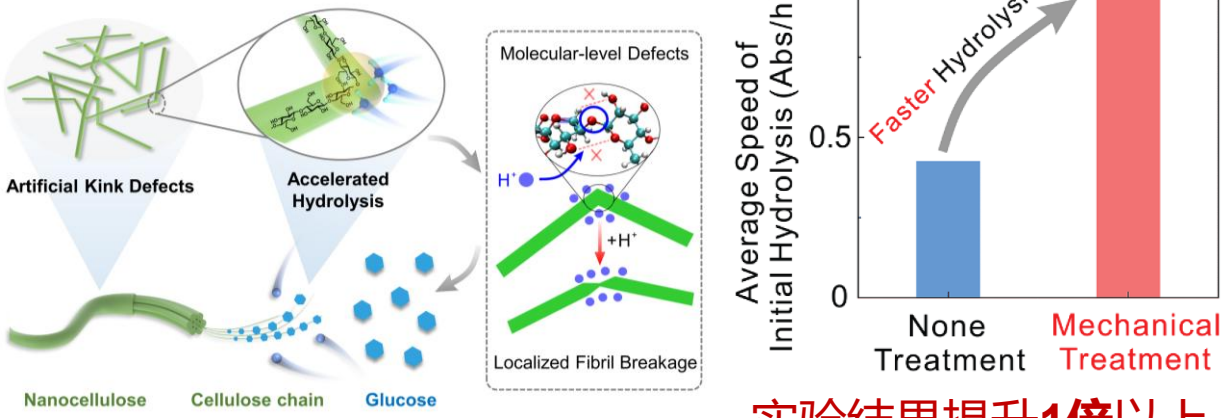
ACS Nano, 2021.

弯折缺陷促进纳米纤维素高效水解的力化学机制

➢ 弯折缺陷形貌表征和微观机理

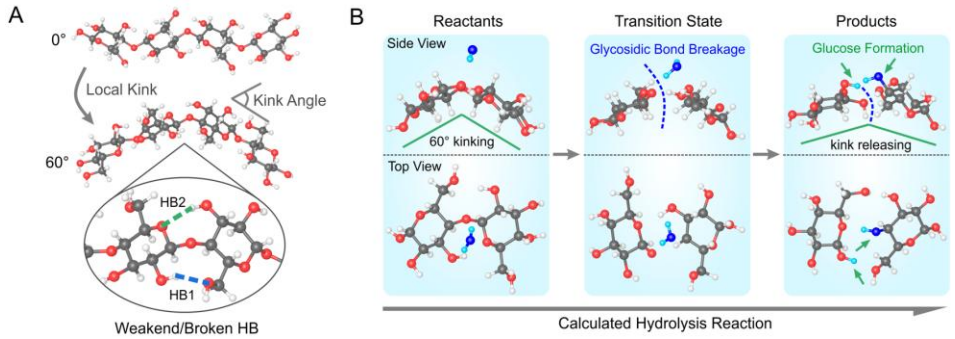


➢ 力化学策略实现水解效率的显著提升



实验结果提升**1倍**以上

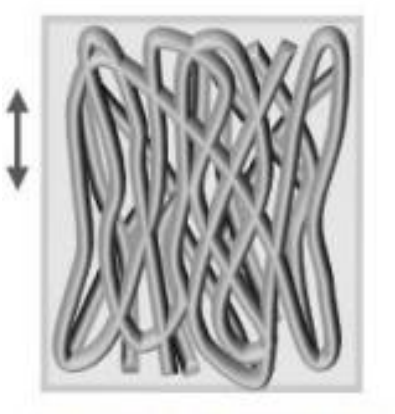
➢ 弯折缺陷促进水解的力化学机理



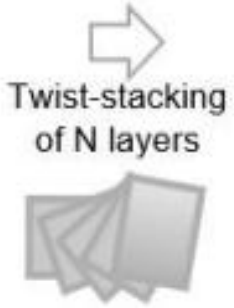
- ✓ 阐明了机械处理诱导纳米纤维素形成不同典型弯折缺陷的微观力学机制，揭示了微结构弯折变形促进水解活化的力化学机理
- ✓ 结合原位水解实验验证，提出了利用人工弯折缺陷大幅提升纳米纤维素水解效率的新方法

Matter, 2025.

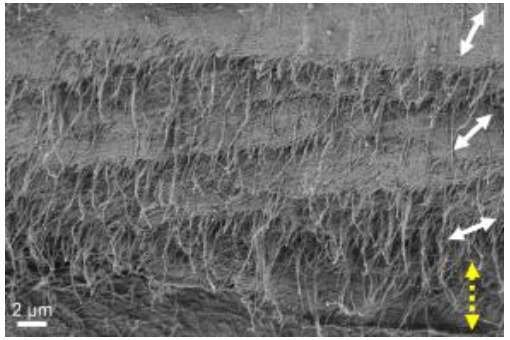
纳米纤维素序构材料多尺度力学与强韧化设计

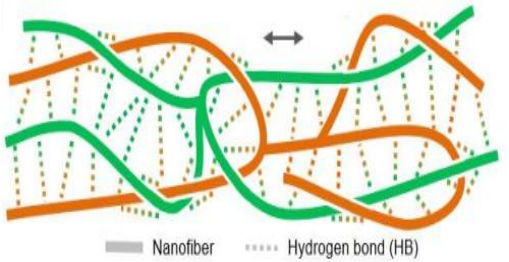


“适度有序” 序构

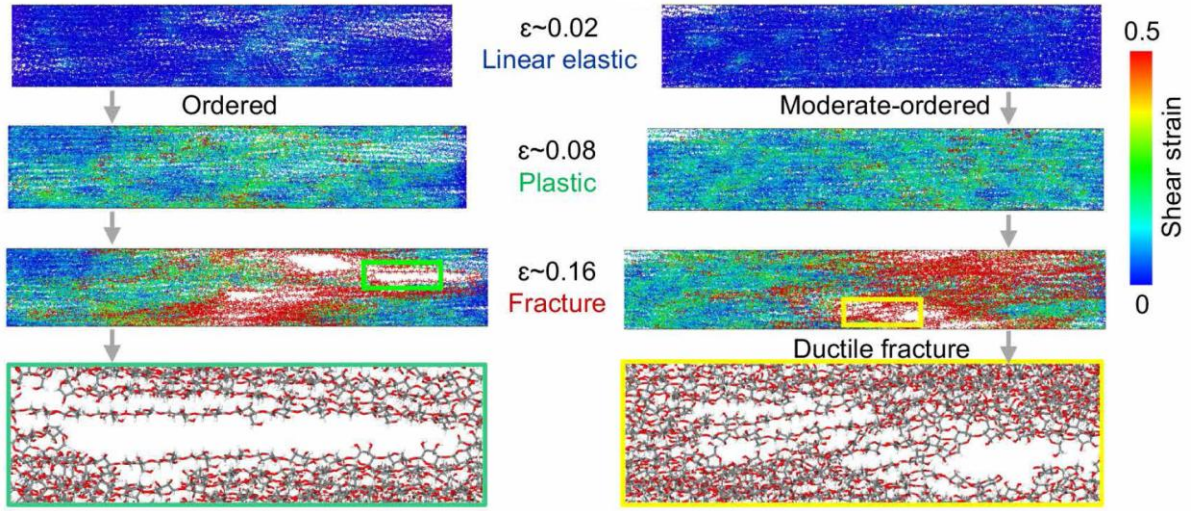




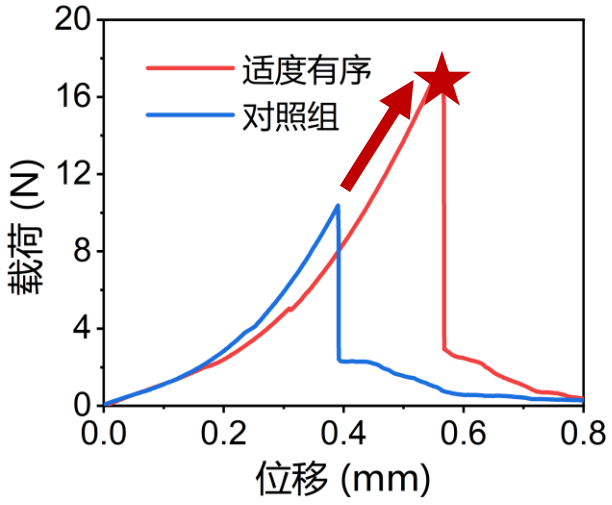




纳米纤维素氢键网络



界面重构与基元协同变形

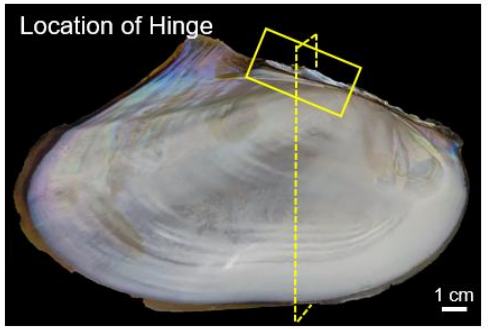


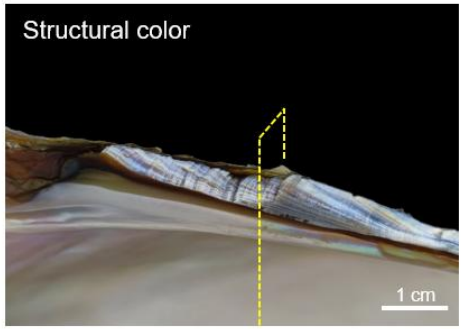
显著增强、增韧

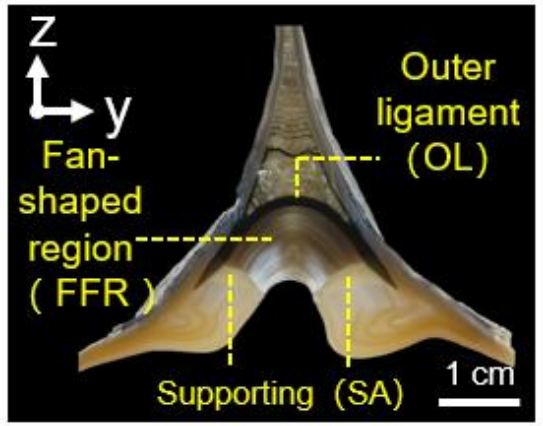
Sci. Adv., 2024.

贝壳铰链生物陶瓷的优异耐疲劳性能表征

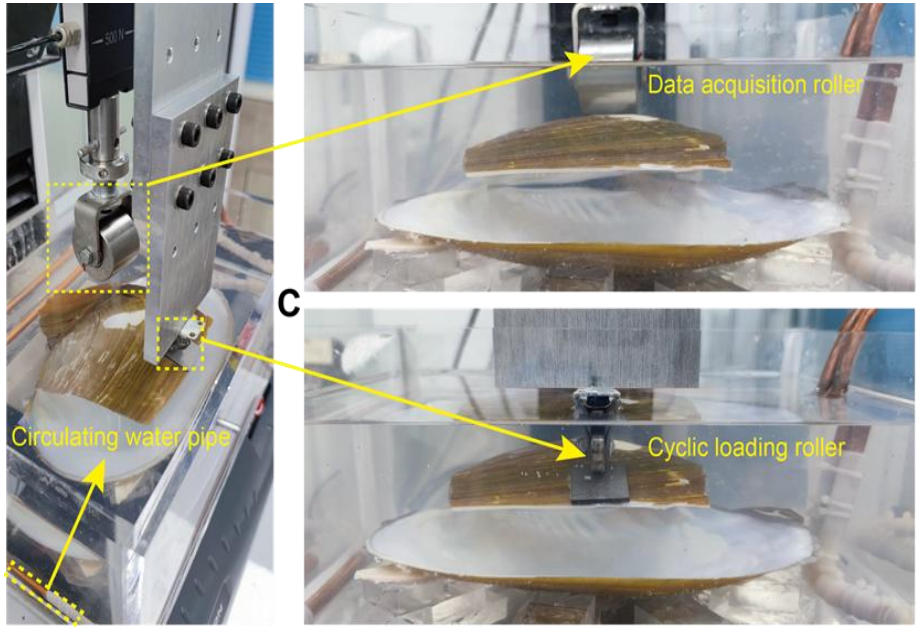


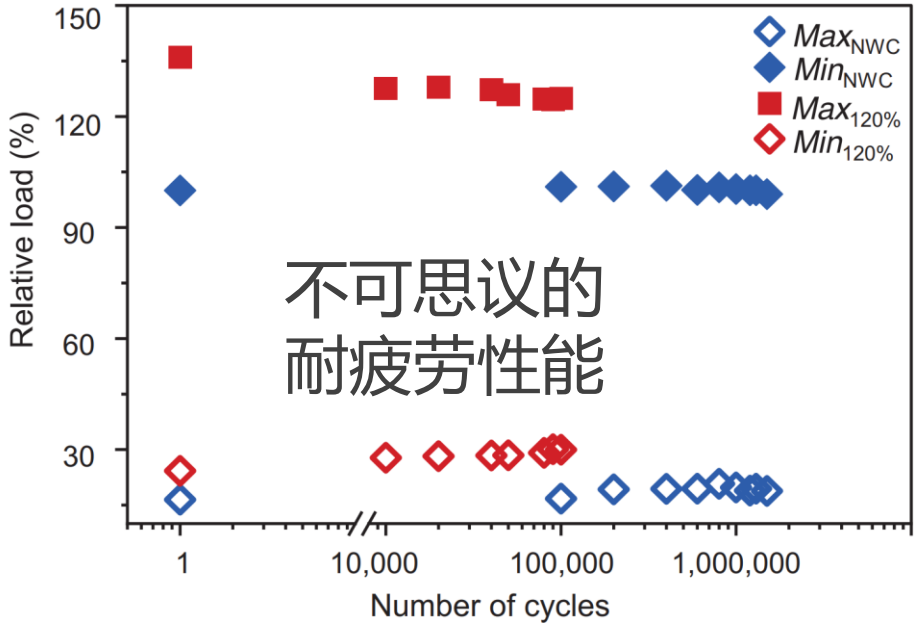






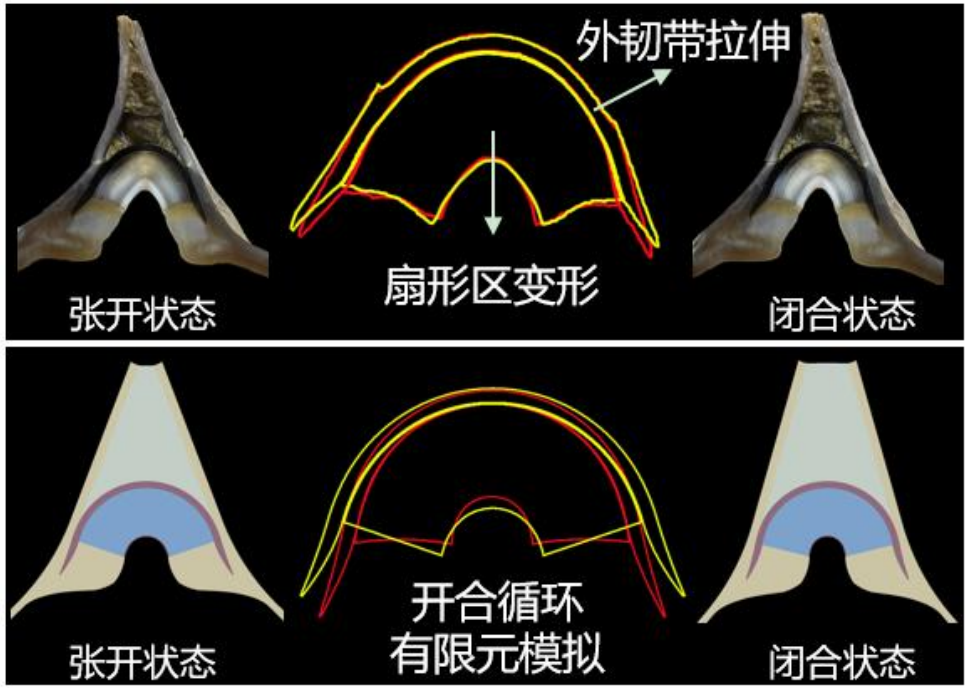
疲劳实验





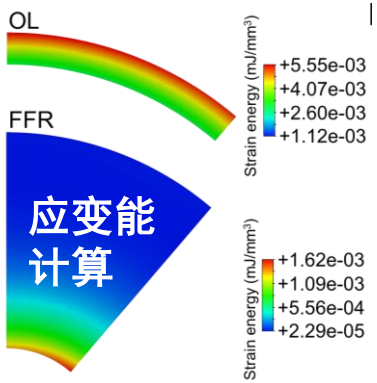
百万次量级

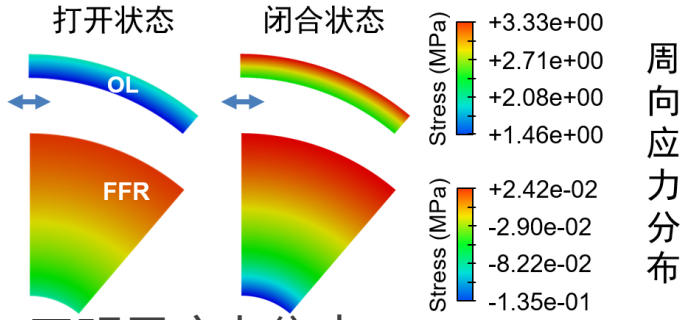
贝壳铰链生物陶瓷的多尺度结构解析



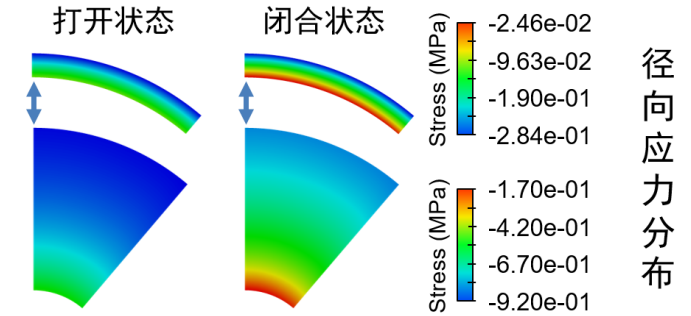


类拱券结构





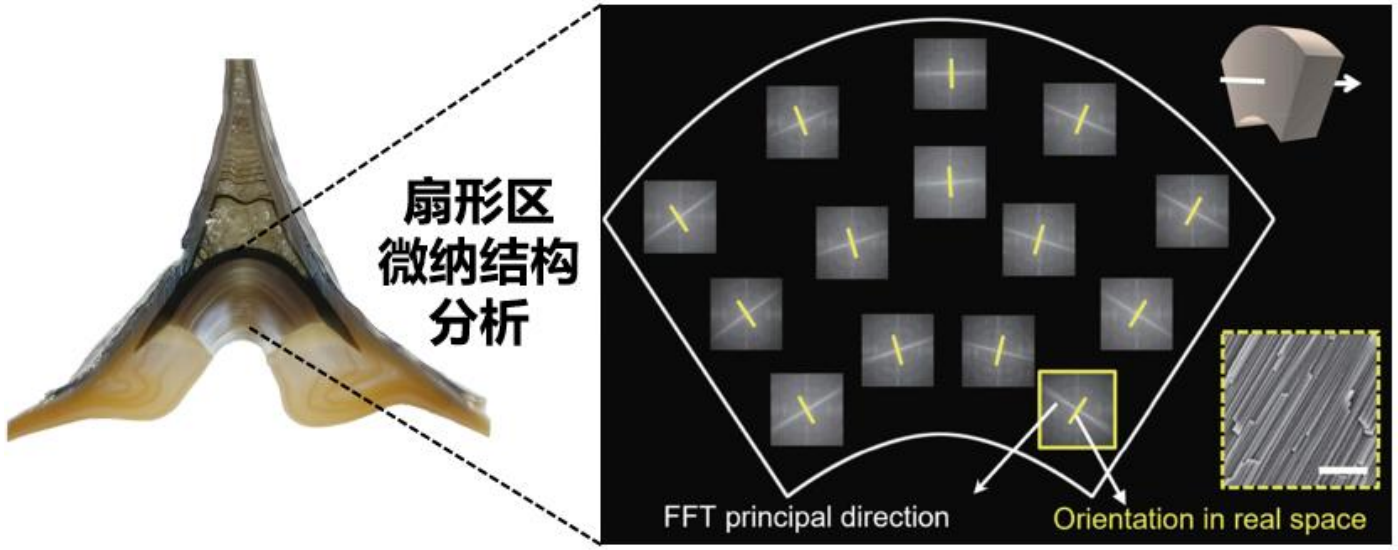
无明显应力集中

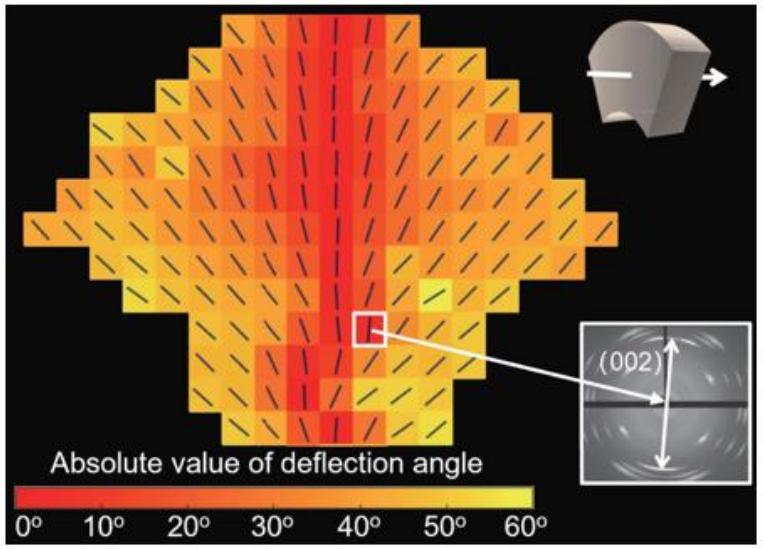


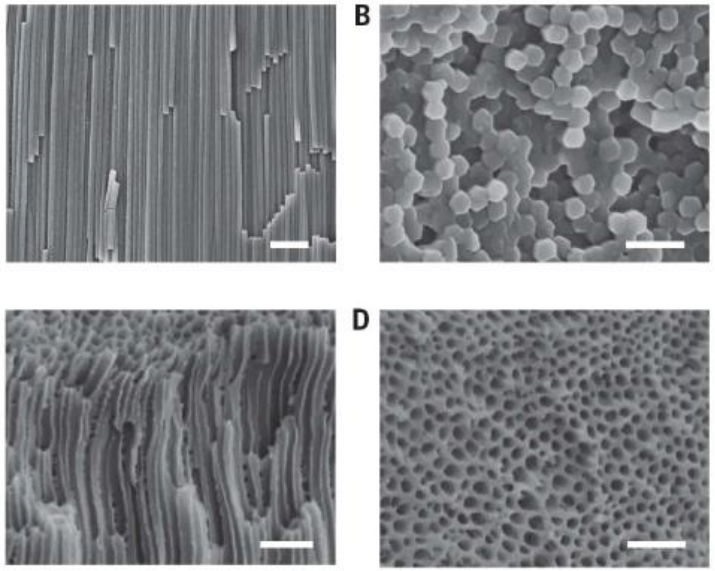
扇形区类拱券结构的变形/载荷转换机制：

- 贝壳关闭时，扇形区被两侧文石挤压，径向变形被外韧带限制
- 扇形区通过类拱券结构将外部压缩载荷转换为内部压应力
- 扇形区无明显应力集中区域，始终保持结构和功能的稳定性

贝壳铰链生物陶瓷的多尺度结构解析

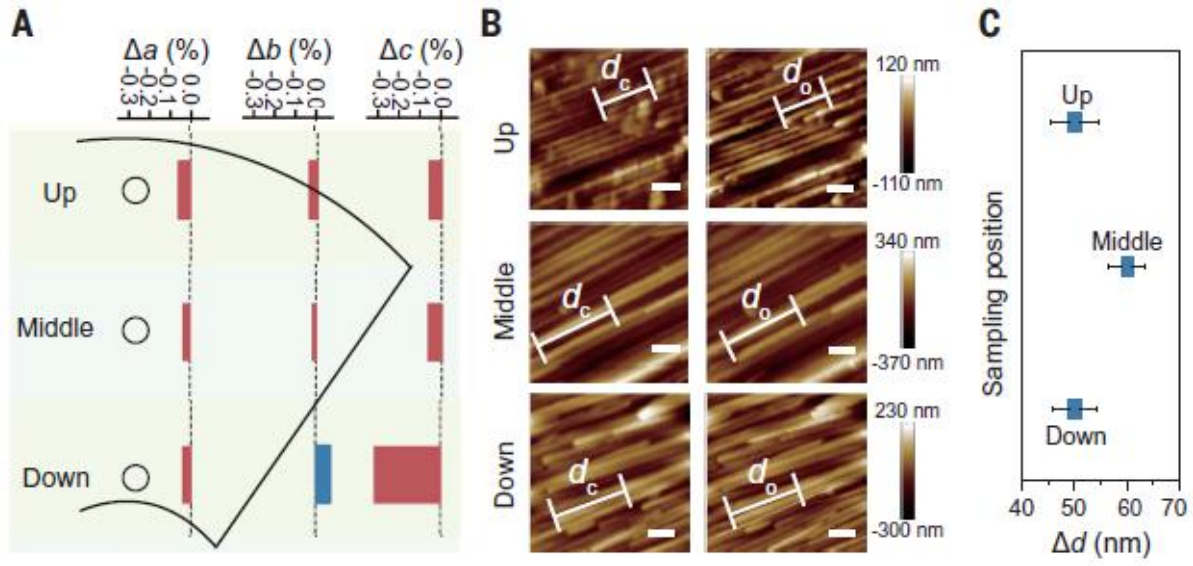


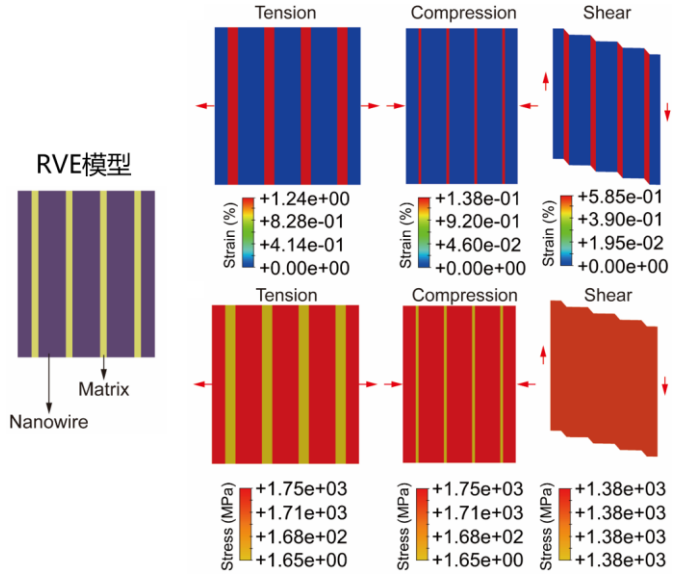


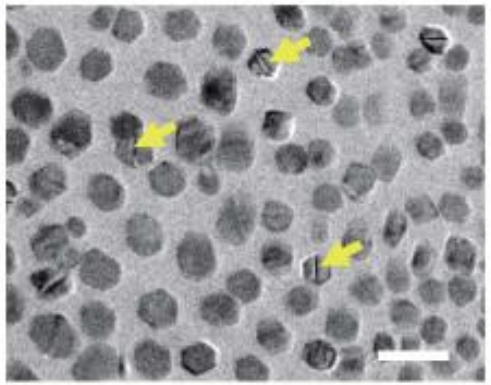


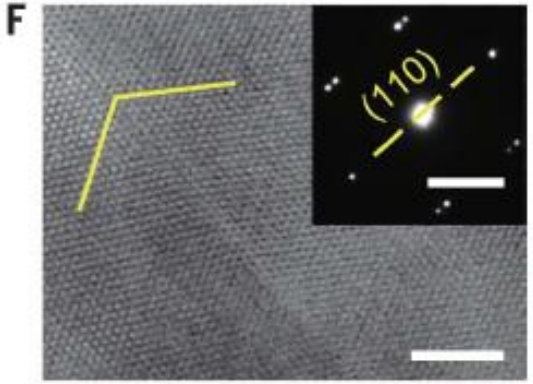
- 碳酸钙纳米线沿着径向方向排列，为扇形区提供了径向刚度支撑；
- 纳米线被包裹在有机质中，形成软/硬复合结构；
- 有机质为扇形区提供了可变形能力，碳酸钙纳米线（体积分数> 50%）为扇形区提供了高硬度。

贝壳铰链生物陶瓷的多尺度结构解析





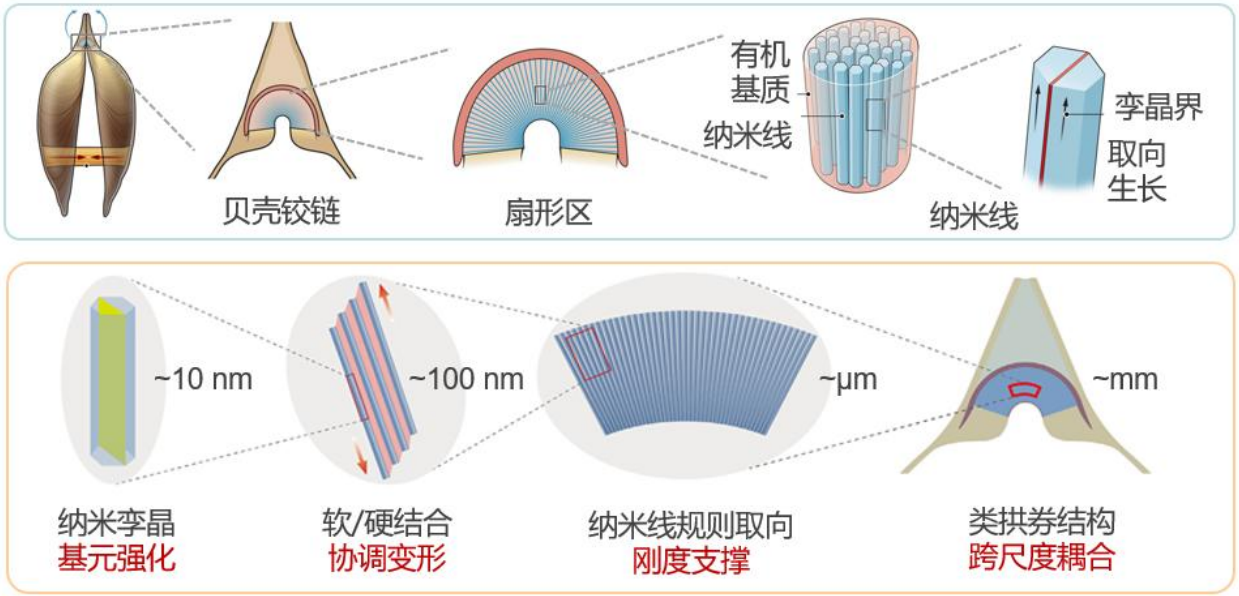




- 开合过程中，扇形区剪切变形（纳米线间相对滑动）主要出现在中间区域；
- 软/硬双相协同变形：碳酸钙纳米线主要承受轴向压缩，有机质主要承受剪切和体积压缩；
- 沿轴向的孪晶界面有效提升了碳酸钙纳米线在循环载荷过程中的抗弯折能力。

贝壳铰链生物陶瓷的跨尺度耐疲劳机理

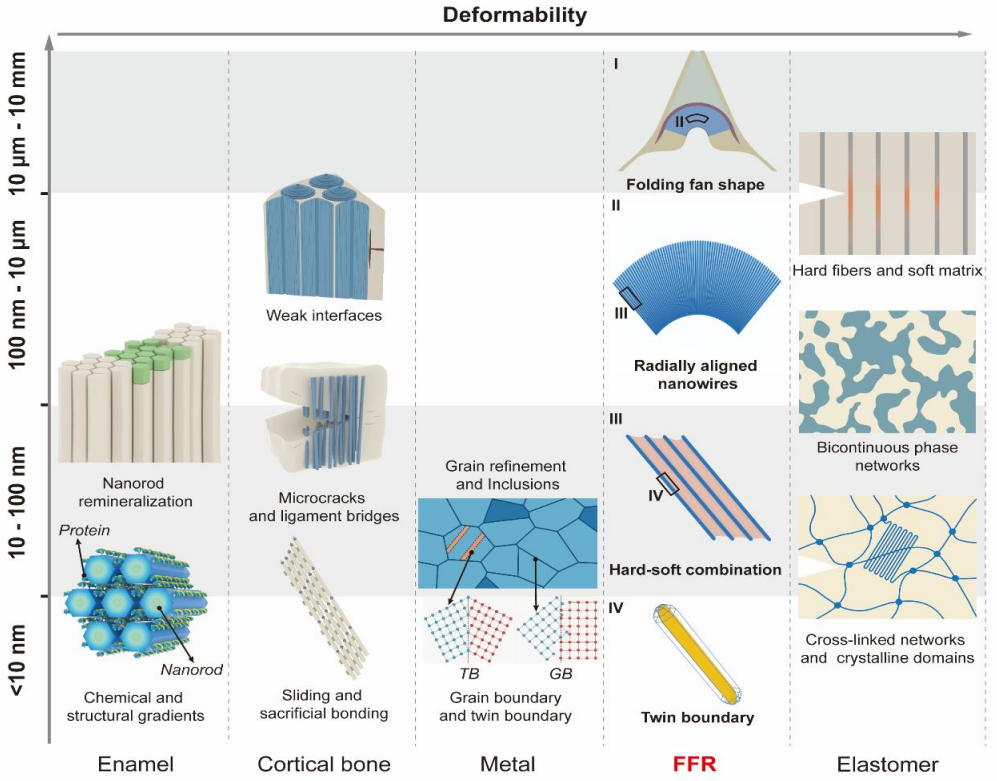
➢ 结构多尺度解析→跨尺度耐疲劳机理



✓ 揭示了贝壳铰链生物陶瓷的跨尺度耐疲劳机理，给出了其多层次精细结构与耐疲劳性能之间的物理图像描述；

✓ 提出了抗疲劳序构纳米陶瓷的仿生设计原理，有望为陶瓷基耐疲劳结构材料的设计和构筑提供重要的理论支撑。

➢ 不同材料耐疲劳机制对比

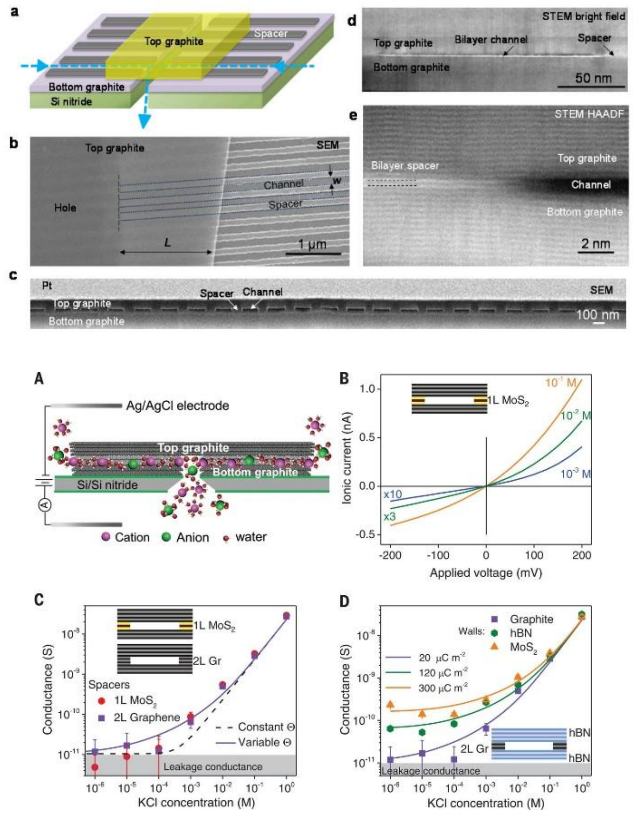


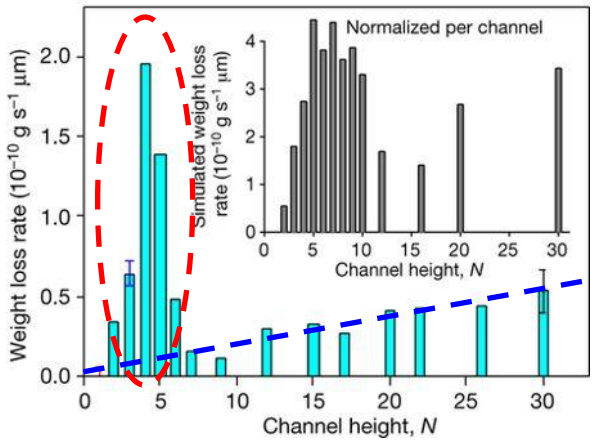
Science, 2023.

报告提纲

1. 材料多尺度力学建模和设计
   - ① 研究背景
   - ② 微纳结构材料力学设计
   - **③ 纳米孔隙膜材料力学设计**
2. 油气开发计算方法及工程应用
   - ① 研究背景
   - ② 数值模型和求解算法
   - ③ 油田现场应用

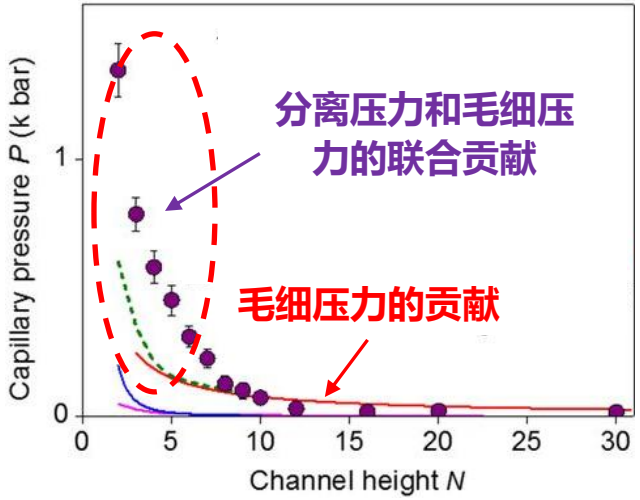
石墨烯纳通道及限域传质力学机理





$$Q = \rho \frac{h^3}{12\eta} w \left(1 + \frac{6\delta}{h}\right) \frac{P}{L}$$

经典理论无法解释纳米流动流量与通道尺寸的非单调非线性关系



$$P(h) = \frac{2\gamma_{LV}\cos\theta}{h} + \frac{A}{6\pi h^3}$$

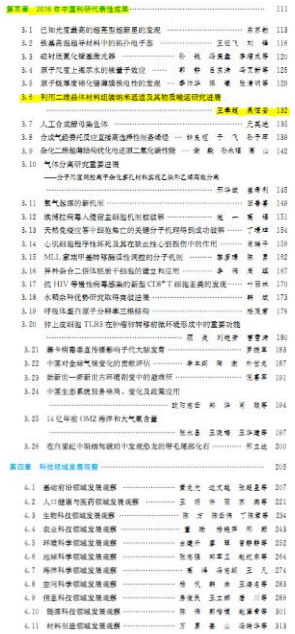
提出了新的纳米流动驱动机理力学模型

- **合作提出了构筑纳米通道的新方法，尺寸调整精度为0.34纳米，这是目前实验室制备的最小尺寸纳通道，其科学意义是揭示了固液界面效应对纳米流动行为具有决定性影响**

Nature, 2016.

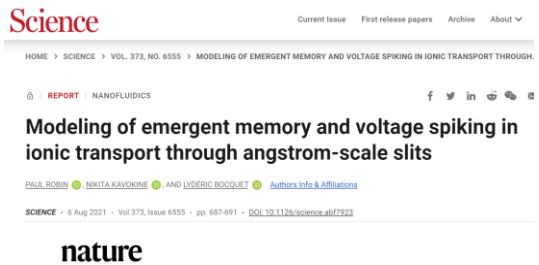
石墨烯纳通道及限域传质力学机理







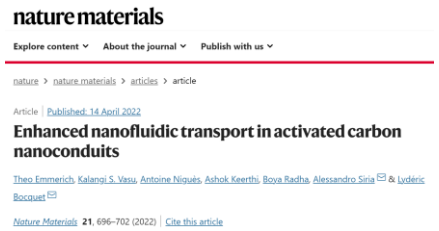
Lydéric Bocquet
法国科学院院士
微纳流动知名学者
巴黎高师教授
CNRS研究主任


Science
Modeling of emergent memory and voltage spiking in ionic transport through angstrom-scale slits
nature
Fluctuation-induced quantum friction in nanoscale water flows


Science
Long-term memory and synapse-like dynamics in two-dimensional nanofluidic channels
ANNUAL REVIEWS
Annual Review of Fluid Mechanics
Fluids at the Nanoscale: From Continuum to Subcontinuum Transport


nature nanotechnology
Ionic Coulomb blockade as a fractional Wien effect

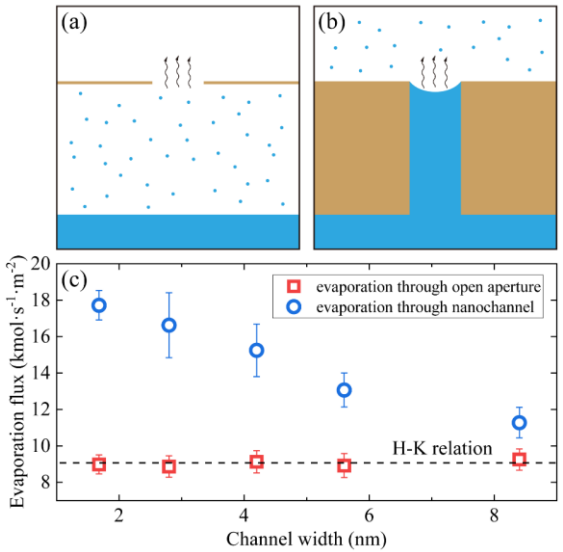

nature materials
Nanofluidics coming of age


nature materials
Enhanced nanofluidic transport in activated carbon nanoconduits

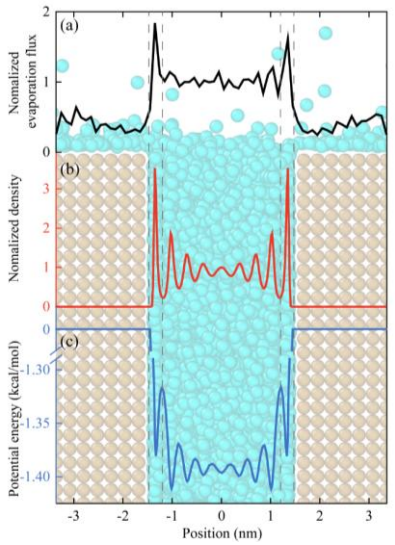
“石墨烯纳通道的限域传质机理”作为“**中国科研代表性成果**”入选中科院发布的《2017科学发展报告》

Bocquet教授在其*Science*, *Nature*, *Nat Mater*, *Nat Nanotech*等十余篇文章中引用并认为本团队相关工作“突出强调了分离压力对输运的影响”，“据我所知，**这是首次强调了分离压力效应(this is the first time that disjoining pressure effects are highlighted)**对分子通道中的蒸发流动的影响”。

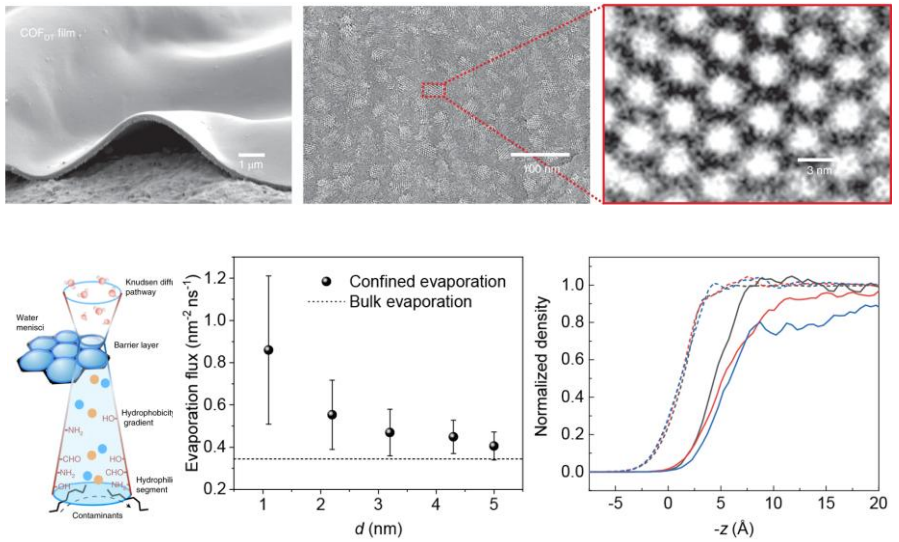
纳米限域力学 → 微纳多孔膜材料设计



纳米通道液体增强蒸发



蒸发增强机理

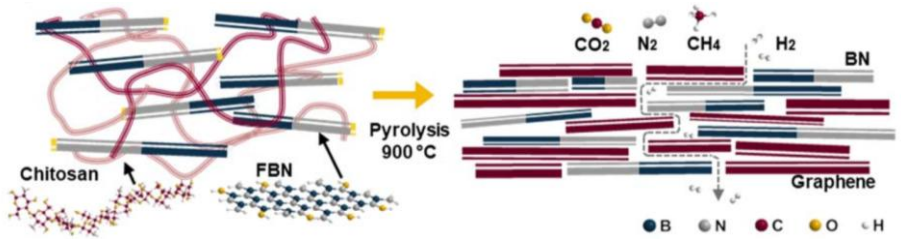


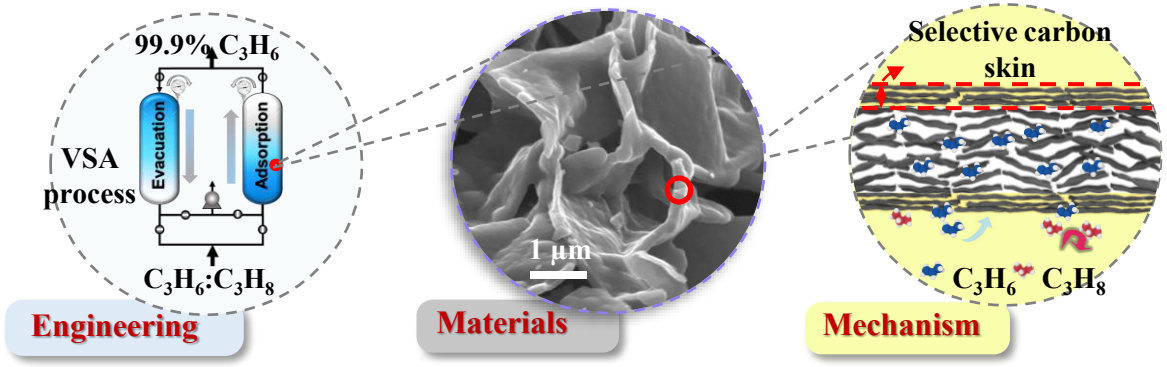
超高通量COFs薄膜的优化设计

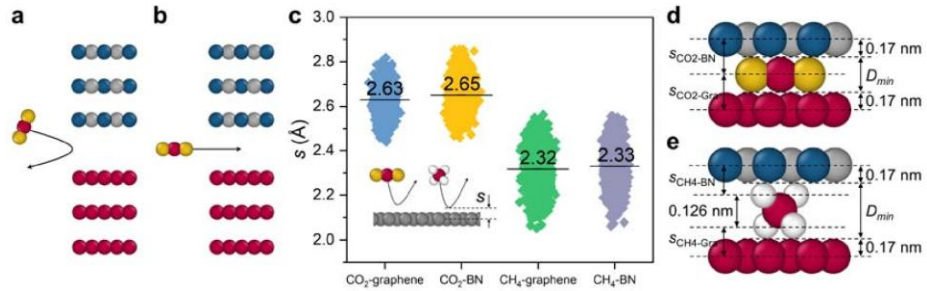
揭示了液体在纳米通道中的蒸发增强机理，解释了蒸发速率的尺寸相关性，建立了描述蒸发驱动液体在通道内流动的力学模型。运用蒸发驱动纳通道液体流动力学模型有效地解释了COFs薄膜超高通量的原因，为开发下一代高性能膜蒸馏分离膜提供了理论支持。

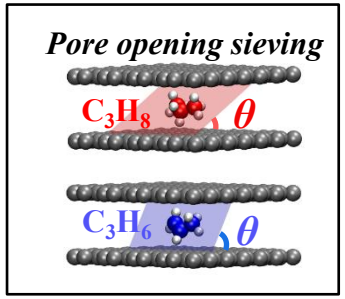
Phys. Fluids, 2020. *Nat. Mater.*, 2021.

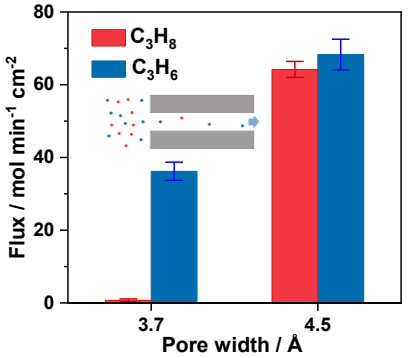
纳米限域力学 → 微纳多孔膜材料设计







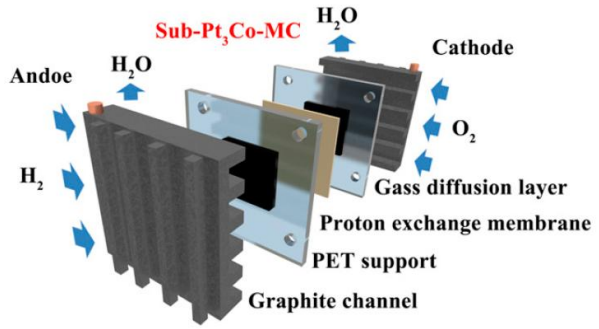


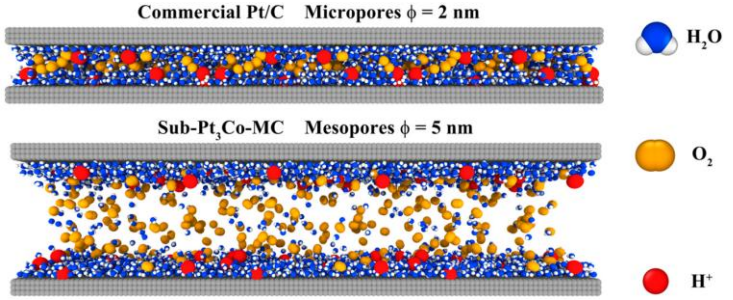


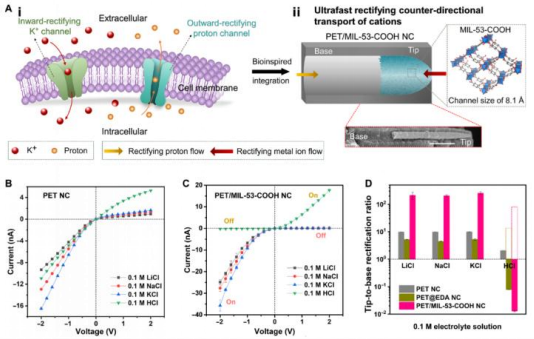
建立了描述纳米通道气体输运的普适Knudsen理论模型；理论预测了异质结膜和表皮筛分碳中限域气体的界面效应和渗透能力，提出了气体分子最小有效尺寸的概念和分段筛选吸附的策略，揭示了高效气体分离（氢气/二氧化碳、丙烷/丙烯）的传输机理。

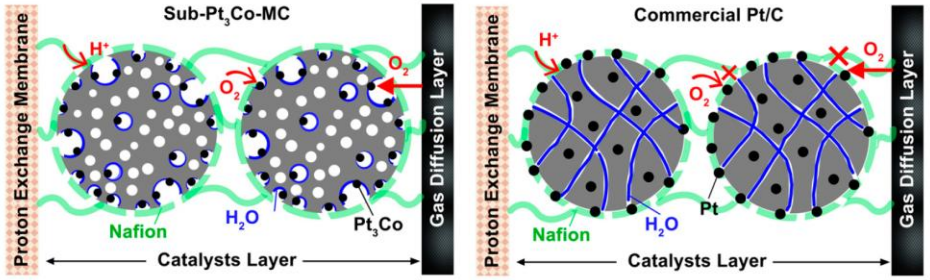
Nature Communications, 2023a, 2023b. *Nature Chemical Engineering*, 2024.

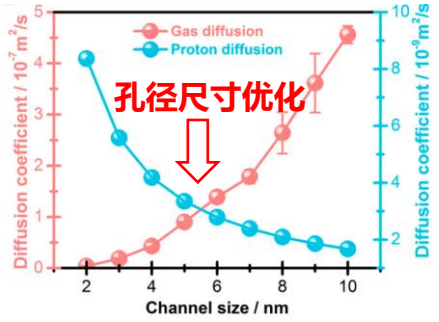
纳米限域力学 → 微纳多孔膜材料设计

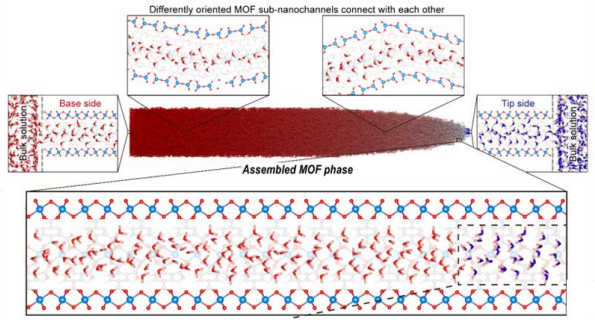












合作提出了一种新型纳米限域增强的燃料电池运行效率的设计理念，理论计算表明介孔内部可高效地完成质子和氧气的传输并实现动态平衡，实现燃料电池的高功率放电和长久循环稳定性；模拟研究揭示了MOF纳米通道高效离子选择性和整流传输的机理，实现了离子和质子反向快速传输。

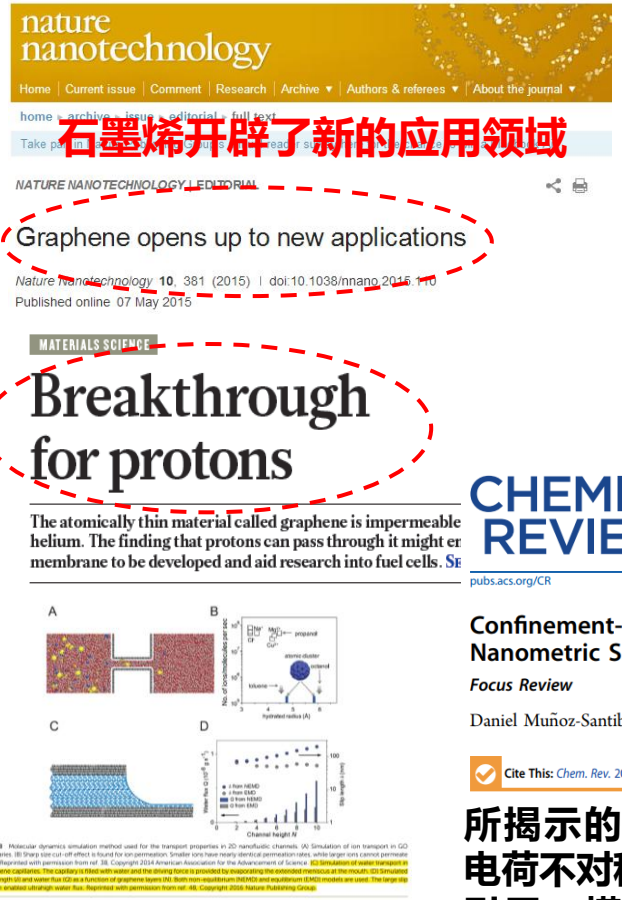
Sci. Adv., 2022, *Adv. Mater*, 2020a; *PNAS*, 2021, *Adv. Mater.*, 2020b.

纳米限域力学 → 微纳多孔膜材料设计

Nature网站首页头条报道



石墨烯开辟了新的应用领域





REPORT

Atomic-scale ion transistor with ultrahigh diffusivity

Yahui Xue[1,†], Yang Xia[1,†], Sui Yang[1], Yousif Alsaid[1], King Yan Fong[1], Yuan Wang[1], Xiang Zhang[2,*]
+ See all authors and affiliations

Science 30 Apr 2021:
Vol. 372, Issue 6541, pp. 501-503
DOI: 10.1126/science.abb5144

Xiang Zhang 美国工程院院士，香港大学校长

the onset electric potential to overcome the ion-entry energy barrier. Experimental evaluation of the energy barrier reveals a value of ~24 kJ/mol for potassium ions, which agrees reasonably well with predictions reported in the literature (*15*, *20*, *22*).

在*Science*正刊论文中引用，离子通过埃米通道能垒模拟结果被用于支持其实验结果。

Chem Soc Rev

REVIEW ARTICLE

View Article Online

Check for updates

Cite this: Chem. Soc. Rev., 2017, 46, 5400

Nanofluidics in two-dimensional layered materials: inspirations from nature

Jun Gao,†[a] Yaping Feng,†[bc] Wei Guo[bc] and Lei Jiang[bc]



江雷
中科院院士

sheets, as shown in Figure 7a middle. Later, they fabricated a 2D nanocapillary devices through van der Waals assembly. With precisely controlling the height of spacers, they systematically explored the effect of 2D interlayer spacing on the water transmission rate, and attributed the observed ultra-fast transmission rate (up to 1 m s^{-1}) to the high capillary pressures (about 1000 bar) and large slip lengths.[81] Corresponding MD simulations revealed that the water formed a highly ordered monolayer when confined inside graphene 2D nanospace. The frictionless flow of the water monolayer resulted in ultrafast water transport. This research is important proof of the QSF concept. By fabricating narrow and smooth capillaries between graphene layers, unexpectedly fast flow (up to 1 m s^{-1}) has been achieved through the nanochannels, which is attributed to the high capillary pressure and large slip lengths.[24] The marked enhancement of the water flow is associated with an increased ordered structure of nanoconfined water when the channels accommodate only a few layers of water. Moreover, two-dimensional water flow in the slip length and further water flow rate.

江雷院士多次大篇幅引用本团队相关工作，并认为这是他提出的“量子限域超流体”概念的重要证据(important proof)。

CHEMICAL REVIEWS

美国化学会于1924年创刊，
最新影响因子为: 72.087

pubs.acs.org/CR

Review

Confinement-Controlled Aqueous Chemistry within Nanometric Slit Pores

Focus Review

Daniel Muñoz-Santiburcio* and Dominik Marx*

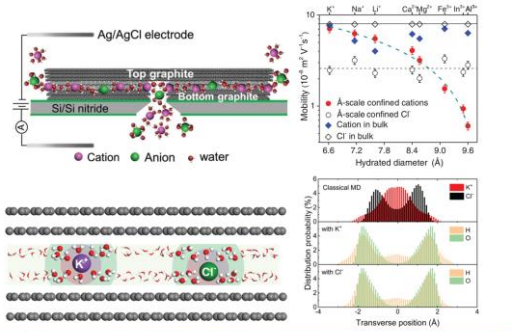
Cite This: Chem. Rev. 2021, 121, 6293−6320

Read Online



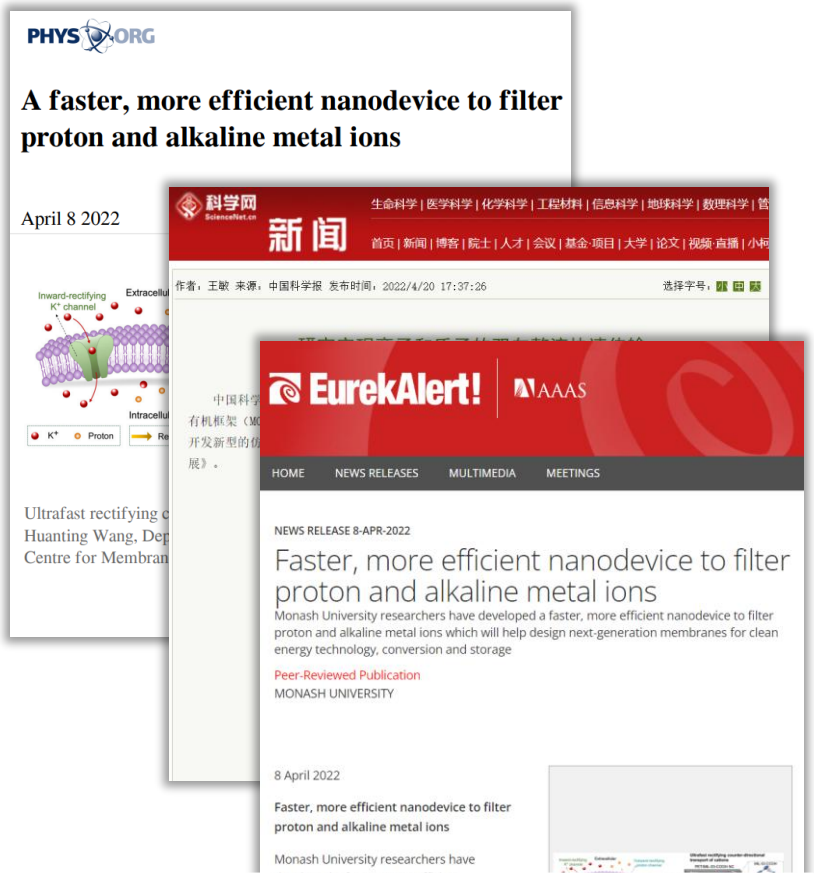
Dominik Marx, Distinguished Professor
德国波鸿鲁尔大学 理论化学中心主任

所揭示的埃米通道中离子输运的电荷不对称效应被*Chem. Rev.*重点引用，模拟结果图片被直接引用。



mobility within these bilayer lamellae is suppressed in relation to the bulk solution for all multiply charged cations, while it is similar (K^+) or even enhanced (Na^+, Li^+) with respect to bulk for the three monovalent cations. Furthermore, the mobility of K^+ and Cl^- is affected differently by extreme confinement,[7] which has been traced back to different interactions of cationically and anionically solvated ions with the confining walls[160] with the help of force field and AIMD computer simulations (bottom panels of Figure 10). On the other hand, none of these ions can

纳米限域力学 → 微纳多孔膜材料设计



美国科学促进会专栏报道“**理论揭示前所未有的 (unprecedented) 传输机制**”

科学网评述：**纳米限域传质理论模型为人工离子通道的结构设计提供了新思路**



Chem Soc Rev

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

REVIEW ARTICLE

The coming of age of water channels for separation membranes: from biological to biomimetic to synthetic

Yu Jie Lim, Kunli Goh and Rong Wang

Rong Wang 南洋理工首席教授 J. Membrane Sci.主编



Yi Cui教授
斯坦福大学
美国科学院院士

nature COMMUNICATIONS

ARTICLE

OPEN

Thermal migration towards constructing W-W dual-sites for boosted alkaline hydrogen evolution reaction

Zhigang Chen, Yafeng Xu, Ding Ding, Ge Song, Xingxing Gan, Hao Li, Wei Wei, Jian Chen, Zhiyun Li, Zhongmiao Gong, Xiaoming Dong, Chengfeng Zhu, Nana Yang, Jingyuan Ma, Rui Gao, Dan Luo, Shan Cong, Lu Wang, Zhigang Zhao & Yi Cui

by Bader charge analysis (Supplementary Fig. 15). Correspondingly, as shown in the R-space plots of the FT-EXAFS profiles, the reference sample of W foil exhibits typical scattering path of W-W coordination at 2.85 Å, which is almost absent in that of

“验证了小尺寸下的限域效应”

indicating the existence of W-W bonds, while the intensity of the W-W peak is much weaker than that of WC NPs, implying the small size and unsaturated nature of W-ACs[29]. In addition, the observed predominant W-C/O (1–2 Å) scattering paths in W-ACs verify that they are rich in C/O ligands. To obtain the

For the sole purpose of desalination, where drinking water is the expected final outcome, near absolute solute rejection is more often than not unnecessary as remineralization at down-

“这是一种新的设计理念”

alized again. Recently, there has been a new thrust in developing selective membranes with the capacity to carry out single solute rejection from saline water.[271–273] The rationale is to realize high discrimination between different solutes such that membranes can selectively separate undesired solutes, while allowing essential solutes to pass through, so as to avoid

“具有极大的发展潜力”

perspective of water nanochannels, there is certainly huge potential for compelling nanochannels to contribute towards this demand for solute–solute (or ion–ion) selectivity. To do so, it is essential to first understand the mechanism of solute or ion transport through the nanochannels. According to the



International Journal of Hydrogen Energy

Engineering the electronic structure of PtCo sites via electron injection to CoNC boosts acidic oxygen electroreduction

Yani Yan, Guang Li, Xiaoyang Cheng, Shuhu Yin, Hongbin Zeng, Rui Huang, Chongtai Wang, Yanxia Jiang, Shigang Sun

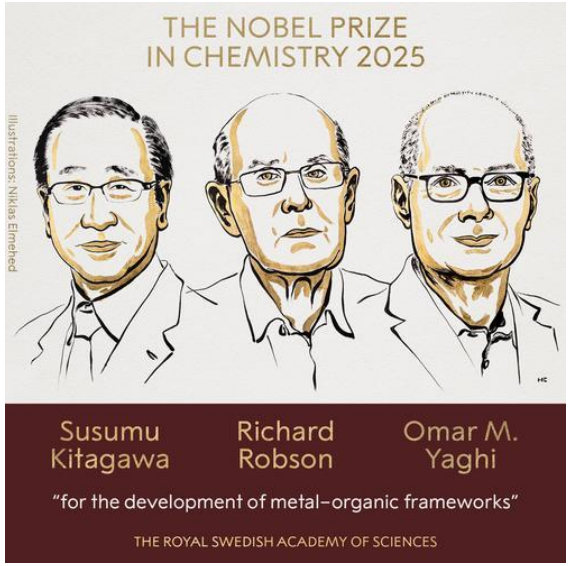
孙世刚 厦门大学 中国科学院院士

2062 cm^{-1} and 2056 cm^{-1}, respectively. The result indicates that CO bond energy relationship of the catalysts is

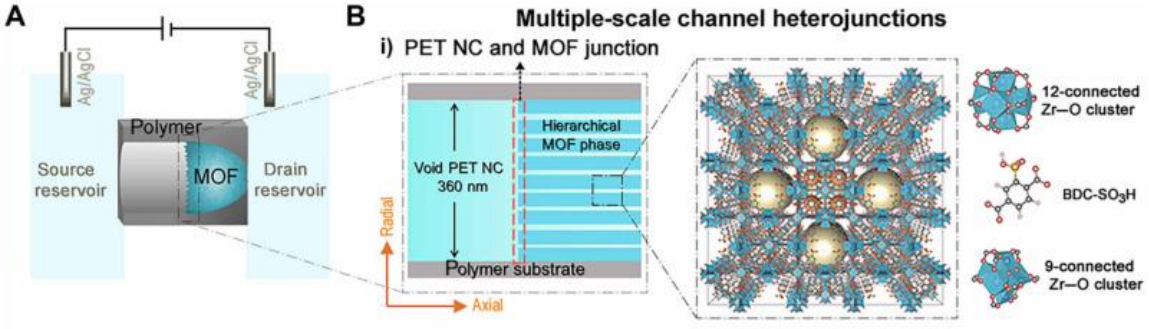
“理论计算显著提高了性能”

conclusion is consistent with XPS. Based on previous theoretical calculations, alloying Pt with Co can significantly reduce the binding energy between Pt and oxygen species, which improves the ORR activity and adjusts the binding energy between Pt and oxygen species to the right side of the volcano-shaped plot [39]. However, alloying with transition

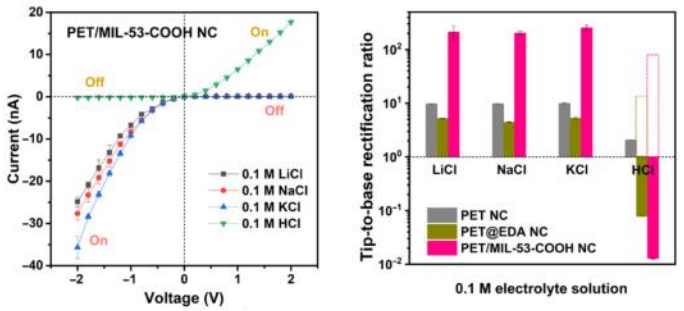
高选择性离子整流膜限域力学与材料设计



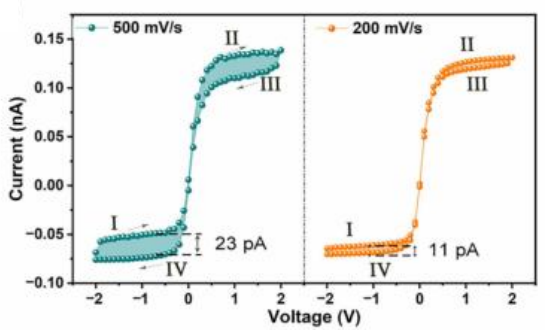
2025年诺贝尔化学奖授予北川进、理查德·罗布森与奥马尔·亚吉，以表彰他们在金属有机框架材料（MOFs）领域的开创性贡献。



分级MOF + 子弹形PET通道



质子/离子整流特性

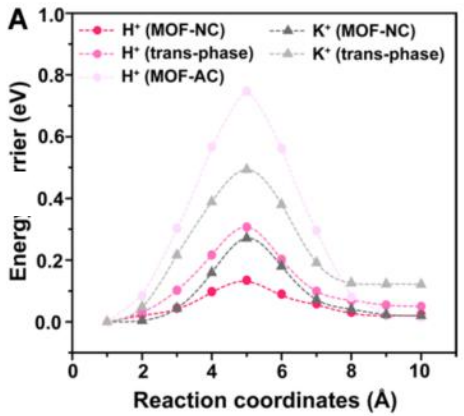


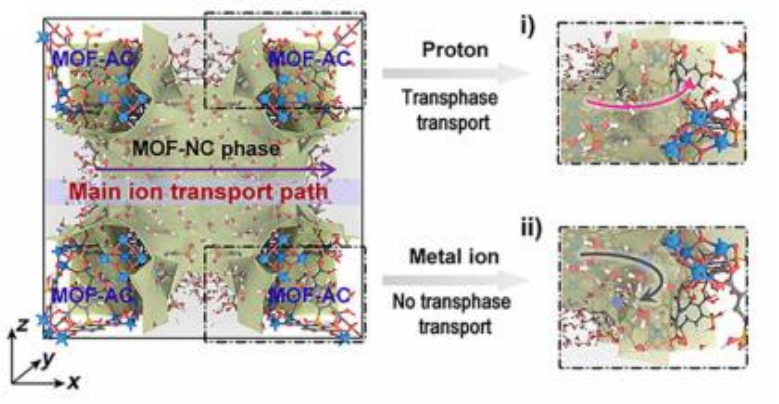
纳米流体忆阻器件

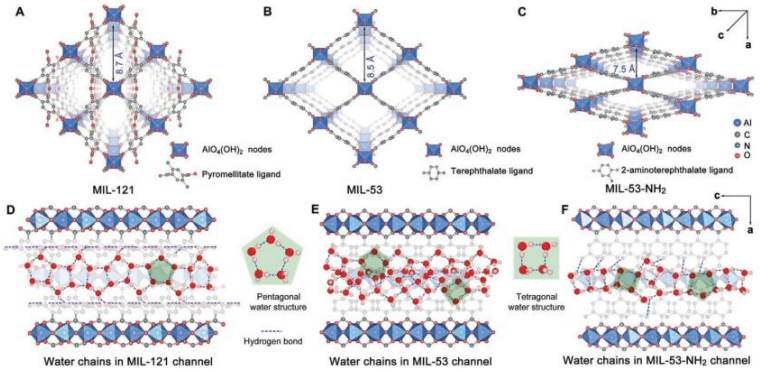
材料设计策略：从仿制到优化到创新，从实现功能到理解机理再到利用机理设计新功能。设计了具有分级孔道结构的新型MOF膜，实现了从被动“整流”到主动“调控与记忆”的跨越。

Advanced Materials, 2020

高选择性离子整流膜限域力学与材料设计







密度泛函计算

电子结构+能垒

分子动力学模拟（反应力场）

质子/离子输运过程

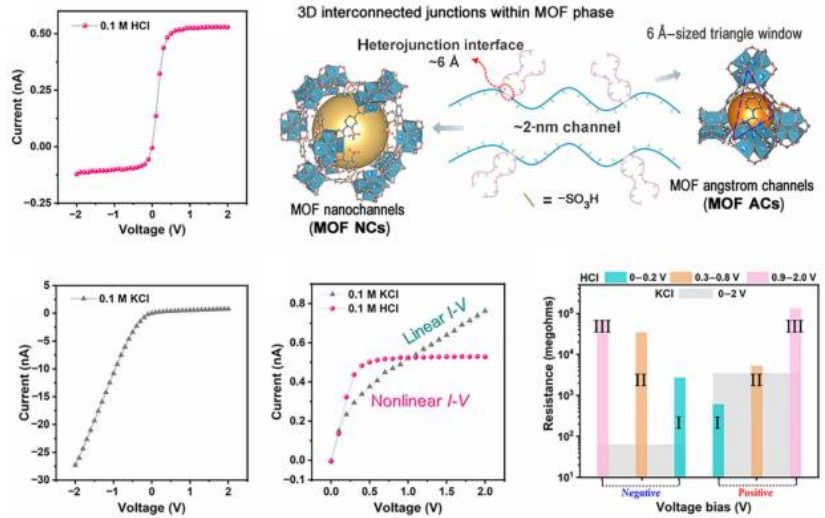
分子动力学模拟

材料性能筛选

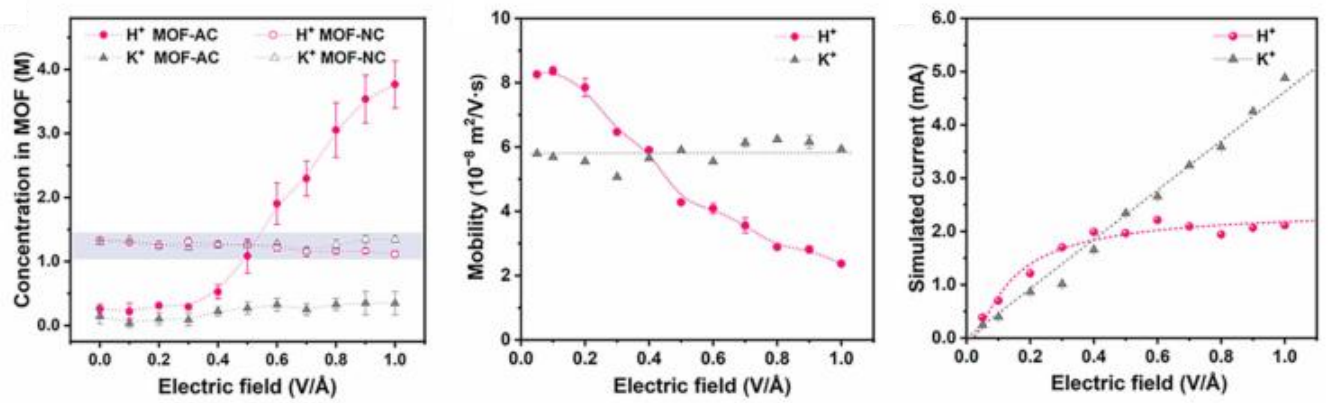
揭示机理：电荷/尺寸不对称引起金属离子整流；有序水链/Grotthuss机制引起质子超快传输；对比不同MOF（MIL-121, MIL-53, MIL-53-NH_2），发现MIL-121性能最优。

Science Advances, 2022

高选择性离子整流膜限域力学与材料设计



设计并合成具有本征异质结的分级MOF，
内部存在~2 nm的介孔和 ~6 Å的微孔



理论模拟揭示非线性质子传输机制：外加电压超过阈值时，
MOF微孔内质子积累的内建电势产生门控效应，调控质子传输

提出并验证了新的调控机制：当电压超过阈值，质子从介孔进入微孔并“存储”，产生的内建电场反过来自调控介孔主通路的质子传输，从而实现非线性输运与记忆特性

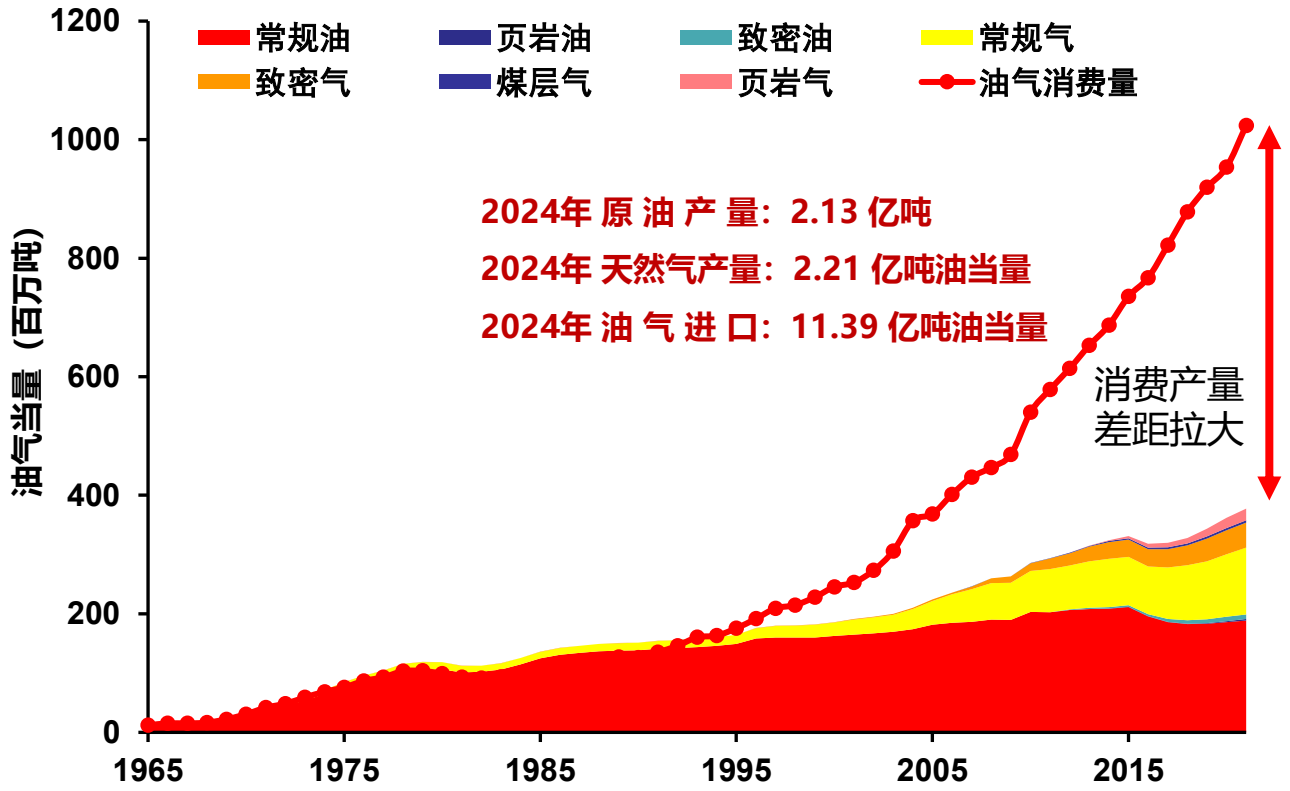
Science Advances, 2025.

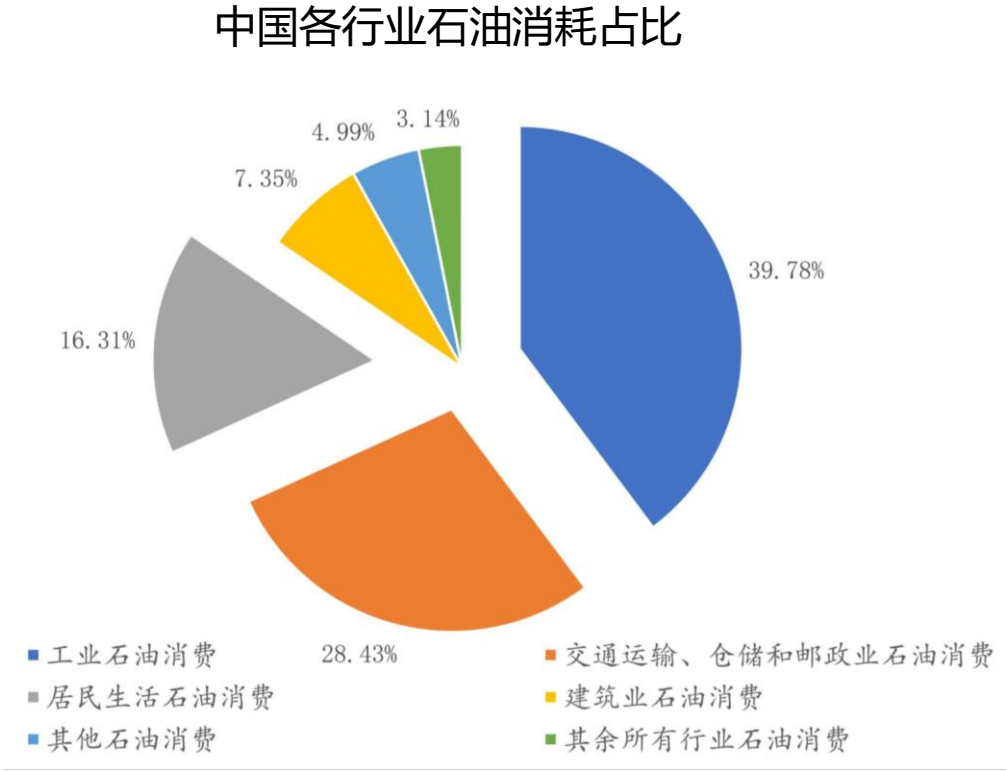
报告提纲

1. 材料多尺度力学建模和设计
   - ① 研究背景
   - ② 微纳结构材料力学设计
   - ③ 纳米孔隙膜材料力学设计
2. **油气开发计算方法及工程应用**
   - **① 研究背景**
   - ② 数值模型和求解算法
   - ③ 油田现场应用

研究背景：我国石油需求和勘探开发现状

20世纪90年代以来，我国油气消费量和进口量持续加大，2024年原油生产2.13亿吨，表观消费量为7.56亿吨，原油进口量5.43亿吨，进口依存度72%，能源保障处于严重危机，能源安全面临重大挑战。





研究背景：美国实现“海相页岩油”革命

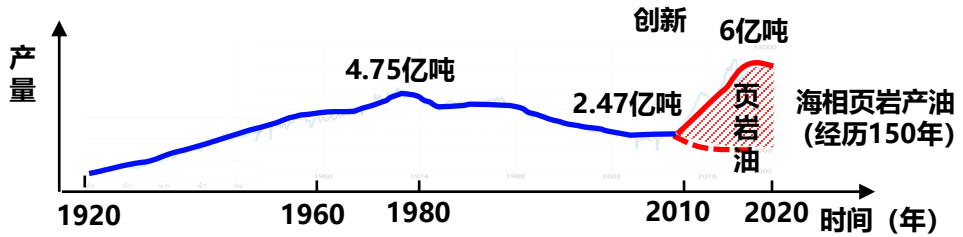
美国海相页岩油储层展布面积大、资源均匀性好，分布层系集中，岩性相对简单，**其页岩油商业开采实现了石油产量的快速增长（年产量2.47亿吨到6亿吨）**，实现了能源“进口国“到”出口国”的重大转变。

表1　北美与中国主要盆地烃源岩特征对比

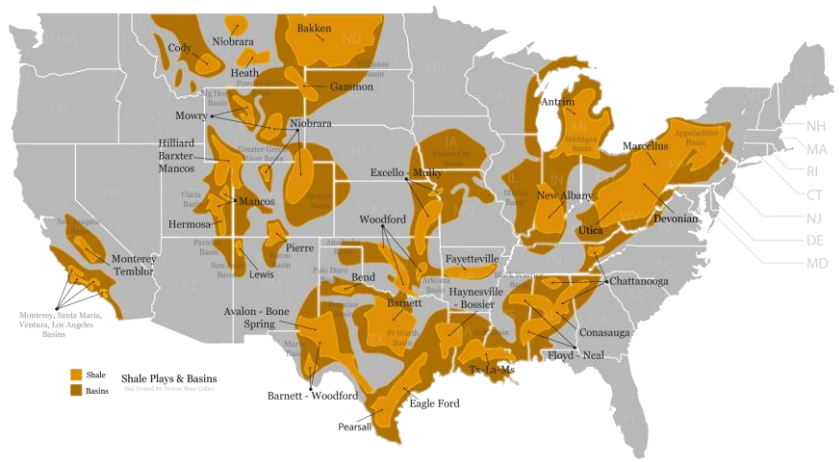
Table1　Contrast in key geological attributes of hydrocarbon source beds in North America and China

地区	盆地名称	盆地类型	主要目的层	主要岩性	有利烃源岩面积/10^4 km^2	累积厚度/m	干酪根类型	R_o/%	TOC/%
北美	阿巴拉契亚	前陆	马塞勒斯组	海相页岩/灰岩	11.4	10~200	Ⅱ为主	0.5~3.5	1.0~15.0
	威利斯顿	克拉通内部凹陷	巴肯组	海相页岩/灰岩	7	5~55	Ⅰ+Ⅱ	0.6~1.0	7.2~14.0
	墨西哥湾	克拉通边缘	鹰滩组	海相泥岩/页岩	4	10~60	Ⅱ为主	0.6~1.4	3.0~10.0
	二叠	叠合	沃夫坎组	海相泥岩/页岩	10	20~150	Ⅰ+Ⅱ	0.6~1.3	2.0~5.0
			巴奈特组	海相页岩/灰岩	3	15~70	Ⅰ+Ⅱ	0.7~1.1	4.0~12.0
	丹佛	前陆	奈厄布拉勒组	海相泥灰岩	3.5	80~100	Ⅱ为主	0.7~1.4	1.6~4.7
中国	松辽	坳陷	青山口组	湖相泥页岩	5.0~6.0	100~150	Ⅰ为主	0.5~2.0	0.9~9.0
	渤海湾	裂陷	沙河街组	湖相泥页岩	5.0~10	30~1000	Ⅰ为主	0.5~2.0	1.5~10.0
	鄂尔多斯	坳陷	长7段	湖相泥页岩	10	10~100	Ⅰ+Ⅱ	0.7~1.5	2.0~20.0
	准噶尔	裂陷	二叠系	湖相泥页岩	3.0~4.0	30~200	Ⅰ+Ⅱ	0.6~1.6	1.2~8.9
	四川	坳陷	侏罗系	湖相泥页岩	3	80~150	Ⅰ+Ⅱ	0.5~1.6	0.2~3.8
	柴达木	坳陷	古近系—新近系	湖相泥页岩	1.0~3.0	100~300	Ⅱ	0.5~0.9	0.4~5.5
	酒泉	裂陷	白垩系	湖相泥页岩	0.3~1	50~1 000	Ⅰ+Ⅱ	0.5~0.8	1.0~2.5
	三塘湖	裂陷	二叠系	湖相泥页岩	0.5~1	30~400	Ⅰ+Ⅱ	0.6~1.3	0.1~6.0
	吐哈	坳陷	侏罗系	湖相泥页岩	0.7~1	700~1 100	Ⅰ+Ⅱ	0.5~0.9	1.0~5.0
	江汉	裂陷	古近系	湖相泥页岩	2.8	50~650	Ⅰ+Ⅱ	0.5~1.2	0.5~12.0

- 盆地面积大，整体稳定宽缓
- 有效面积大，厚度较浅，利于开采

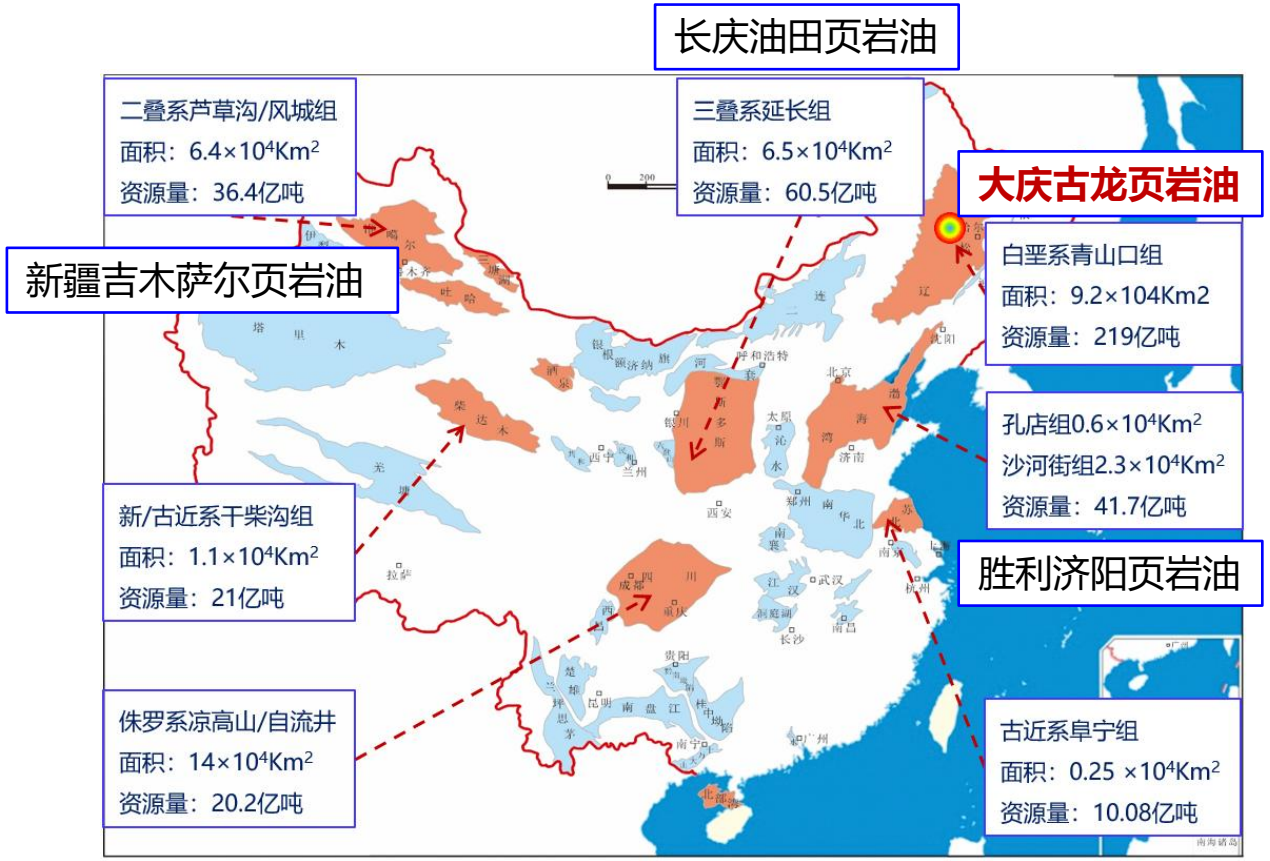


美国石油产量变化趋势图



研究背景：中国“陆相页岩油”发展前景

我国已探明页岩油储量逾400亿吨，地质资源规模大，分布范围广，发展潜力可观，页岩油的有效开发有望实现石油资源自给自足、石油产量第二曲线快速上扬的核心力量。

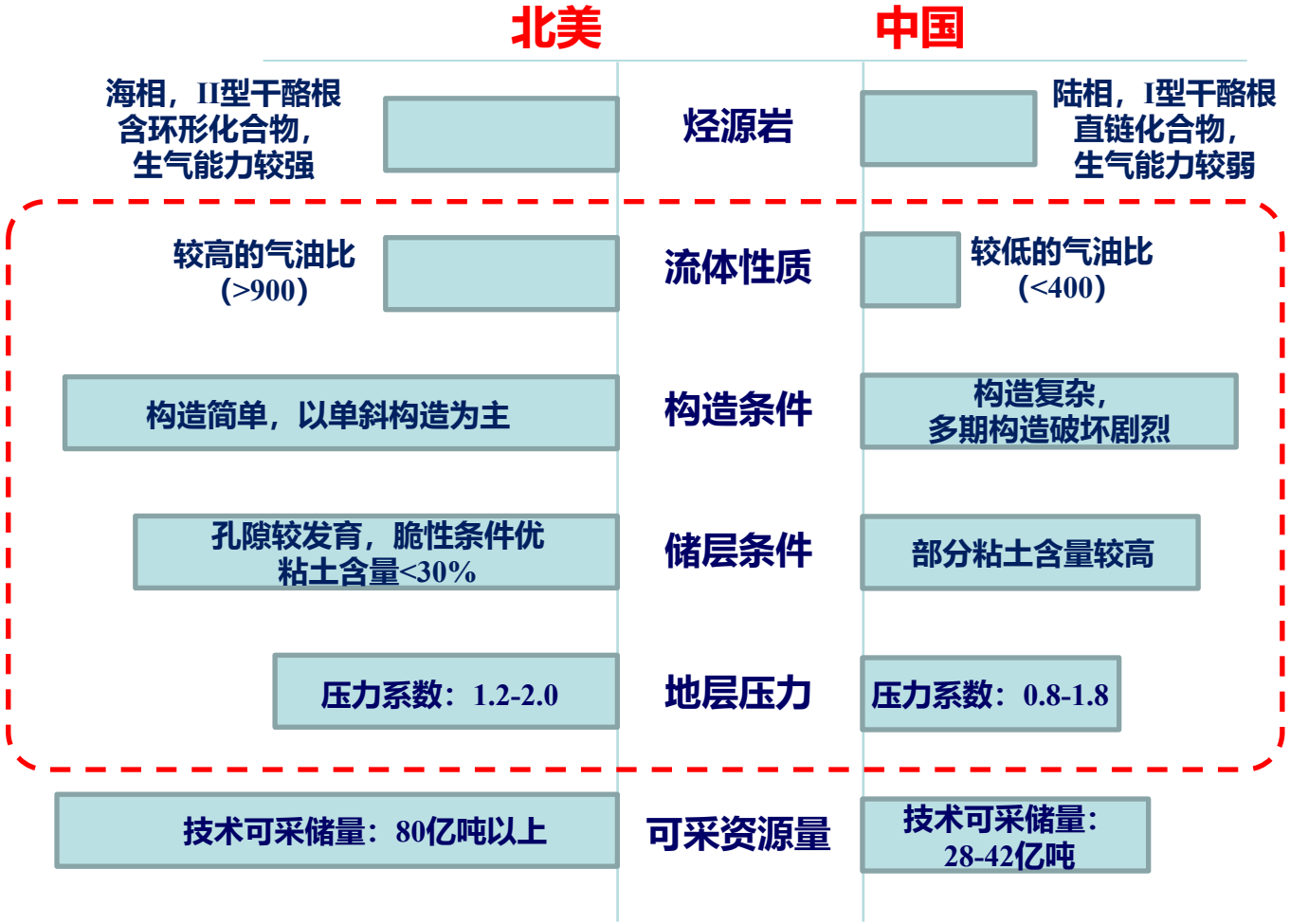


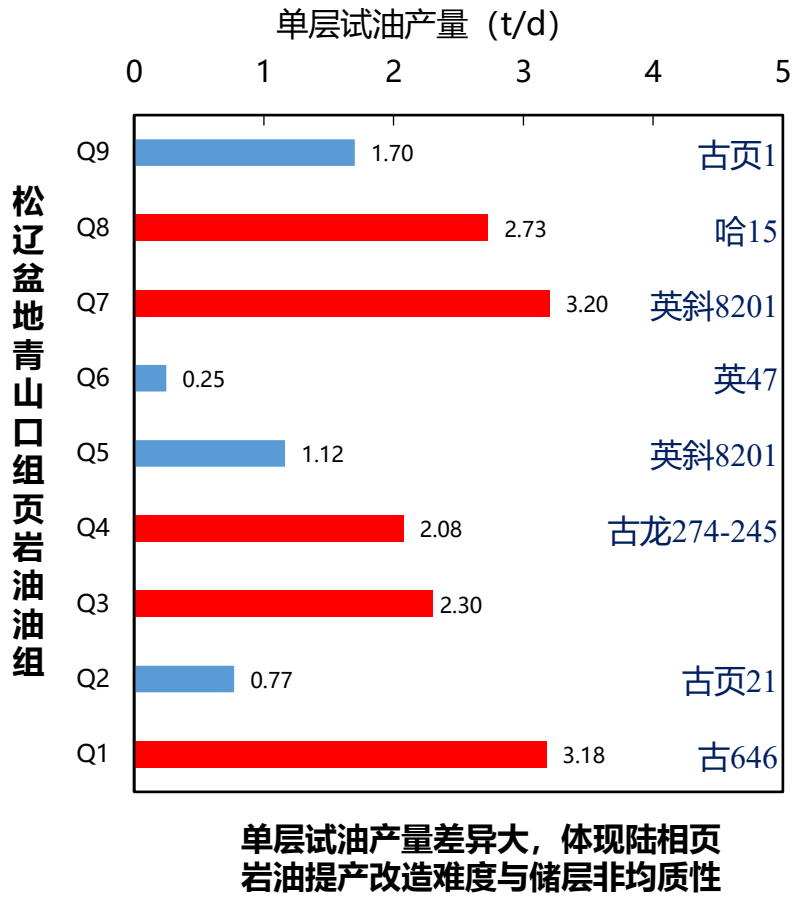
我国主要页岩油示范区产量情况及2025年规划目标

示范区名称	资源量（亿吨）	2023年年产量（万吨）	2024年年产量（万吨）	2025年规划产量（万吨）
新疆吉木萨尔陆相页岩油国家级示范区	36.4	80.1	114	170
大庆古龙陆相页岩油国家级示范区	219	17.1	46	100
胜利济阳页岩油国家级示范区	41.7	32.8	50	50
长庆油田陆相页岩油示范区	60.5	270	321	350
大港油田陆相页岩油示范区	26.5	11.2	11	15

研究背景：中国“陆相页岩油”发展瓶颈

中国陆相页岩油开发正面临提产难、改造难以及盆地和区块间差异大的困难，中高熟页岩油桶油完全开发成本总体偏高，2023年，三类页岩油（致密油型、过渡型、纯页岩型）单桶开发成本分别为68美元、57美元和77美元，远高于北美33美元，经济性差距较大。

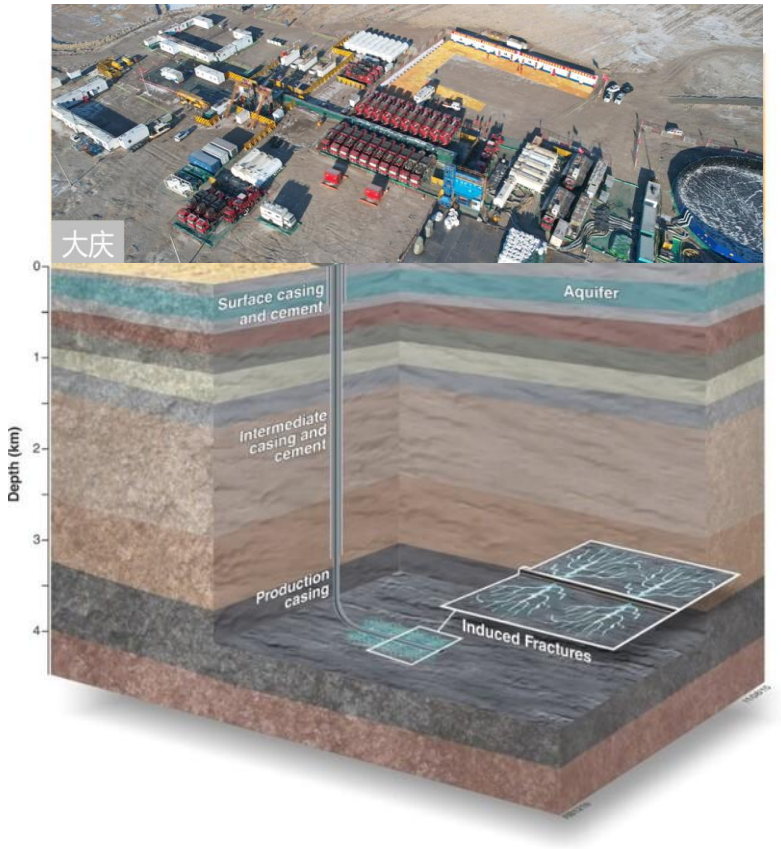


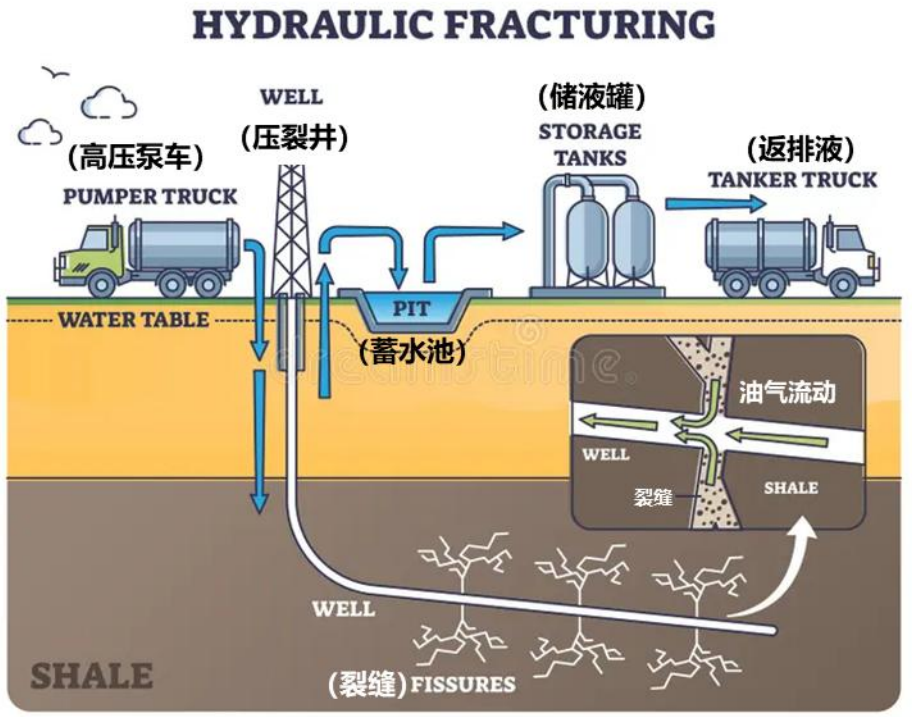


单层试油产量差异大，体现陆相页岩油提产改造难度与储层非均质性

研究背景：储层压裂改造增产措施

油田增产的核心目的为提升储层渗透率，当前主要技术为水力压裂技术，其是通过向地层注入高排量高粘性的压裂液，使井底产生高压，克服原始地应力和岩石的抗拉强度，使岩石破裂并产生裂缝，推动远离井筒的油气通过裂缝通道流向井筒，实现油气资源的规模化开发。



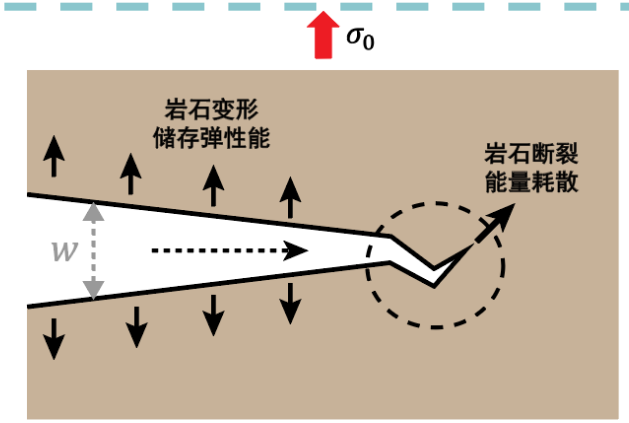


压裂工艺流程

研究背景：水力压裂力学模型

水力压裂力学机理：流体驱动岩石断裂

传统断裂



固体变形方程：

$$C_{ijkl}u_{k,li} + f_j = 0$$

$$n_i C_{ijkl}u_{k,l} = t_j$$

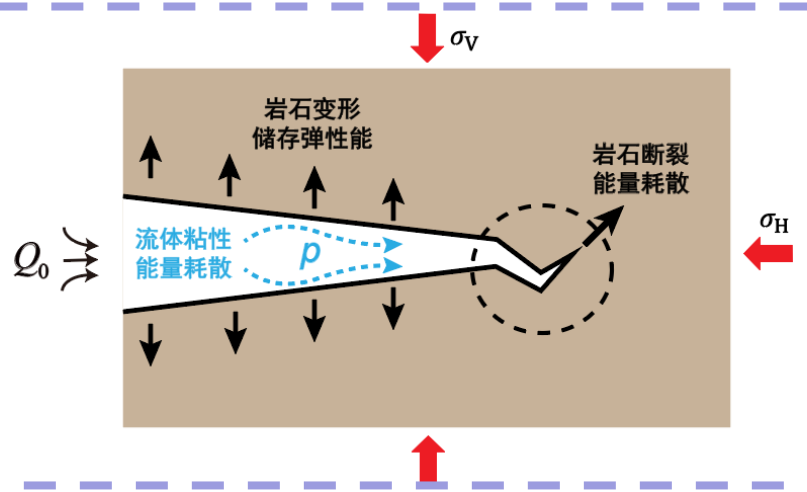
边界条件：

$$\sigma_\alpha \sim \frac{K_\alpha}{\sqrt{2\pi r}}$$

研究重心：

- 裂尖局部
- 扩展准则

水力压裂



固体变形方程

$$p(x,t) - \sigma_0 = \frac{E'}{4\pi}\int_{-\infty}^{0}\frac{\partial w}{\partial s}\frac{ds}{x-s}$$

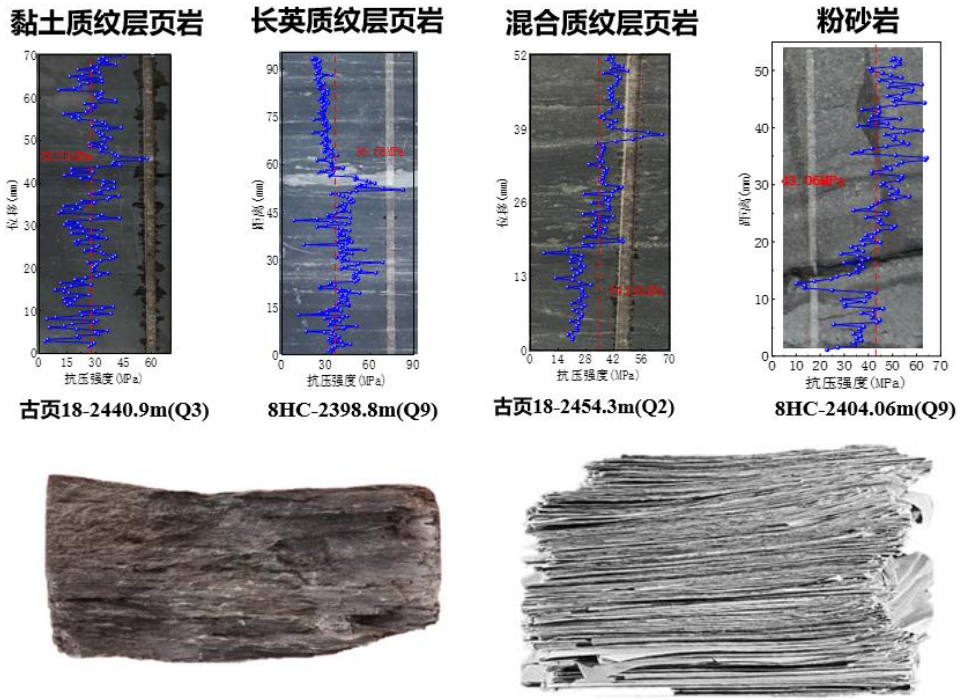
$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad q = -\frac{w^3}{12\mu}\frac{\partial p}{\partial x}$$

流体流动方程

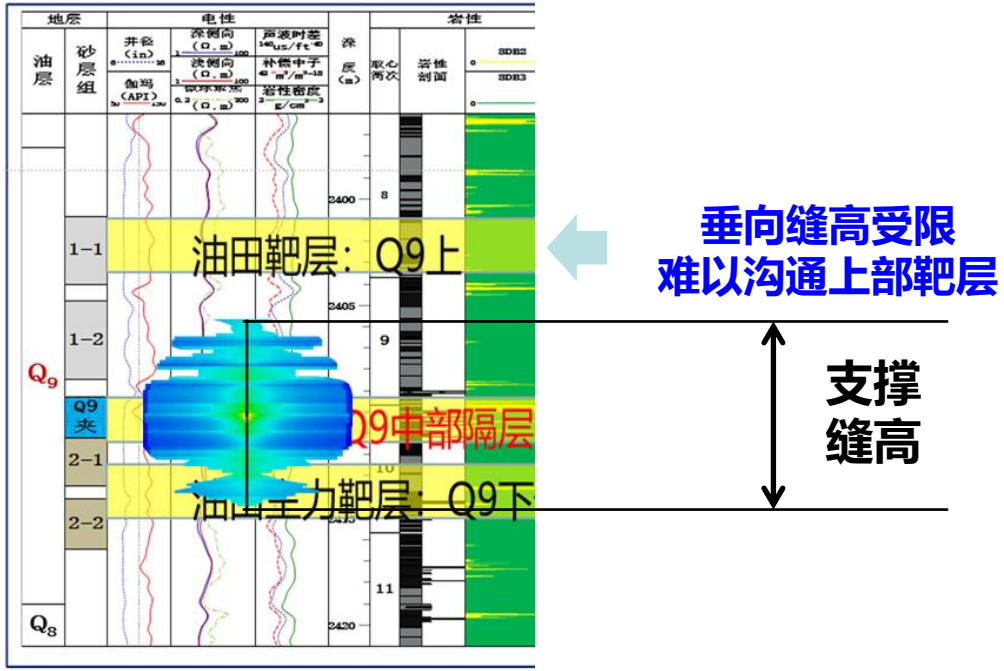
研究重心：

- 裂缝全域
- 耦合关系
- 扩展模式

工程难题：强非均质页岩水力压裂改造效果受限



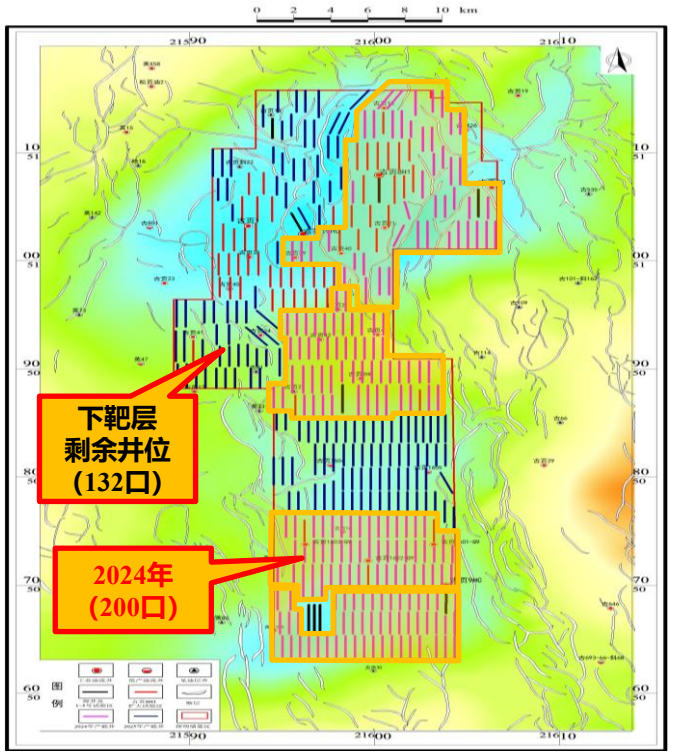
页岩“千层小薄饼”结构



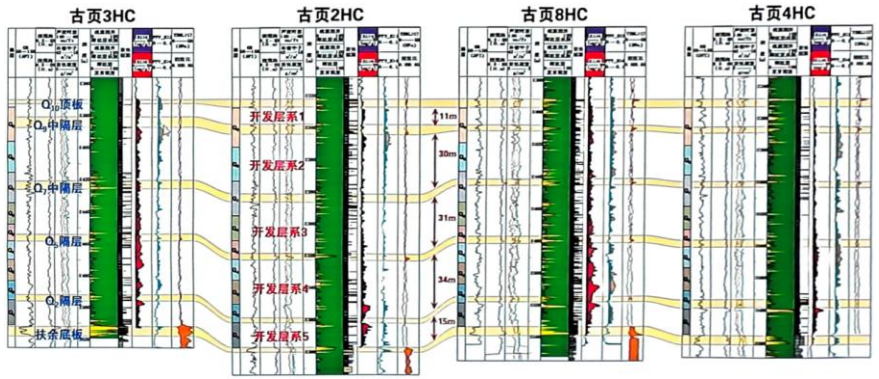
层理抑制裂缝沿高度方向扩展

受水力裂缝在垂直方向受到层理结构影响，穿层扩展所需能量增加，使其难以波及较远区域，改造范围受限。**对储层改造仅停留在井筒附近，远场改造效果差，无法对层内靶层实现充分开发。**

工程难题：强非均质页岩水力压裂改造效果受限

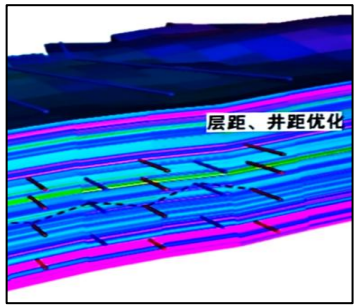


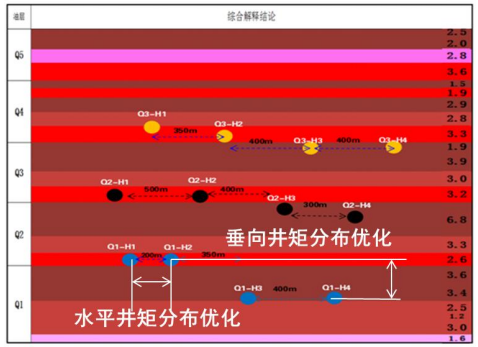
古龙页岩油Q9建设平面部署图



从下至上识别出4套稳定发育的隔层，
将Q1~Q9分为5套开发层系。

升级

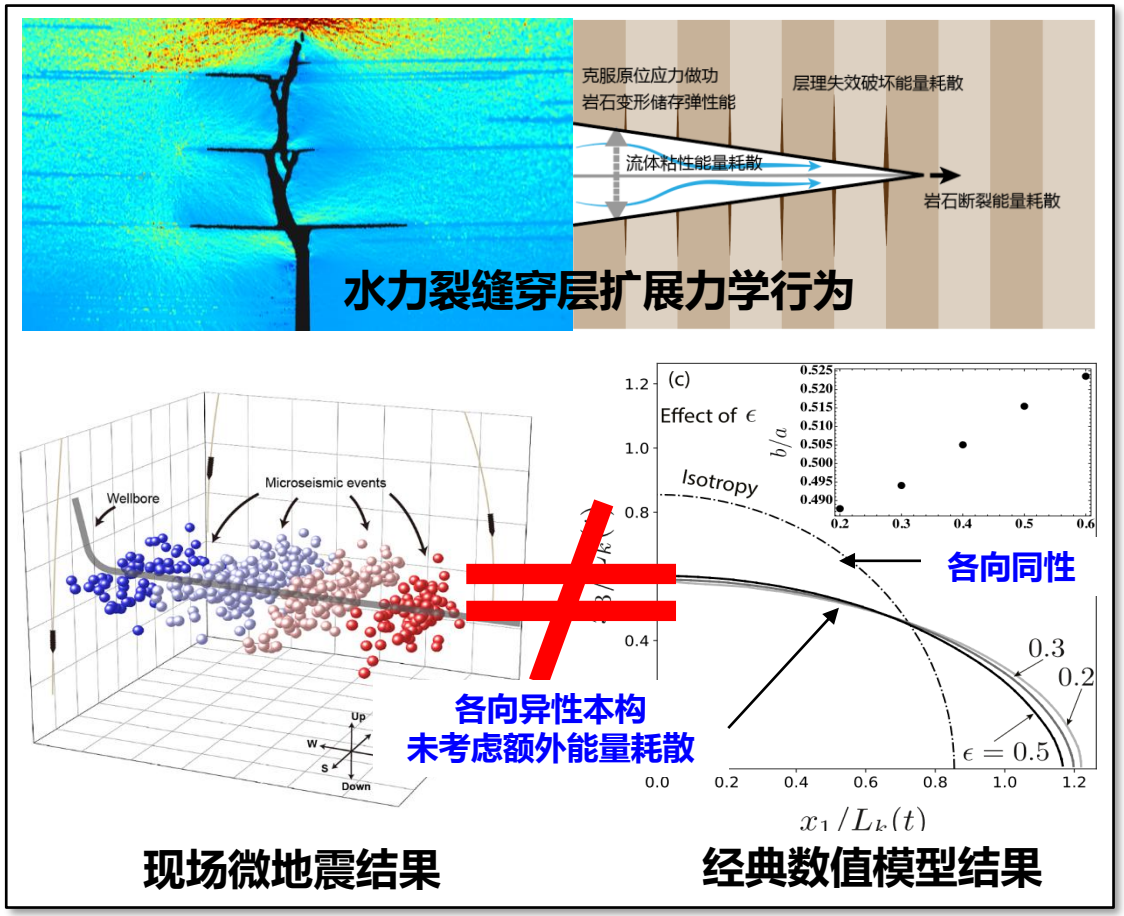


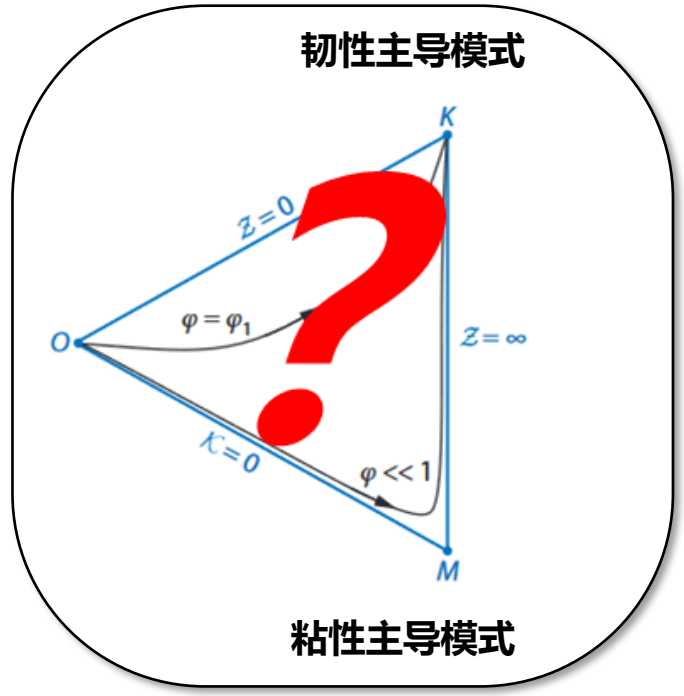


隔层作用下立体井网布置

- 陆相页岩油纵向有利层段连续分布，层厚大，单层压裂难以充分动用，需要基于系统思维、立体动用；
- 需充分考虑裂缝穿层扩展能力确定立体井网沿高度的布置套数及其纵向间距。

科学问题 1：多尺度非均质岩层裂缝扩展模式



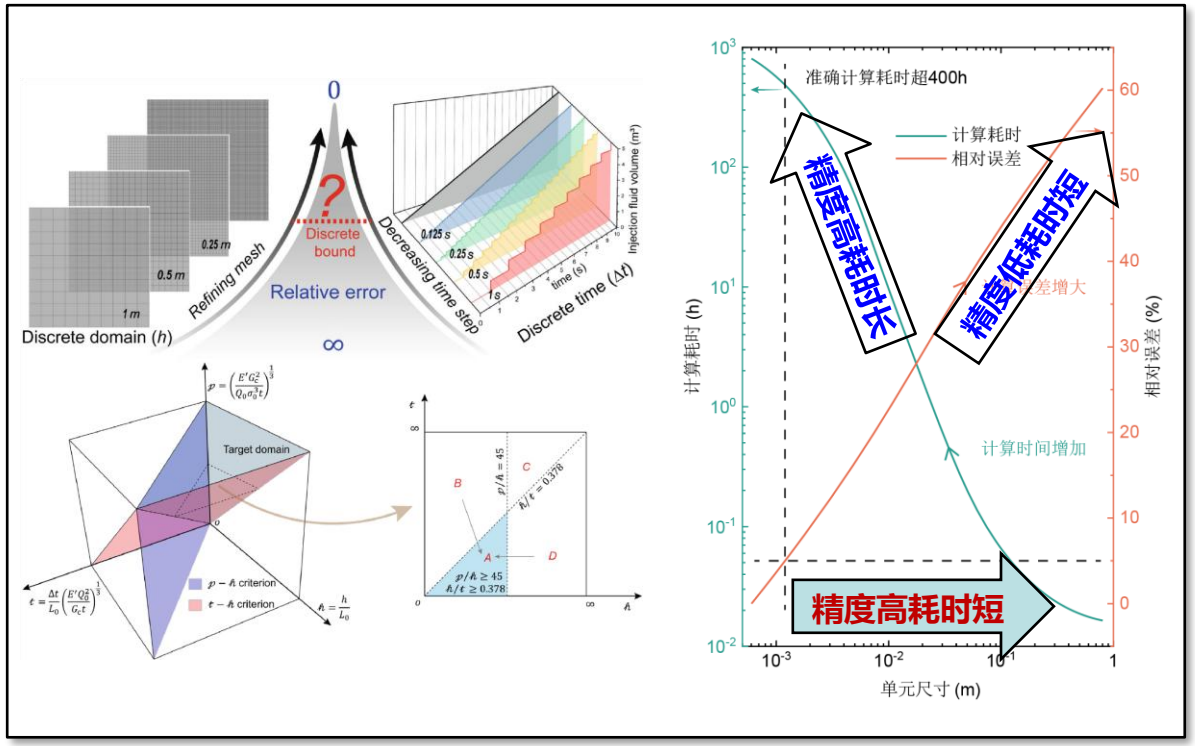


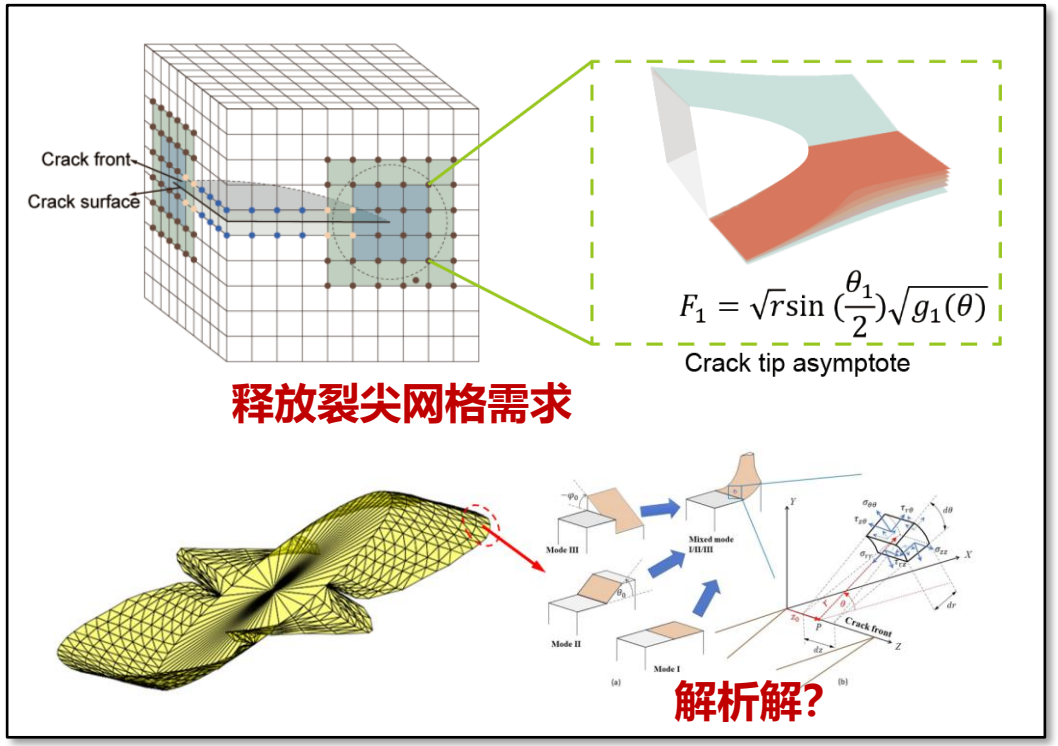
传统均质理论扩展模式不再适用

根据测量得到的数据通过各向同性本构或横观各向同性结构均无法描述现场监测裂缝结构。

高密度层理结构作用下水力裂缝扩展是否存在新的扩展模式，是否存在额外能量耗散机制?

科学问题 2：储层尺度水力压裂高效数值方法





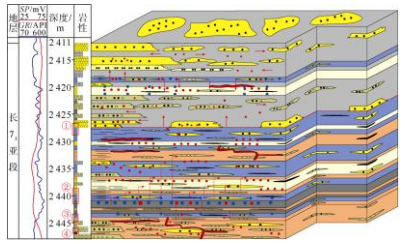
针对数值方法，受裂尖奇异场及流固耦合作用，**储层压裂百米级裂缝扩展模拟中自由度达千万级**，非线性迭代收敛慢，不利于工程应用，**需要解析与数值相结合的思路。**

- 裂尖解如何引入数值模型?
- 如何得到界面作用下裂尖解?
- 三维裂尖增强的实现方法?

报告提纲

1. 材料多尺度力学建模和设计
   - ① 研究背景
   - ② 微纳结构材料力学设计
   - ③ 纳米孔隙膜材料力学设计
2. **油气开发计算方法及工程应用**
   - ① 研究背景
   - **② 数值模型和求解算法**
   - ③ 油田现场应用

技术方案和研究思路

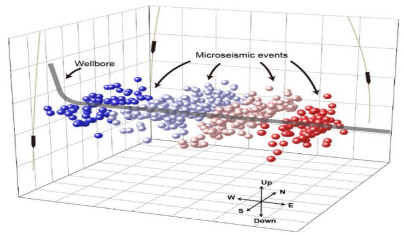


页岩分层沉积

成因

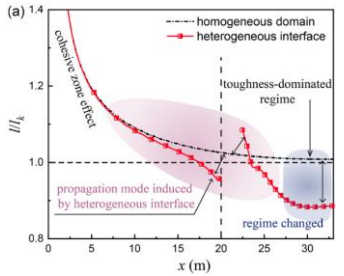
界面不连续

主导



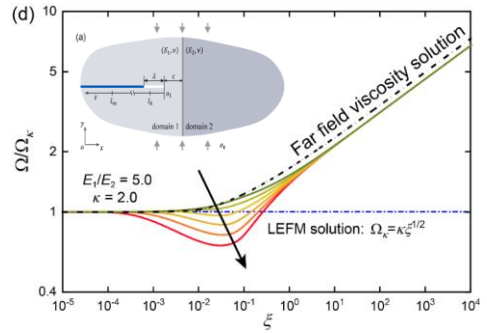
裂缝扩展受限

诱导扩展模式转变



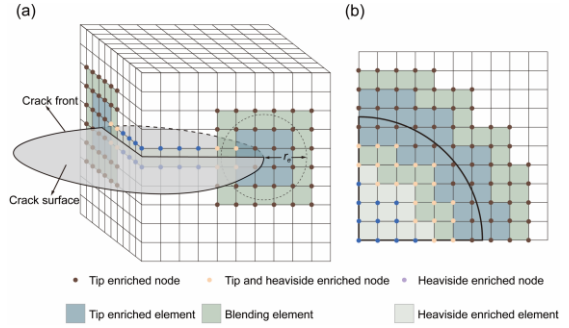
理论模型

数值方法



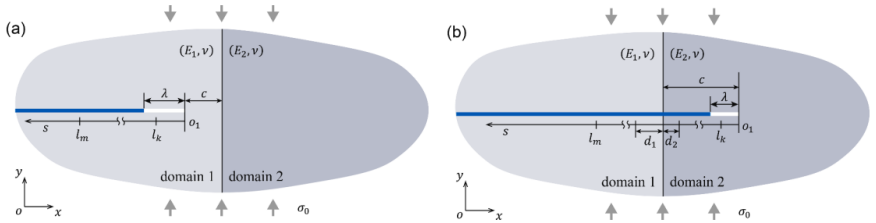
界面作用裂尖渐近分析
扩展模式演化定量表征

支撑



三维裂缝尖端增强框架
局部自适应裂尖解析修正

非均质界面作用下裂尖渐近解



$$\frac{1}{\pi}\frac{4\mu_1}{\kappa+1}\int_a^b \phi(s)\left[\frac{1}{s-x}+K_{add}^{L}(x,s)\right]ds = -p(x)+\sigma_0$$

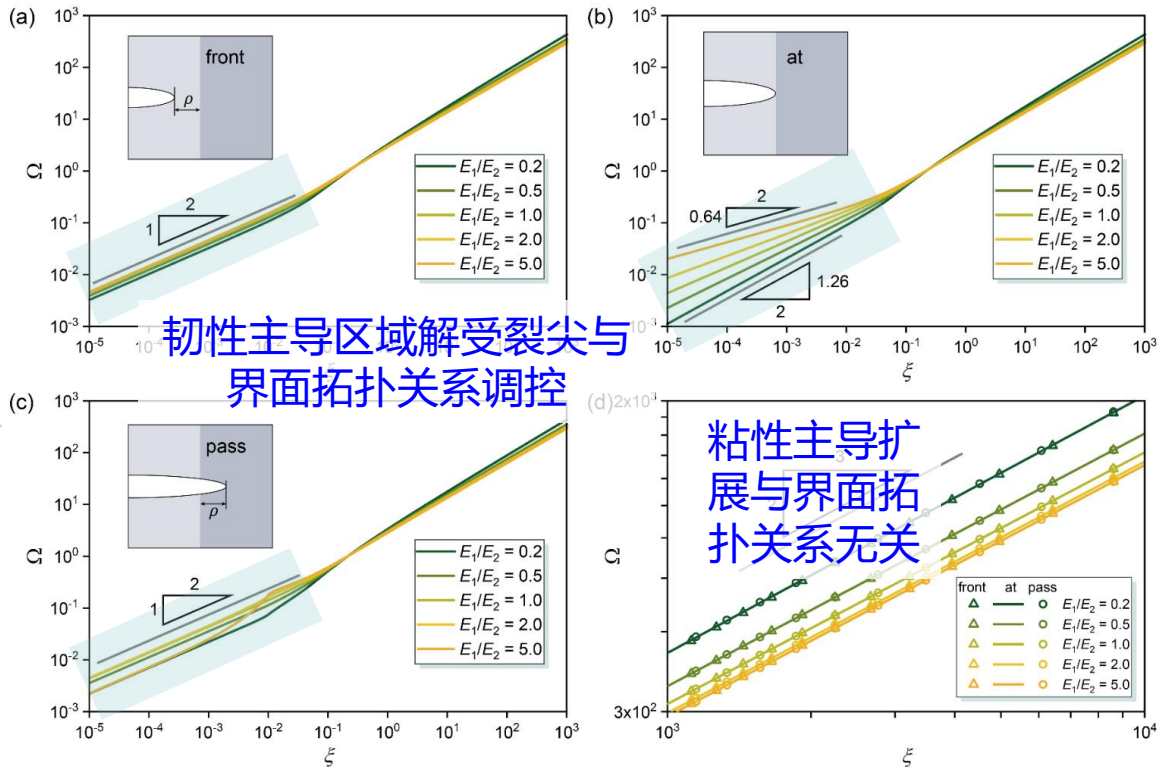
异质界面修正核函数

尺度化：

$$L_\mu = \frac{\mu' V E'^2}{\sigma_0^3}, \qquad \epsilon = \frac{\sigma_0}{E'}, \qquad \kappa = \left(\frac{\sigma_0 K'^2}{4\mu' V E'^2}\right)^{1/2}$$

$$w = \epsilon\Omega L_\mu, p-\sigma_0 = \Pi\sigma_0, x = \xi L_\mu, s = \eta L_\mu, c = \rho L_\mu$$

裂尖渐近分析模型修正



韧性主导区域解受裂尖与界面拓扑关系调控

粘性主导扩展与界面拓扑关系无关

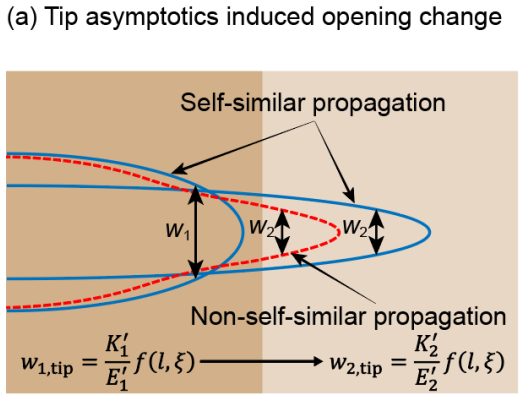
不连续界面下水力裂缝尖端渐近行为改变：

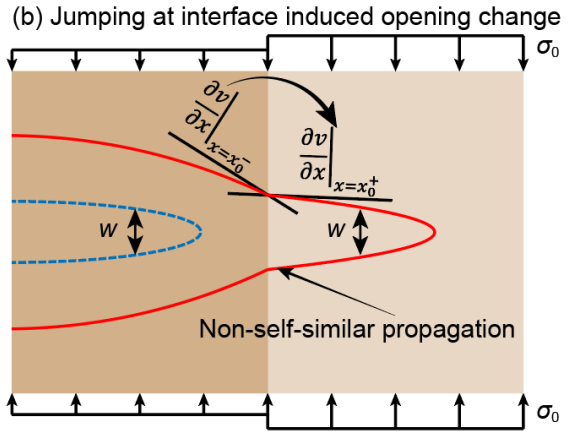
- **建立双材料界面作用下半无限长裂尖理论模型，引入新的特征尺度表征界面作用；**
- **裂尖渐近行为表明韧性主导裂缝在穿透界面时扩展模式变化为界面主导扩展模式，粘性主导裂缝不受界面不连续性的影响。**

界面扰动下水力裂缝扩展模式演化

界面不连续性作用

- 界面处断裂韧性突变
- 界面处开度导数不连续





$$\begin{cases} \dfrac{1}{4\pi\gamma_{\mathrm{K}}}\displaystyle\int_0^1 \frac{\partial \Omega_{\mathrm{K}}}{\partial \eta}\frac{2\eta}{\xi^2-\eta^2}\,\mathrm{d}\eta = \Pi_{\mathrm{K}} \\ \dfrac{1}{3}\mathcal{M}\Omega_{\mathrm{K}} - \dfrac{2}{3}\mathcal{M}\xi\dfrac{\partial \Omega_{\mathrm{K}}}{\partial \xi} = \dfrac{\partial}{\partial \xi}\left(\Omega_{\mathrm{K}}^3\dfrac{\partial \Pi_{\mathrm{K}}}{\partial \xi}\right) \\ \Omega_{\mathrm{K}} = (1-\xi)^{1/2} \end{cases}$$

均质模型粘性主导控制方程

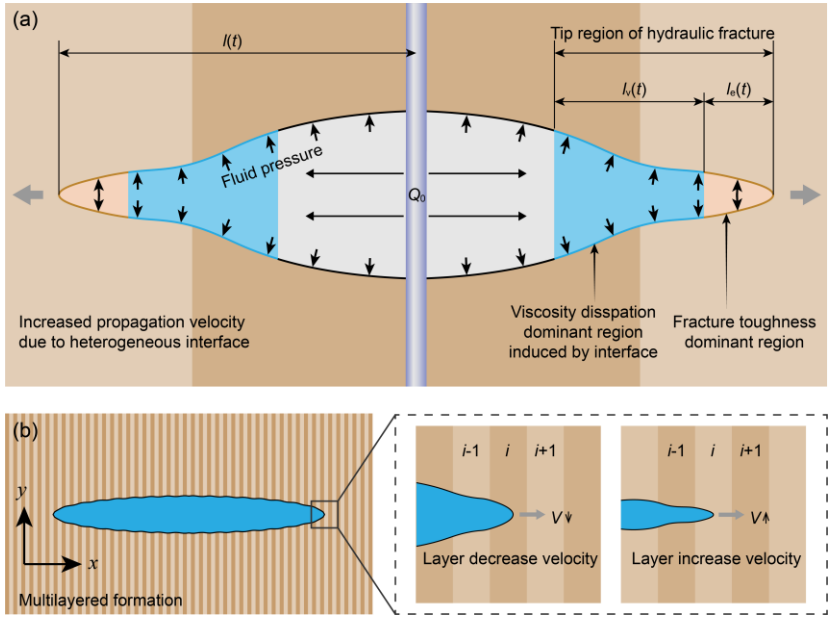
$$\begin{cases} \dfrac{1}{4\pi\hat{\delta}_{\mathrm{K}}}\displaystyle\int_0^1 \frac{\partial \hat{\Omega}_{\mathrm{K}}}{\partial \eta}\frac{2\eta}{\xi^2-\eta^2}\,\mathrm{d}\eta = \hat{\Pi}_{\mathrm{K}} \\ \mathcal{M}\dfrac{\dot{\Psi}t'}{2(1+\Psi)}\hat{\Omega}_{\mathrm{K}} - \mathcal{M}\dfrac{\dot{\Psi}t'}{1+\Psi}\xi\dfrac{\partial \hat{\Omega}_{\mathrm{K}}}{\partial \xi} + \mathcal{M}\dot{\Upsilon}t'\dfrac{\partial \hat{\Omega}_{\mathrm{K}}}{\partial \Psi} = \dfrac{\partial}{\partial \xi}\left(\hat{\Omega}_{\mathrm{K}}^3\dfrac{\partial \hat{\Pi}_{\mathrm{K}}}{\partial \xi}\right) \\ \hat{\Omega}_{\mathrm{K}} = (1-\xi)^{1/2} \end{cases}$$

界面不连续影响下裂缝控制方程

首次从理论模型给出了界面主导扩展模式演化的力学机理：韧性主导裂缝穿层后粘性系数增大，裂缝扩展模式由韧性主导转化为粘性主导。

Int. J. Eng. Sci. 2024

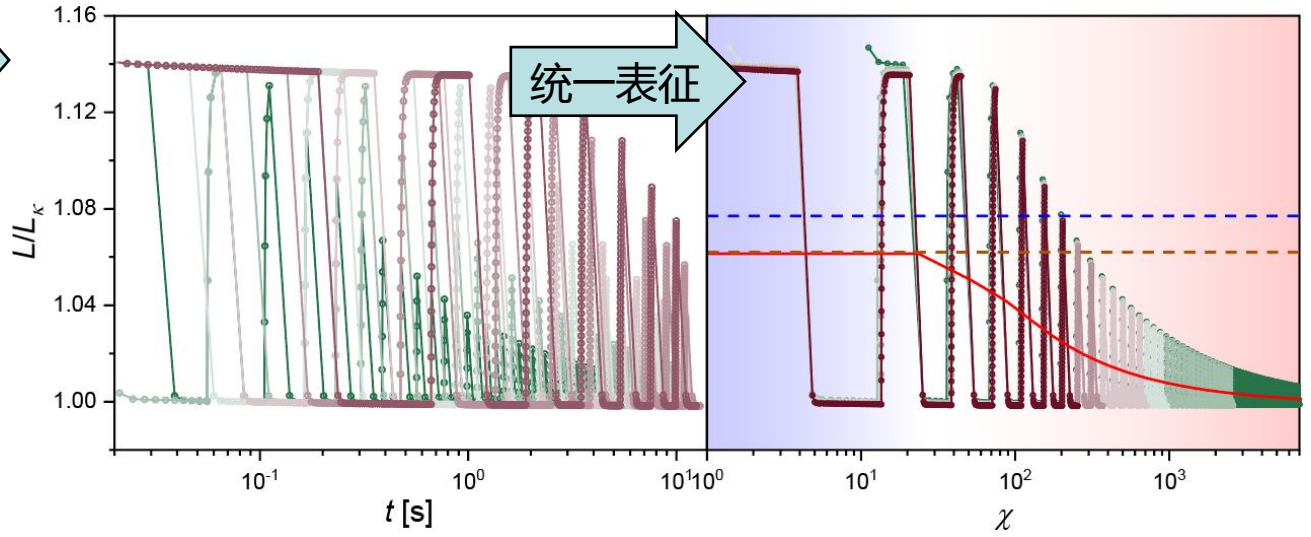
非均质页岩水力压裂时-空演化标度率



在多层非均质模型中，界面激发作用周期性出现，而其演化过程受时间及层厚控制

多层非均质模型中引入受界面作用扩展特征尺度：

$$\Gamma = \frac{E'^{1/3} Q_0^{2/3} t^{2/3}}{G^{1/3}} \qquad \chi = \frac{t}{\mathbb{T}} = \left(\frac{\Gamma}{D}\right)^{2/3} = \left(\frac{E' Q_0^2 t^2}{D^3 G}\right)^{1/2}$$



提出了层厚与注入时间之间的标度率，描述了穿层过程任意时刻对多层结构均匀化模型中裂缝扩展等效断裂韧性的修正，为高密度层理作用下裂尖增强函数修正提供理论基础。

J. Mech. Phys. Solids 2026

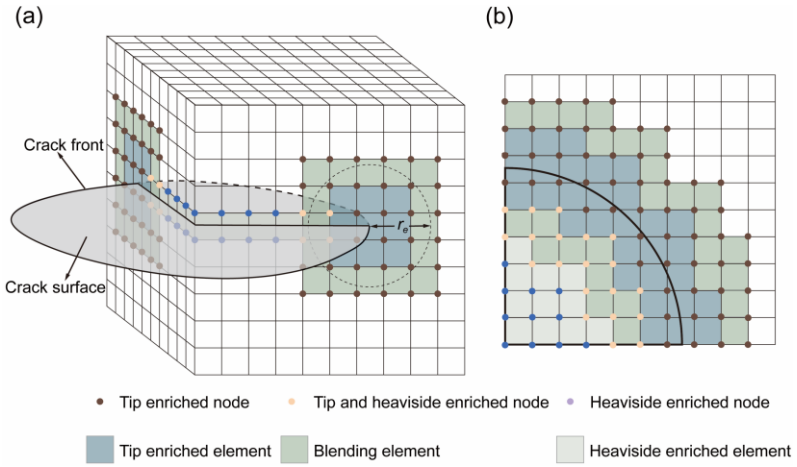
三维扩展有限元(XFEM)裂尖增强

扩展有限元（XFEM）插值位移场：

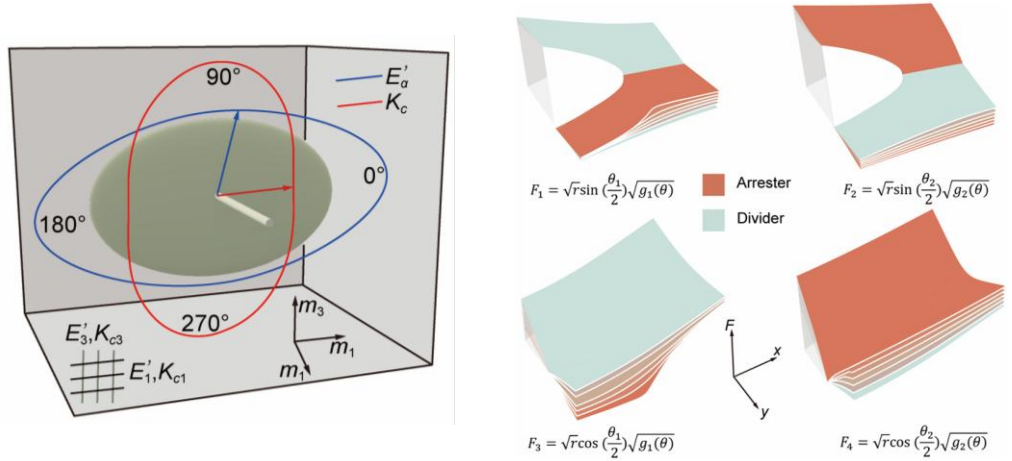
$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t)=\sum_{i\in I}\mathbf{u}_i(t)N_i(\mathbf{x})+\sum_{j\in J}\mathbf{b}_j(t)N_j(\mathbf{x})H(\psi(\mathbf{x},t))+\sum_{k\in K}N_k(\mathbf{x})\left(\sum_{l=1}^{4}\mathbf{a}_k^l(t)B_l(\mathbf{r},\theta)\right)$$

常规插值位移场　　缝身阶跃增强位移场　　裂尖奇异增强位移场

基于XFEM的三维裂缝单元增强策略



模量和断裂韧性各向异性的三维裂尖增强单元



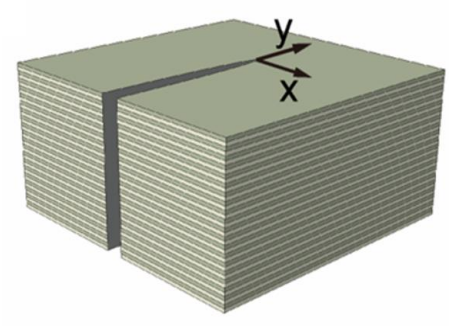
将裂尖局部解析场引入扩展有限元法 (XFEM)裂尖单元形函数，无需裂尖网格加密的同时提高裂尖计算精度，更加高效的实现水力裂缝在非均质页岩中复杂扩展行为的准确描述。

非均质水力裂缝裂尖增强函数构造

扩展有限元（XFEM）插值位移场：

$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t)=\sum_{i\in I}\mathbf{u}_i(t)N_i(\mathbf{x})+\sum_{j\in J}\mathbf{b}_j(t)N_j(\mathbf{x})H(\psi(\mathbf{x},t))+\sum_{k\in K}N_k(\mathbf{x})\left(\sum_{l=1}^{4}\mathbf{a}_k^l(t)B_l(\mathbf{r},\theta)\right)$$

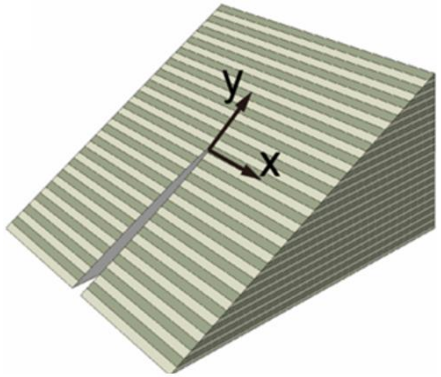
常规插值位移场　　缝身阶跃增强位移场　　裂尖奇异增强位移场



均质线弹性
断裂力学裂尖解

基于均质线弹性裂尖解的**显式特征函数**构造裂尖增强函数：

$$\{B_l(r,\theta)\}_{l=1}^{4}=\left\{\sqrt{r}\sin\frac{\theta}{2},\sqrt{r}\cos\frac{\theta}{2},\sqrt{r}\sin\theta\sin\frac{\theta}{2},\sqrt{r}\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}\right\}$$



异质界面调控
水力裂缝尖端渐进解

基于非均质界面修正的**隐式裂尖解**构造裂尖增强函数：

$\xi\to 0$：　韧性主导扩展

$$\frac{1}{4\pi}\int_0^{\infty}\phi(\eta)\frac{1}{\xi-\eta}d\eta=\Pi(\xi)-\frac{1}{4\pi}\int_0^{\infty}\phi(\eta)\left[g_0(r,\rho,\eta)+\cdots\right]d\eta=\Pi(\xi)+G_0(r,\rho)+o(\xi)$$

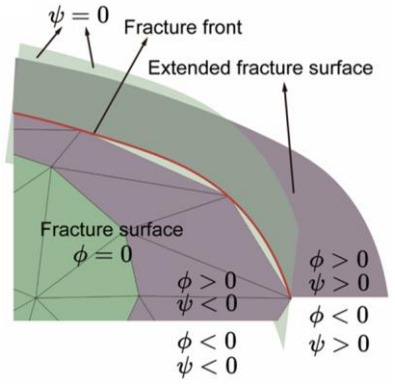
$\xi\to\infty$：　粘性主导扩展

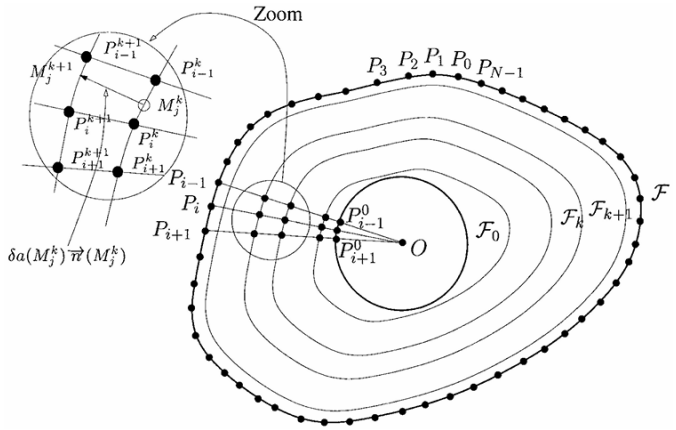
$$\frac{1}{4\pi}\int_0^{\infty}\phi(\eta)\frac{1}{\xi-\eta}d\eta=\Pi(\xi)-\frac{1}{4\pi}\int_0^{\infty}\phi(\eta)\left[\frac{1}{\xi}h_1(r,\rho,\eta)+\cdots\right]d\eta=\Pi(\xi)+\frac{1}{\xi}H_1(r)+o\left(\frac{1}{\xi^2}\right)$$

将经典均质显式理论解与异质界面修正的隐式裂尖渐进解叠加，构造了层状非均质页岩结构中裂缝任意前沿局部沿其法向扩展的裂尖增强函数。

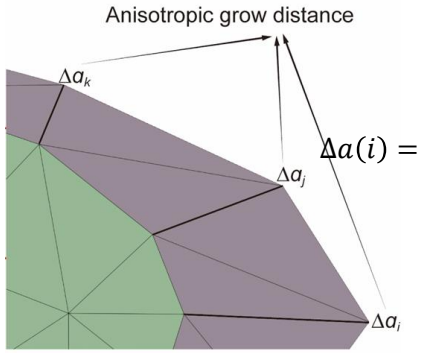
非均质三维水力裂缝扩展显式插值计算框架

隐式裂缝前沿扩展步长迭代求解策略





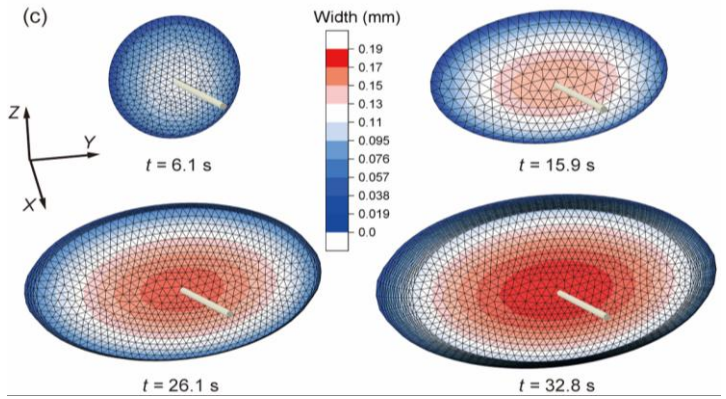
显式裂缝前沿扩展步长插值计算框架

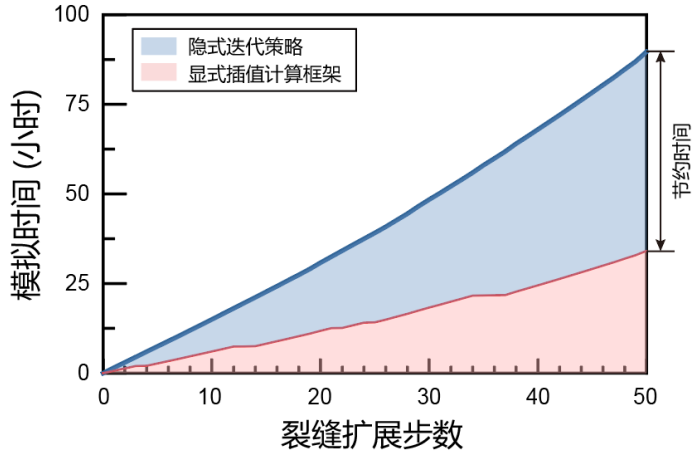


$$\Delta a(i) = \begin{cases} 0, & 0 \le \dfrac{K_I(i)}{K_c(i)} < 1-\gamma \\ \dfrac{\Delta a_{max}}{\gamma-\beta}\lambda(i)\left(\dfrac{K_I(i)}{K_c(i)} - (1-\gamma)\right), & 1-\gamma \le \dfrac{K_I(i)}{K_c(i)} < 1-\beta \\ \Delta a_{max}\lambda(i), & 1-\beta \le \dfrac{K_I(i)}{K_c(i)} \le 1+\beta \end{cases}$$

$\lambda(i)$为**异质性层理修正**的裂缝前沿各点理论渐进比例因子

三维水力裂缝扩展高效求解



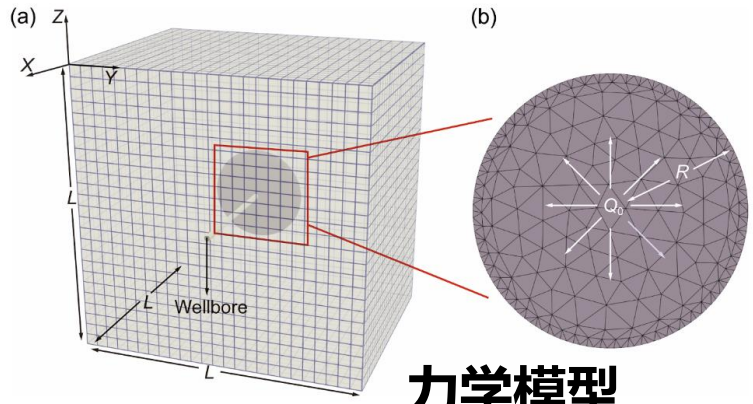


运用异质性界面修正的裂尖解析解，建立了裂缝前沿扩展步长显式插值计算框架，避免隐式迭代求解，节约3-4倍计算时间，显著提高三维水力裂缝计算效率。

Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 2025

计算结果和现场数据的对比验证

数值计算



力学模型

传统均质模型
缝长/缝高=1

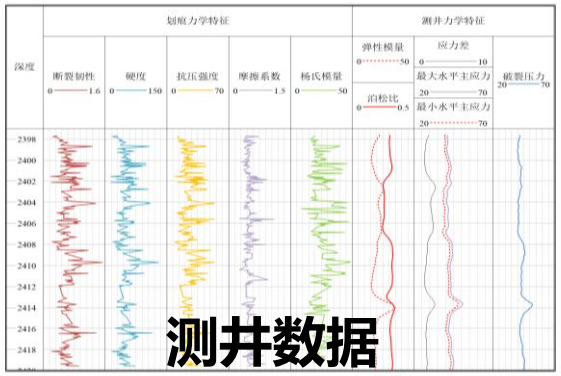
本构修正
缝长/缝高=2.22

本构修正+断裂韧性修正
缝长/缝高=16.25

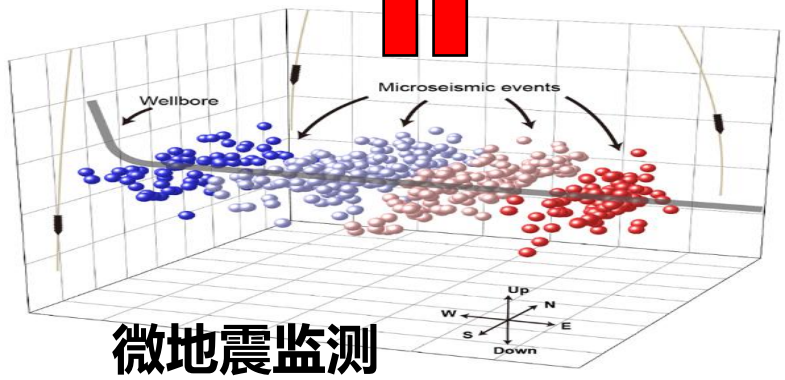
修正裂尖增强函数

对比验证

现场数据



测井数据



微地震监测

准确捕捉到现场微地震压裂监测到的在连续层状储层中缝长/缝高>10的裂缝发育特征。

学术影响和同行评价

Hydraulic Fracturing and Enhanced Recovery in Shale Reservoirs: Theoretical Analysis to Engineering Applications

高被引论文

Yu, H (Yu, Hao) [1] ; Xu, WL (Xu, WenLong) [1] ; Li, B (Li, Bo) [1] ; Huang, HW (Huang, HanWei) [1] ; Micheal, M (Micheal, Marembo) [1] ; Wang, Q (Wang, Quan) [1] ; Huang, MC (Huang, MengCheng) [1] ; Meng, SW (Meng, SiWei) [2] ; Liu, H (Liu, He) [1] , [2] ; Wu, HA (Wu, HengAn) [1]

situation. Zhong et al. (2024) investigated the propagation pattern of hydraulic fractures at the lithological interface using the model developed by the extended finite element method (XFEM), and the conclusions obtained were similar to those of Liao et al. (2024). Zhang et al. (2022b) using the model developed by the XFEM, it is pointed out that the interface orientation, fracture toughness ratio, and material properties control the propagation pattern of hydraulic fractures at interfaces. Xie et al. (2020) obtained

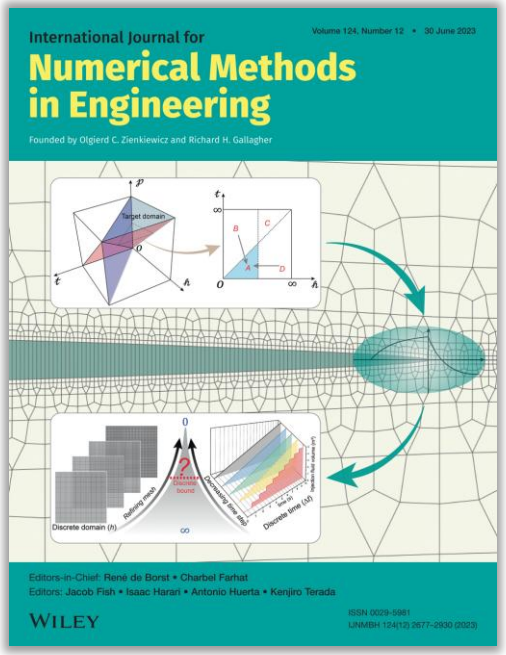


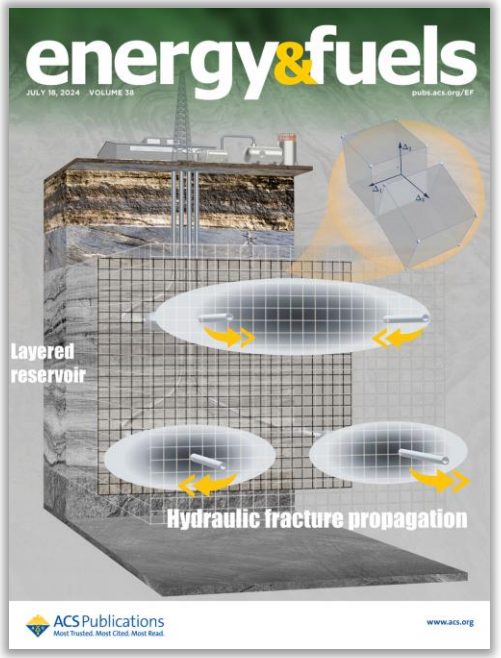
北京大学
金之钧 院士

the process of increasing storage and production of unconventional oil and gas resources. The hydraulic fracture propagation path during fracturing and the degree of communication with discontinuities, such as bedding surfaces and natural fractures, determine the complexity of the generated fracture network, which is also a critical index for the evaluation of reservoir stimulation (Yoshioka et al. 2023; Zheng et al. 2022a, 2021). As the combination of mechanical properties, pore structure,

“利用XFEM开发的模型指出，界面方向、裂缝韧性比以及材料特性控制着界面处水力裂缝的传播模式。”

“裂缝的扩展路径以及与界面的连通程度，决定了所形成的裂缝网络的复杂程度，是评估储层增产效果的一个关键指标。”





“提出了裂缝与界面相交后扩展到能量准则。”

that in sandstone layer. Celleri and on of discontinuous Galerkin finite study the effect of weak bedding on e fracture is only allowed propagate , which makes the fracture propagation path mesh-dep o et al., 2017). Zhang et al. (2022) used the extended finite element d to simulate fracture propagation across different layers, which allow e fracture to propagate across element (Belytschko and Black, 1999), a they also presented an energy-based criterion to estimate fracture path after the fracture intersects an interface. Xie et al. (2020) adopted the displacement discontinuity method to determine whether the fracture penetrates the bedding plane with using a toughness criterion. Li and Wu (2022) employed the 3D displacement discontinuity method to investigate the impact of weak interface on fracture geometry. Both the extended finite



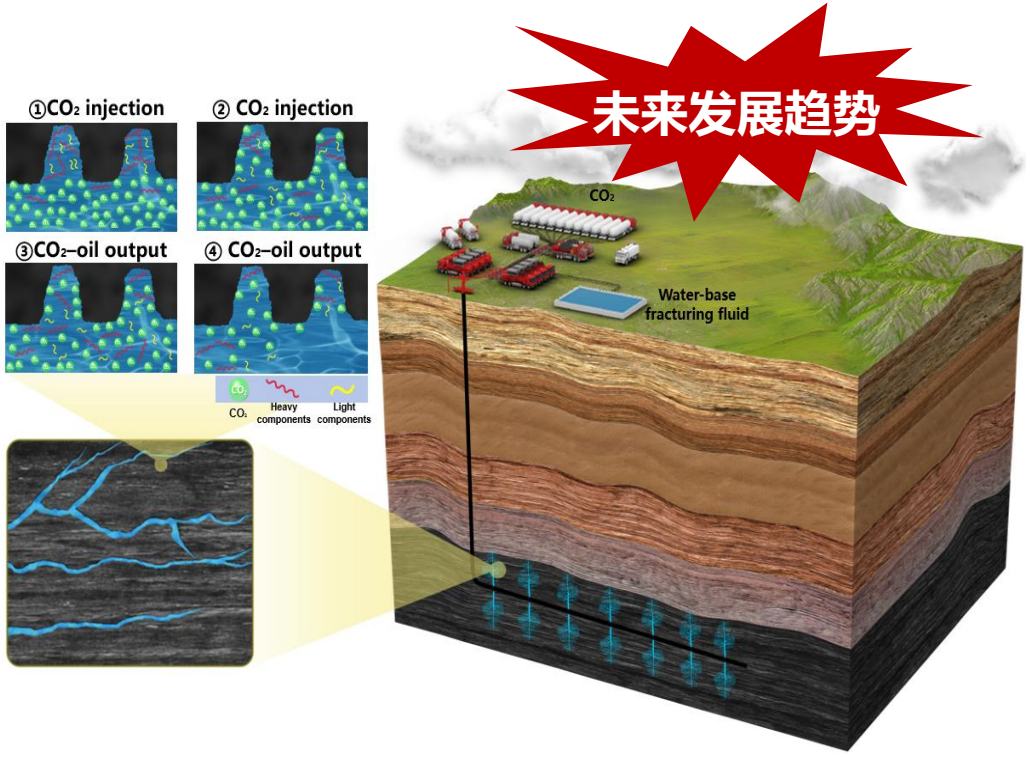
Gennady Mishuris
水力压裂理论权威学者
IJES副主编

“提出了系统的渐近解，这些方法在求解时所使用的均质模型渐近解需要进行更新，因为当裂缝在材料层之间扩展时，这些解可能会失去准确性。他们建议除了裂纹尖端和远场渐近解之外，还需要使用一个额外的界面渐近解。”

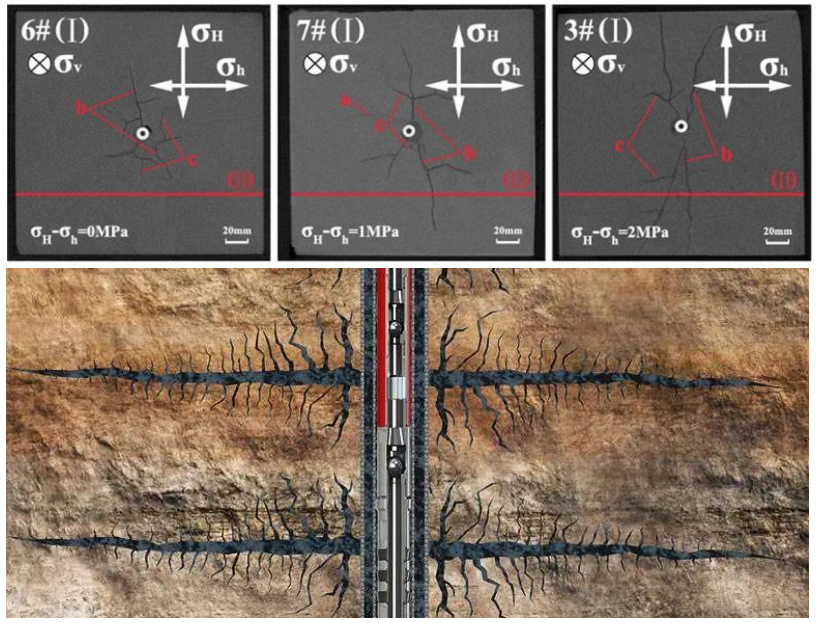
more general planar fra as an approach using the 3D-displacement discontinuity method by Li, Qi et al. (2024). An alternative appr rating conditions for initiation of crack propagation between distinct rock layers (Peruzzo et al., 2021; Peruzzo & Le within the level-set method was given by Peruzzo (2023). This has been applied to analyses of the effect of rock heterogen ack arrest in the case of buoyant fractures (Möri et al., 2024). It should be noted that Wang, Yu et al. (2024) suggested the syste asymptotics, which are utilised by these approaches when obtaining solutions[1] need to be updated, since the solutions may lose accuracy in cases of cracks propagating between material layers. They have suggested that an additional ‘intermediate’ asymptotic solution needs to be utilised, in addition to the crack-tip and far-field asymptotics.

二氧化碳压裂技术优势

- **减碳增效**：利用CO_2作为压裂介质，实现碳封存与资源开发协同，有助于双碳战略目标；
- **降低水污染**：CO_2压裂过程几乎不消耗水资源，避免了返排液带来的污染问题；
- **产生复杂裂缝**：易于在近井地带形成复杂分支裂缝和裂缝网络。



减少碳排放增加产能



产生复杂分叉裂缝



提高采收率10-20%

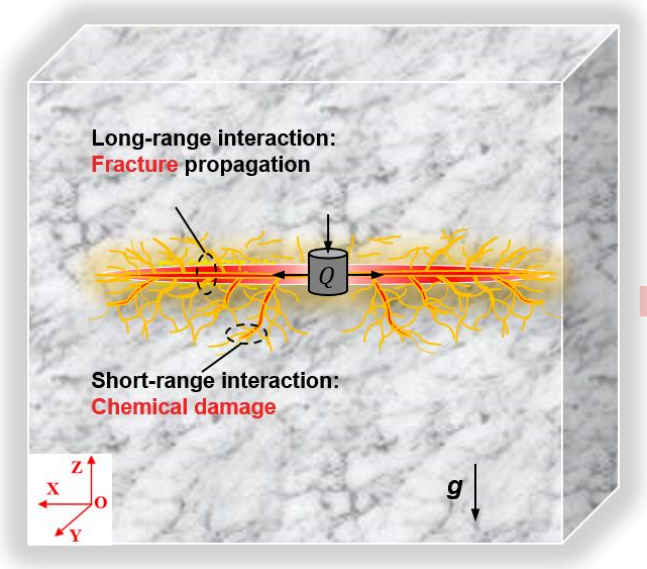


减少对水资源依赖30%



贡献减排10-15%

二氧化碳压裂中的酸化增强造缝特征



CO_2压裂和化学损伤双重作用

构建广义自由能

$$\Psi = \Psi_{\mathrm{m}} + \boldsymbol{\Psi_{\mathrm{f}}} + \boldsymbol{\Psi_{\mathrm{c}}} + \boldsymbol{\Psi_{\mathrm{i}}}$$

弹性能 断裂能 化学自由能 溶解界面能

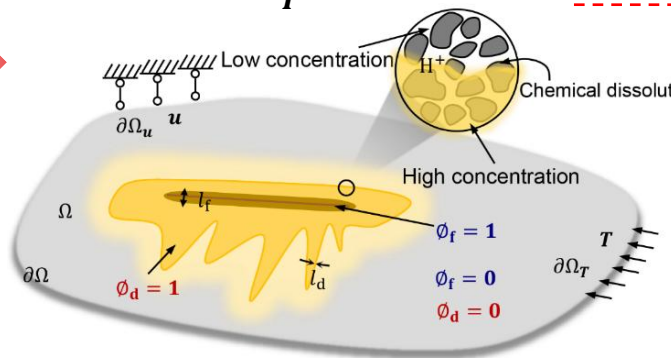
满足热力学第二定律

$$\boldsymbol{D} := \boldsymbol{\rho T \dot{\eta}} + \nabla \cdot \boldsymbol{Q} - \frac{1}{\boldsymbol{T}} \nabla \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{Q} \geq \mathbf{0}$$

变分

控制方程

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{n}} = 0$$
$$\nabla \cdot \boldsymbol{\zeta}_{\mathrm{f}} - \varphi_{\mathrm{f}} = 0$$
$$\nabla \cdot \boldsymbol{J}_{\mathrm{C}} + \dot{C} = 0$$
$$\nabla \cdot \boldsymbol{\zeta}_{\mathrm{d}} - \varphi_{\mathrm{d}} = 0$$

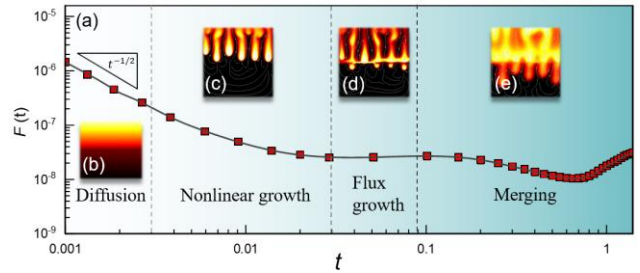


断裂相场、化学损伤相场多理论框架

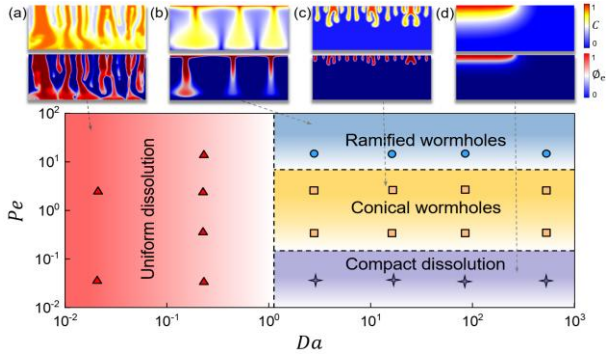
数学上光滑

物理上一致

数值上收敛



质量通量演化过程

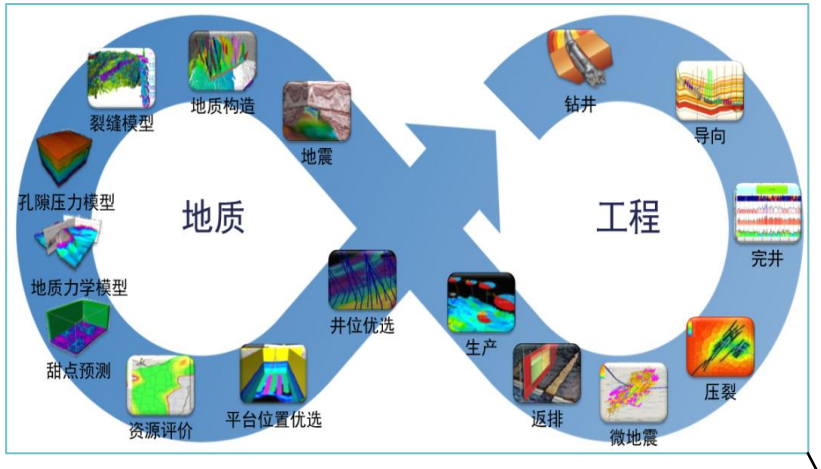


多相流动结构、岩石破坏模式相图

对于CO_2酸化效应削弱矿物强度促进断裂过程，发展了满足热力学一致性的多相场理论框架，构建了耦合变形、断裂、多相流动与化学损伤的多相场断裂模型，提出了区分不同多相流动结构和岩石破坏模式的综合相图。

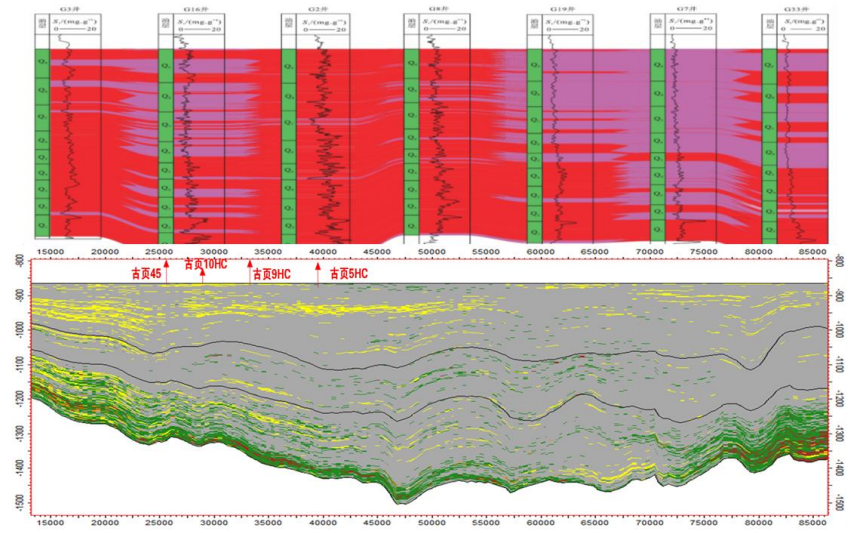
J. Mech. Phys. Solids 2025

地质工程一体化建模和分析

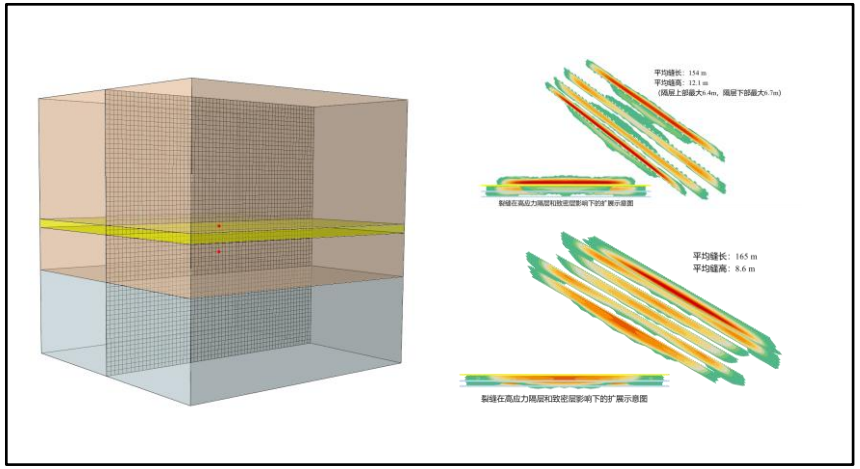


地质工程一体化

- 开发地质工程一体化分析模型；
- 以最终可采储量（EUR）为目标综合考虑油气赋存分布、可动用性，人造缝网区域来优化工艺。



油气赋存状态与可动用性



高保真压裂建模分析

超深层油气富集机理与高效开发关键技术

教育部基础学科与交叉学科突破计划先导项目，2025-2029

项目内容及目标

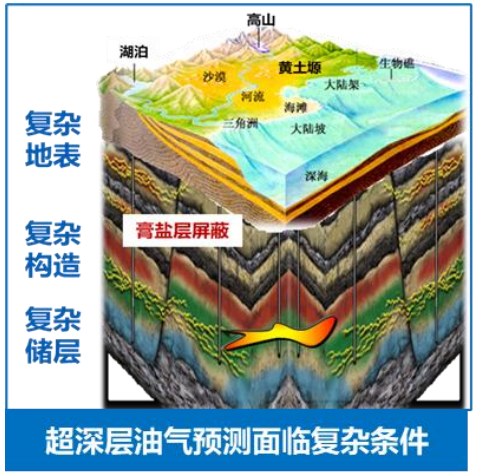
1. 圈层相互作用对超深层油气富集和天然氢气形成分布的控制作用机理

2. 地表地下双复杂条件下超深油气储层多源信息智能融合与有效预测

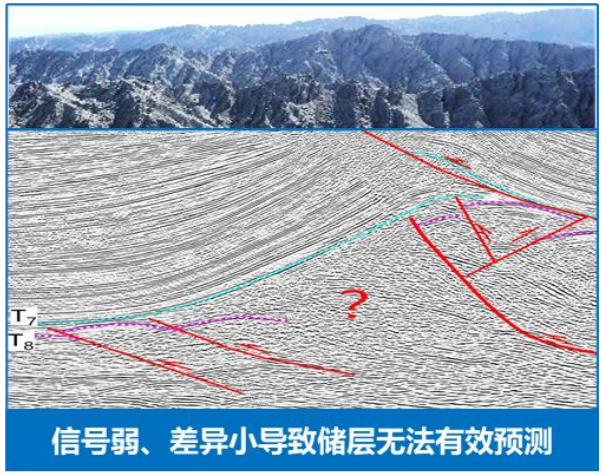


4. 超高温高压条件下多组分、多相流体多场耦合流动机制

3.超深层钻采关键材料装备及耐温抗盐机理与工程响应



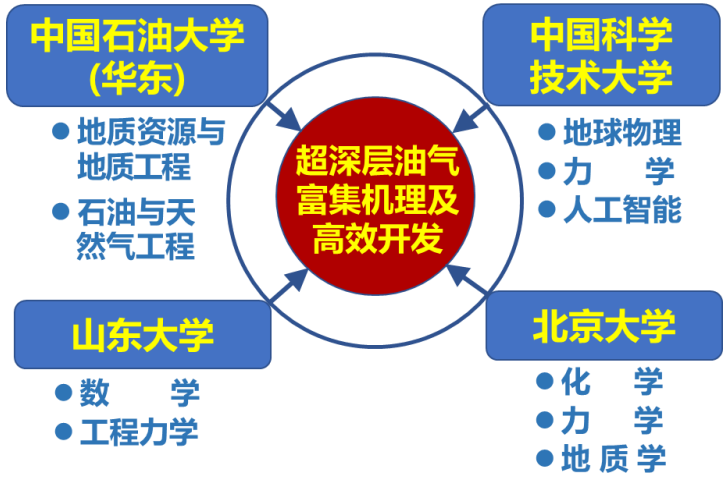
超深层油气预测面临复杂条件



信号弱、差异小导致储层无法有效预测

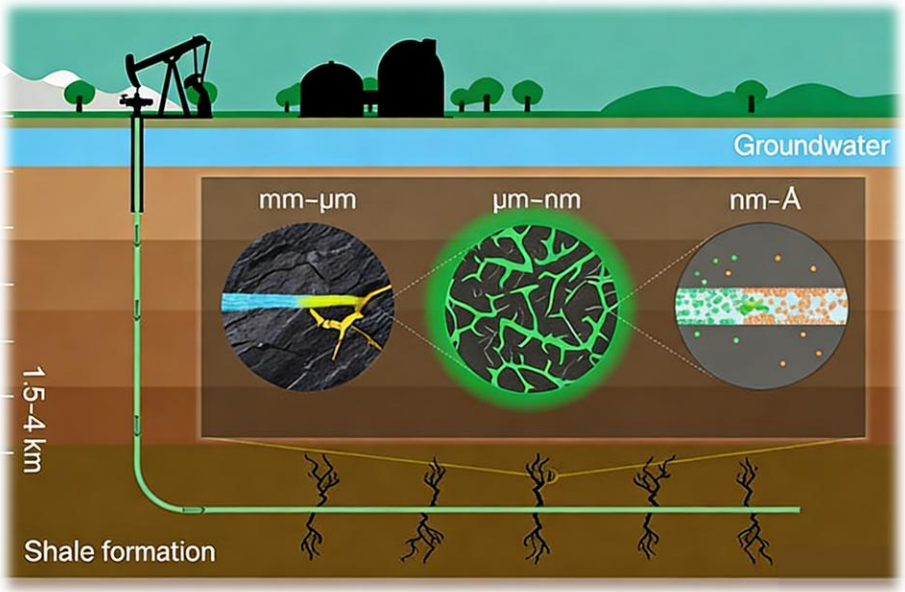
中国含油气盆地地表和地下地质条件高度复杂

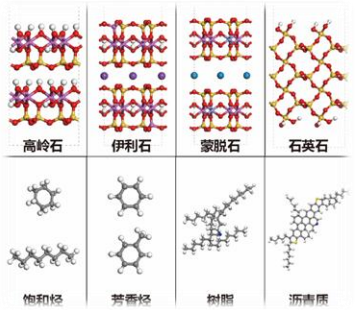
多校联合、校企协同、多学科交叉

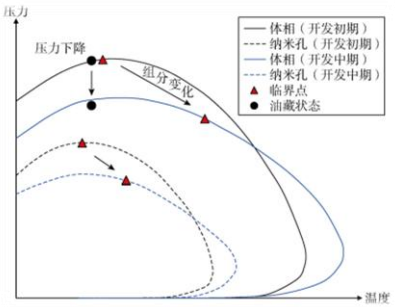


研究内容		2025年		2026年		2027年		2028年		2029年	
		1-6月	7-12月	1-6月	7-12月	1-6月	7-12月	1-6月	7-12月	1-6月	7-12月
科技创新	有机质富集机理			关键点目标 富有机质页岩形成机制 多场耦合模型 耐温耐盐关键材料							
	深层油气富集理论							关键点目标 深层油气富集理论 耐温耐盐工作液体系 随钻远探测装备			
	高精度地震成像软件									关键点目标 高精度成像软件 储层智能预测软件 多场耦合模拟软件 高效破岩装备	
	储层智能预测软件										
	钻井工作液材料与体系										
	高效破岩与远探测装备										
	开采工作液材料与体系										
	多场耦合流动模拟软件										
人才培养	人才培养模式与方案		关键点目标 多校联合、产教融合、厚基础、强工程、国际化人才培养体系								
	新形态教材					关键点目标 深地物质科学、油气智能识别等教材及课程					
	精品课程									关键点目标 深地能源科学与技术学科	
交叉学科											

纳孔隙页岩油气的可动性评价







纳孔隙页岩油气可动性，是决定“地质甜点”能否转化为“可采经济甜点”的**微观关键控制因素**。

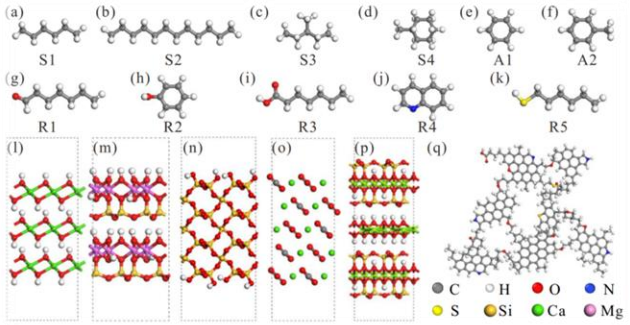
研究挑战：

- 油组分及储层壁面构成复杂
- 多组分相态变化的判定困难
- 纳流动与分子热运动的耦合

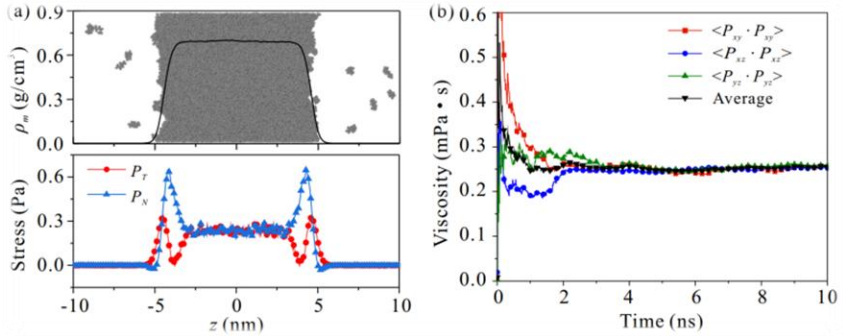
解决思路：

- 结合实验数据构建复杂体系分子模型
- 基于局部分子近邻分析提出相变判据
- 建立启动及可动性的跨尺度评价方法

纳孔隙页岩油气的可动性评价



古龙页岩油可动用性评价的分子模型



以密度、黏度、界面张力为标准与实验比对

Table 1. Density of eleven components at NTP and FTP.

Component	NTP (300 K, 1 atm)			FTP (400 K, 33 atm)		
	MD (g/cm^3)	Reference (g/cm^3)	RD (%)	MD (g/cm^3)	Reference (g/cm^3)	RD (%)
S1	0.63	0.65	-3.07	0.60	0.56	7.14
S2	0.81	0.74	9.46	0.73	0.67	8.96
S3	0.64	0.66	-3.03	0.52	0.58	-10.34
S4	0.81	0.76	6.58	0.74	0.68	8.82
A1	0.85	0.87	-2.30	0.70	0.77	-9.09
A2	0.83	0.86	-3.49	0.78	0.77	1.30
R1	0.80	0.82	-2.44	0.75	-	-
R2	1.06	1.07	-0.94	0.97	0.98	1.02
R3	0.91	0.92	-1.09	0.87	-	-
R4	1.13	1.10	2.73	1.07	-	-
R5	0.81	0.84	-3.57	0.76	-	-

Table 2. Interfacial tension of eleven components at NTP and FTP.

Component	NTP (300 K, 1 atm)			FTP (400 K, 33 atm)		
	MD (mN/m)	Reference (mN/m)	RD (%)	MD (mN/m)	Reference (mN/m)	RD (%)
S1	12.26	17.70	-30.72	3.98	-	-
S2	19.06	24.75	-22.99	10.08	-	-
S3	12.81	17.41	-26.44	3.68	-	-
S4	32.23	23.08	39.67	20.08	-	-
A1	20.29	-	-	8.01	-	-
A2	20.38	27.71	-26.45	9.12	-	-
R1	22.48	26.17	-14.10	12.75	-	-
R2	33.90	40.67	-16.65	22.98	30.51	-24.68
R3	26.38	27.60	-4.43	17.60	-	-
R4	60.49	42.40	42.68	39.71	-	-
R5	17.99	-	-	7.52	-	-

Table 3. Viscosity of eleven components at NTP and FTP.

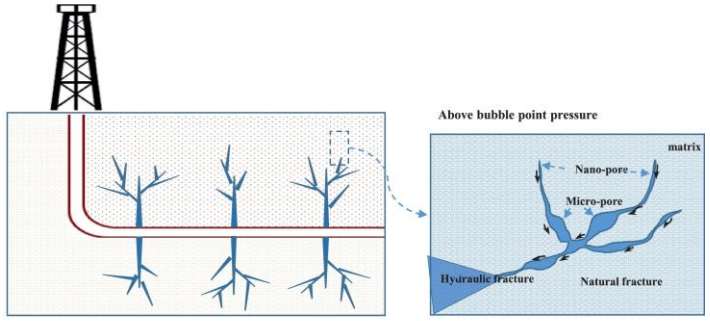
Component	NTP (300 K, 1 atm)			FTP (400 K, 33 atm)		
	MD (μPa·s)	Reference (μPa·s)	RD (%)	MD (μPa·s)	Reference (μPa·s)	RD (%)
S1	212.77	294.21	-27.68	168.85	131.22	28.68
S2	697.45	1339.31	-47.92	388.00	419.12	-7.43
S3	275.61	280.25	1.66	187.68	159.47	17.69
S4	849.41	662.65	28.18	473.71	269.65	75.68
A1	489.13	584.53	-16.32	134.94	214.44	-37.07
A2	414.66	536.60	-22.72	267.07	239.85	11.35
R1	580.87	-	-	363.91	-	-
R2	3527.14	3169.35	11.30	817.71	788.42	3.77
R3	1999.80	3680.69	-45.67	649.59	-	-
R4	1294.03	3169.34	-59.17	657.86	633.91	3.79
R5	386.41	-	-	243.18	-	-

常温常压和地质环境温压下，各组分含量对三种物性参数的影响

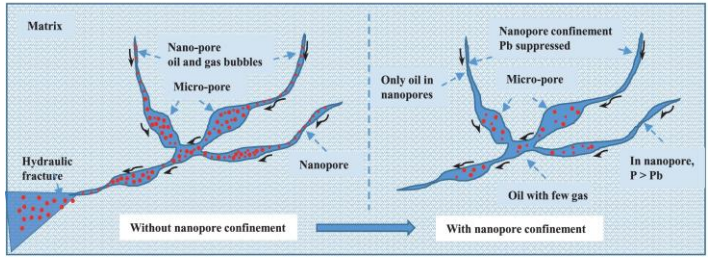
构建了研究古龙页岩油界面力学作用和可动用性评价的分子模型：包含11种页岩油组分、5种无机矿物、干酪根。调整组分含量，符合现场实验得到的物性。

Capillarity, 2022.

纳孔隙页岩油气的可动性评价

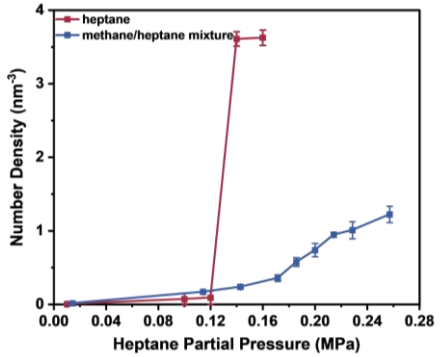


(a). Hydraulic fractures connected with natural fractures in shale reservoir matrix.

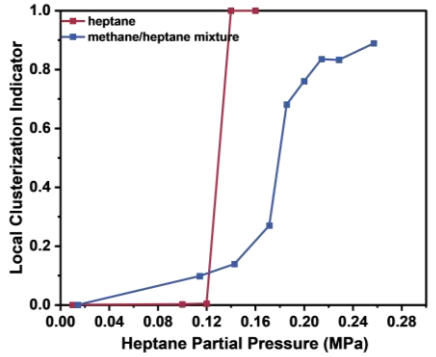


(b). phase behavior in nanopores when the system pressure less than bubble point pressure.

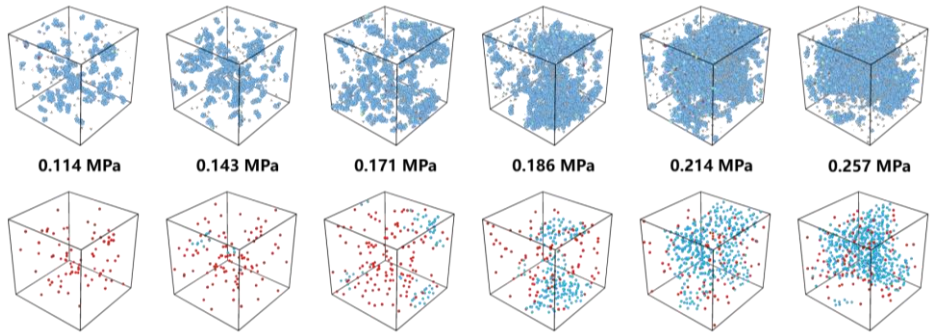
纳孔隙中，气液相态变化影响页岩油气的赋存状态和生产动态



混合物发生气液相变时密度变化不明显



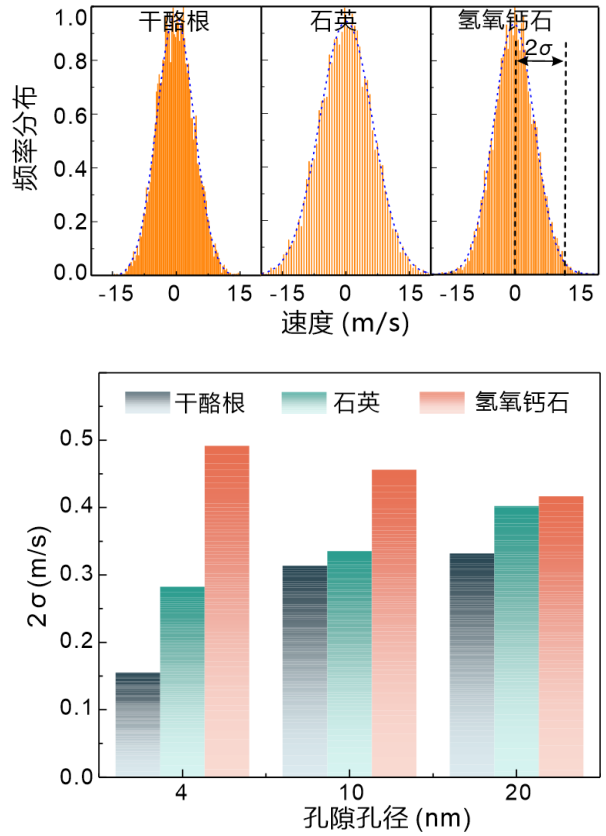
LCI方法可准确预测混合物的气液相变

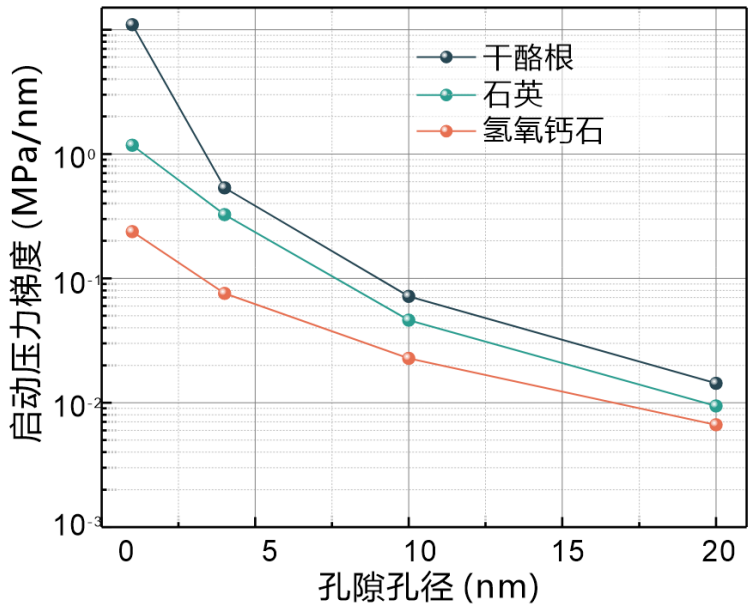


LCI方法预测混合物的气液相变符合分子模拟结果

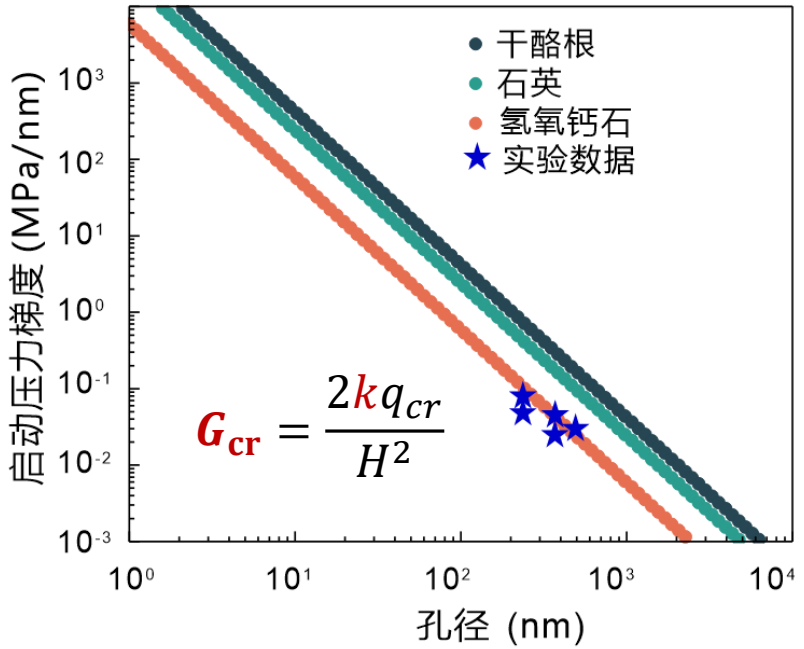
用密度变化无法精确预测混合物发生气液相变；针对该挑战，提出了“局部团簇化指标（Local Clusterization Indicator）”方法，可准确多组分混合物气液相变发生

纳孔隙页岩油气的可动性评价





三种基质孔隙的启动压力梯度随孔径大小的变化



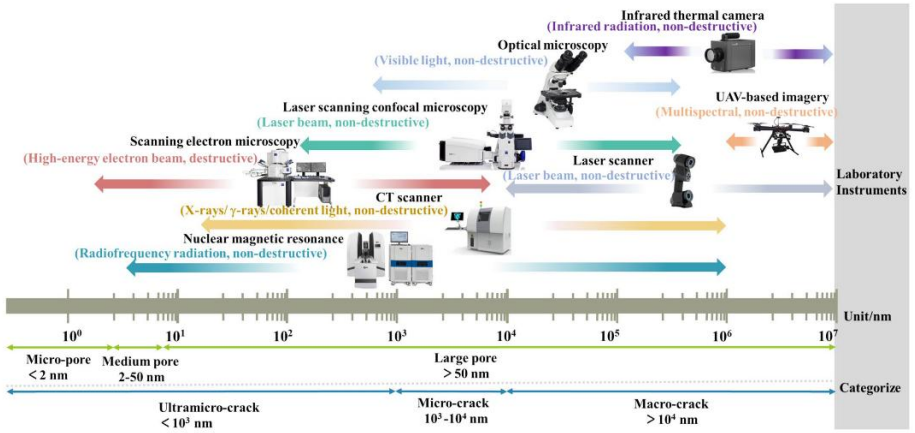
页岩油启动压力梯度的跨尺度理论预测模型

提出了分子热运动与驱动流动的区分方法，描述了纳孔隙页岩油启动的界面效应和尺寸效应，给出了页岩油启动压力梯度的跨尺度理论预测模型。

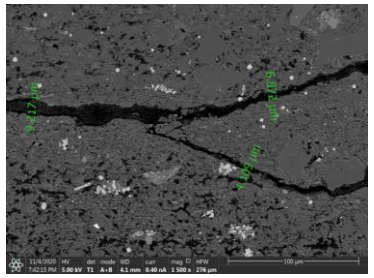
Advances in Geo-Energy Research, 2025

纳米孔—微米孔—裂缝网络多尺度建模

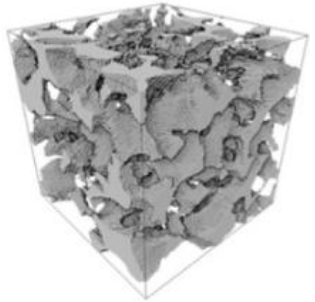
图像扫描方法



SEM图像

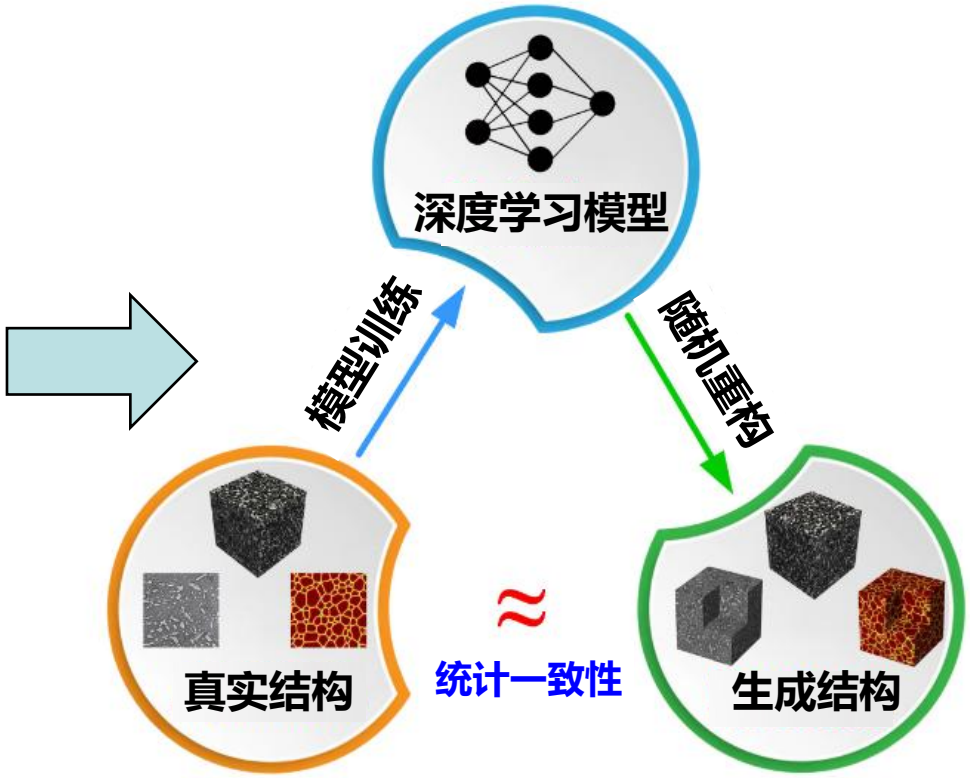


MicroCT图像



□ 精确表征岩心结构，但存在仪器设备、时间成本、岩心样本数量上的限制，**难以大批量生成高质量数字岩心。**

基于深度学习的随机重构方法

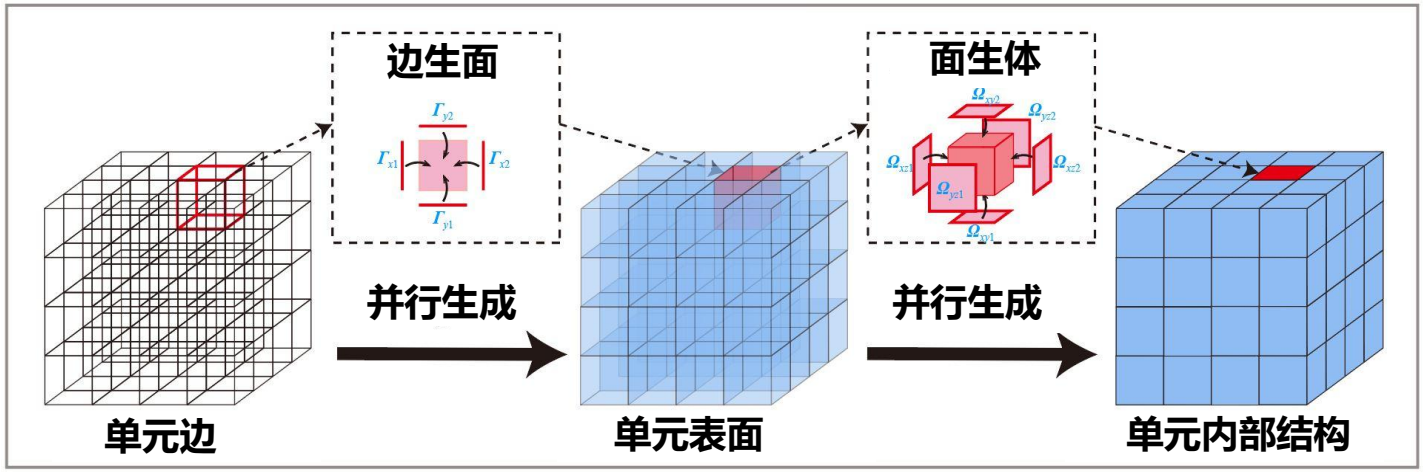


- 质量高
- 成本低
- 效率高
- 批量生成

□ 受到神经网络参数量的限制，现有方法**重构的体素量较少，重构尺寸受限，只能生成单一尺度的孔隙结构。**

亟需提高重构体素量，兼顾大视图与高分辨率需求，实现多尺度重构。

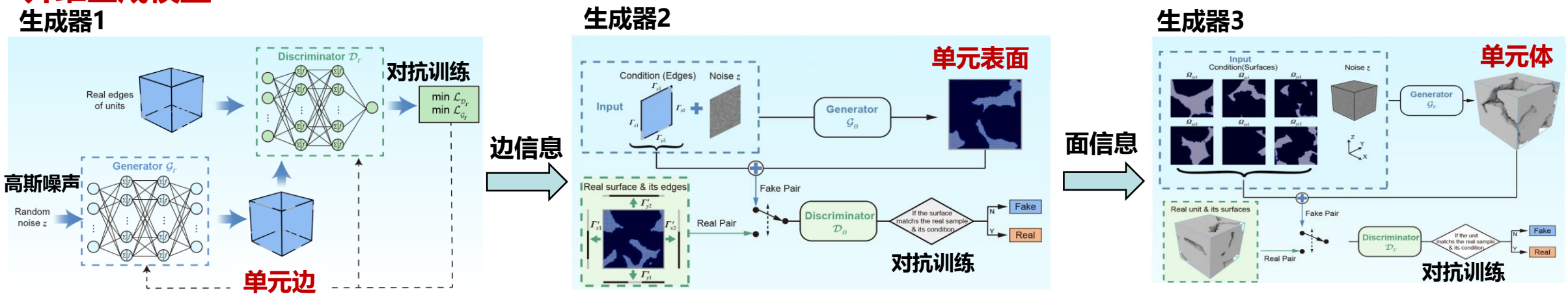
基于升维生成模型的并行重构方法



提出单元并行重构方法

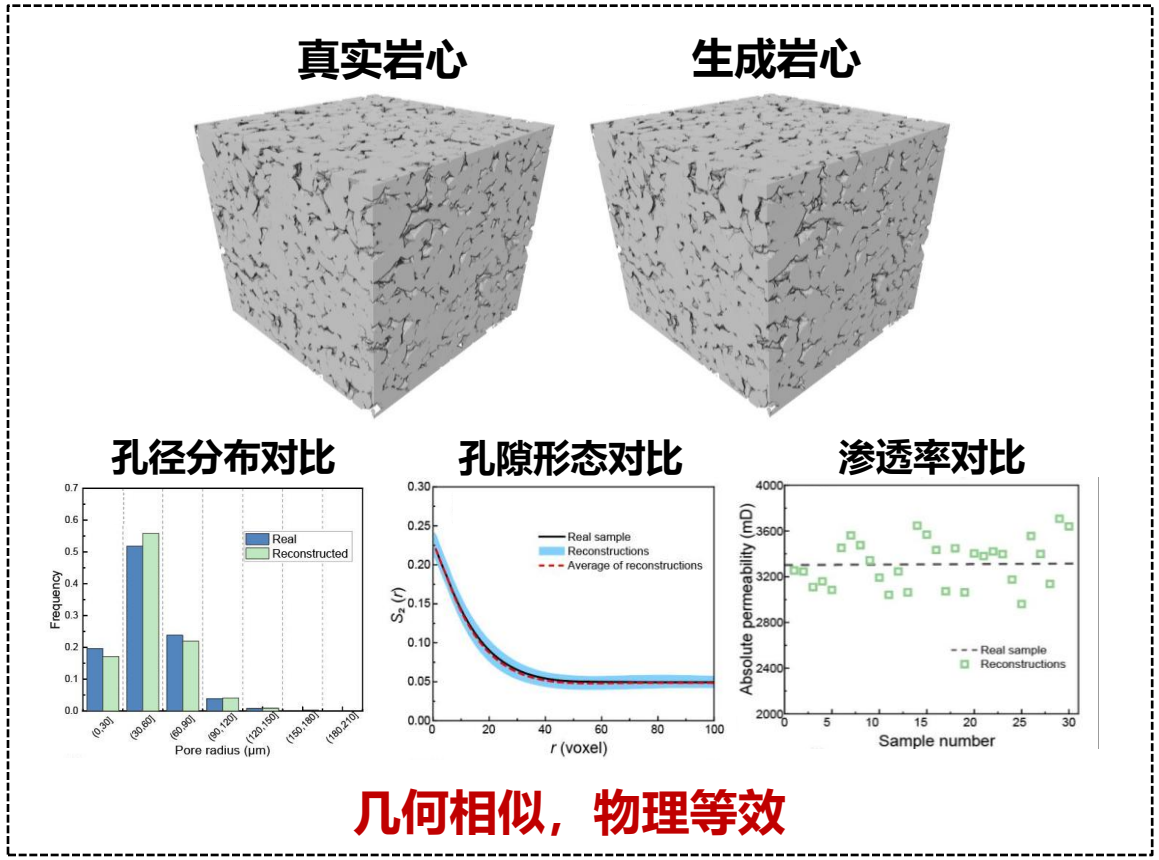
- ✓ 减少神经网络参数量
- ✓ 增加单元数量以提高体素量
- ✓ 并行加速生成效率
- ✓ 边界条件保证相邻单元连续

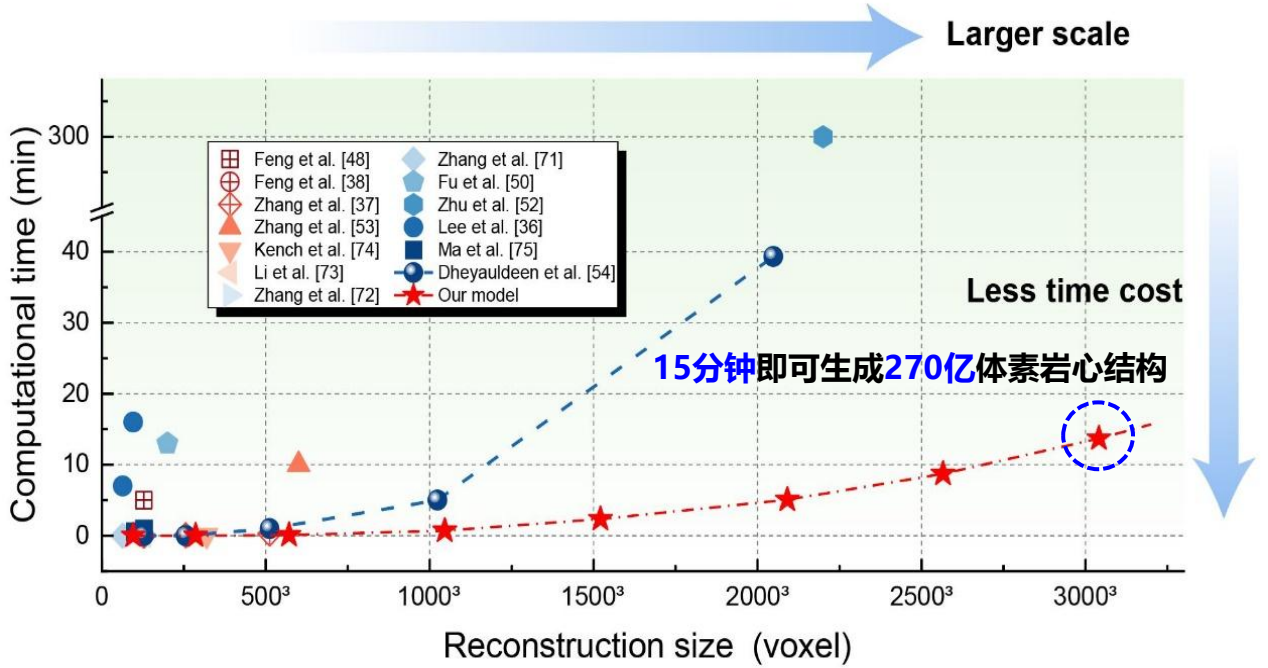
升维生成模型TGNet:



□ **构建了升维生成模型，使用三个对抗训练获得的生成器逐步生成结构单元的边、面、体，通过并行生成结构单元，形成超量体素的岩心重构方法。**

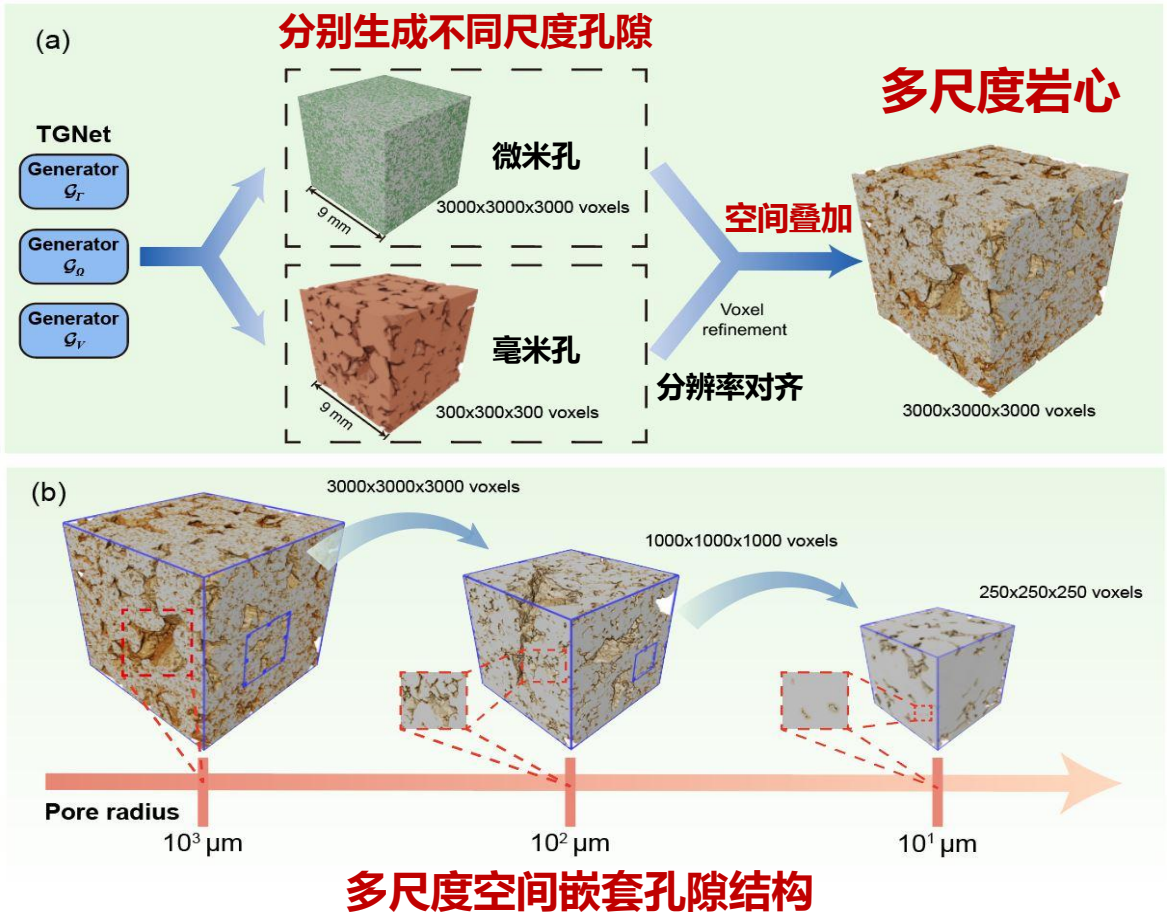
基于升维生成模型的并行重构方法



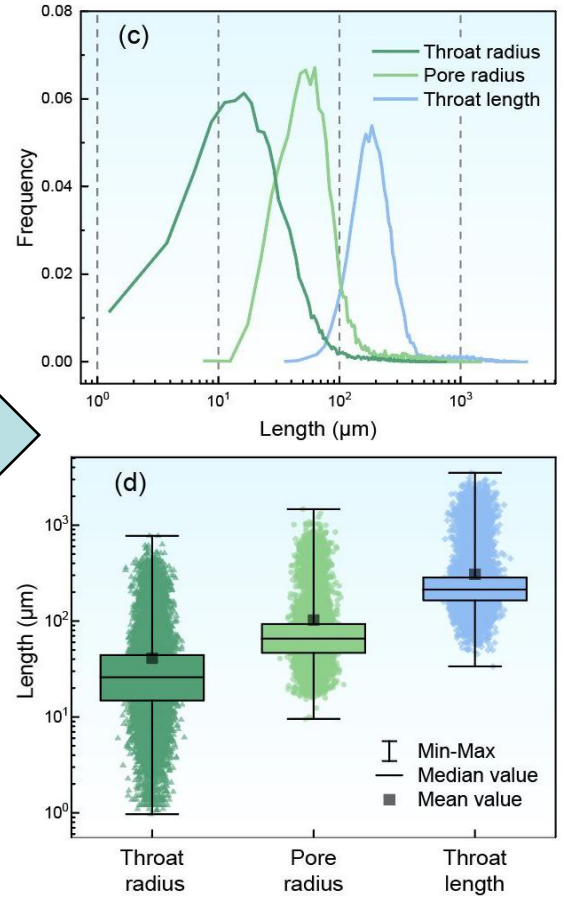


- 通过孔径分布、孔隙几何、渗流特征等多方面验证重构岩心的准确性，结果都表现出**良好的统计一致性，满足几何相似、物理等效；**
- 该方法突破了体素数量的限制，可以**高效生成超大量体素的大尺寸数字岩心结构，为后续多尺度岩心生成提供基础**。

多尺度孔隙结构空间叠加



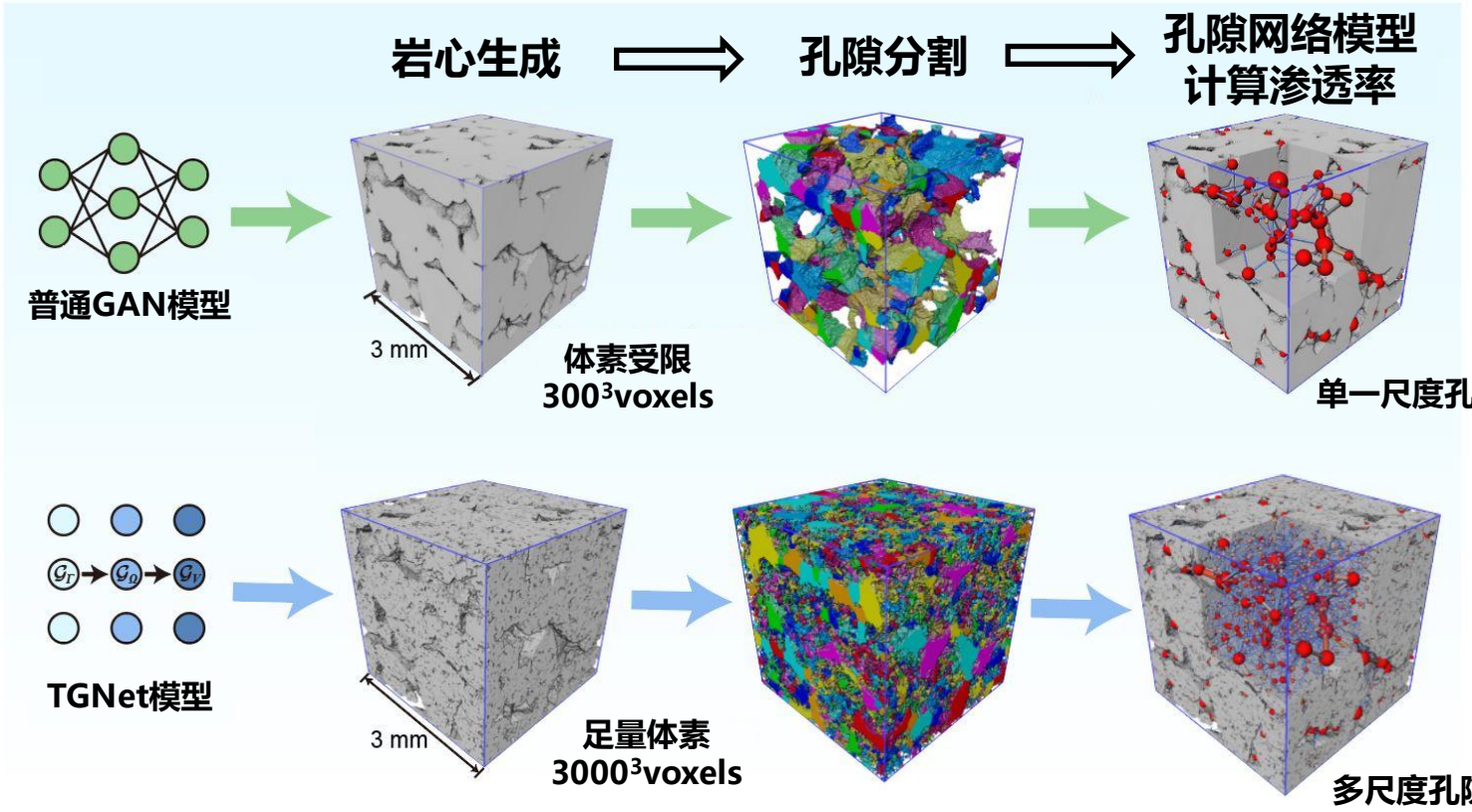
孔网提取

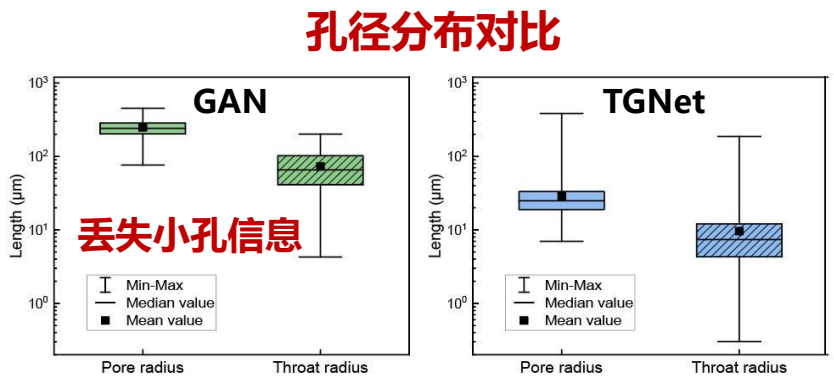


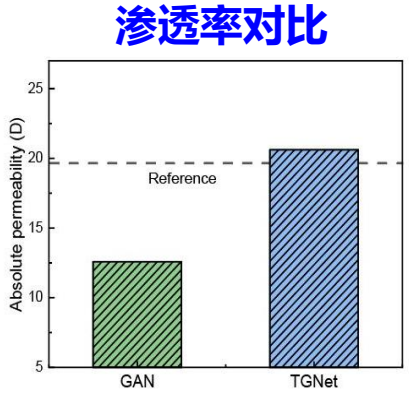
孔喉半径跨越三个数量级以上

- 使用TGNet分别生成包含不同尺度孔隙的岩心结构，结合空间叠加方法，实现了数字岩心的多尺度重构，内部孔/喉特征长度跨越三个数量级以上。既满足了多尺度岩心的大视图需求，又保证了内部小尺度孔隙的高分辨率表征。

多尺度数字岩心的渗流分析



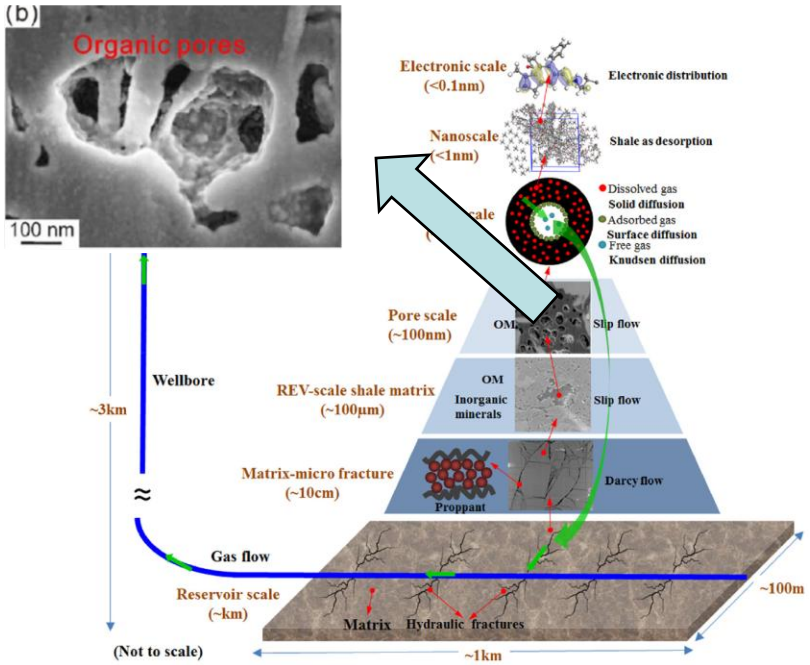




TGNet重建结构渗透率与真实结构一致。

- 多尺度重构**提高了数字岩心中孔隙结构的表征精度**，从而**保证了渗流分析结果的准确性**，并为系统研究不同尺度孔隙对渗透率的影响奠定了坚实基础。

页岩油气基质纳米孔道的可动性评价



石 油 勘 探 与 开 发

2021 年 6 月 PETROLEUM EXPLORATION AND DEVELOPMENT Vol.48 No.3 453

文章编号：1000-0747(2021)03-0453-11 DOI: 10.11698/PED.2021.03.02

大庆古龙页岩油重大科学问题与研究路径探析

孙龙德[1]，刘合[2]，何文渊[1]，李国欣[3]，张水昌[2]，朱如凯[2]，金旭[2]，孟思炜[2]，江航[1,2]

（1. 中国石油大庆油田有限责任公司，黑龙江大庆 163002；2. 中国石油勘探开发研究院，北京 100083；
3. 中国石油勘探与生产分公司，北京 100724）



孙龙德，中国工程院院士，中国石油天然气股份有限公司副总裁，原大庆油田有限责任公司执行董事兼任大庆油田党委书记



刘合，中国工程院院士，能源与矿业工程管理专家，中国石油天然气股份有限公司勘探开发研究院副总工程师、教授级高工

摘要：基于前期基础研究，剖析松辽盆地古龙页岩油生产实践难题，提出古龙页岩油在储集空间、相态分布、流动规律和矿物演化等方面的特殊性，解析目前面临的基础科学问题。梳理出以下 6 个方面的关键科学问题：①古龙页岩有机质来源、生排烃机理和影响页岩油丰度的关键因素；②古龙页岩有效储集空间类型和结构特征及其对孔隙度和渗透率的贡献；③古龙页岩矿物成因和演化规律及其对储集层有效性、敏感性与可压性的控制作用；④古龙页岩岩石力学特征与裂缝扩展规律；⑤古龙页岩油品、相态变化规律与吸附-解吸转化主控因素；⑥古龙页岩油液固-液气作用机理与提高采收率机制。提出了实现古龙页岩油规模化经济动用的重点攻关建议：①深化油气生成与排驱、储集与运聚等机理研究，指导页岩油地质甜点优选；②深化可压性与造缝机制研究，支撑工程甜点选择及工程设计优化；③深化地层条件下流体作用机理研究，指导开发方案优选及提高采收率技术选择。古龙页岩油的成功开发需要全球专家学者贡献多学科创新想法和技术思路，解决生产难题。图 12 表 1 参 47

在固液界面润湿领域相关研究工作被列为古龙页岩油6个科学问题之一：“古龙页岩油液固-液气作用机理与提高采收率机制”和主要攻关方向 “页岩油微观力学作用与可动性评价”

3 古龙页岩油科学问题剖析

3.6 古龙页岩油液固-液气作用机理与提高采收率机制

近期工作：①通过修正经典的开尔文方程，初步建立了纳米限域毛细凝聚的新理论，阐述了固液界面力学作用在纳米/亚微米尺度的毛细凝聚中的重要作用，对该极限尺度的最新实验结果及其力学机理进行了合理解释[44-45]；②研究了固液界面毛细管力的微观起源，揭示了液滴接触线处受力平衡的作用机理，并从力学角度给出了固液界面润湿领域杨氏方程的合理解释，为岩油界面润湿性、岩石表面油滴/油膜的剥离等界面润湿现象提供了新的认知[46]；③基于多相渗流

[44] YANG Q, SUN P Z, FUMAGALLI L, et al. Capillary condensation under atomic-scale confinement[J]. Nature, 2020, 588: 250-253.

[45] ZOU C, JIN X, ZHU R, et al. Do shale pore throats have a threshold diameter for oil storage?[J]. Scientific Reports, 2015(5): 13619.

[46] FAN J C, CONINCK J D, WU H A, et al. Microscopic origin of capillary force balance at contact line[J]. Physical Review Letters, 2020, 124: 125502.

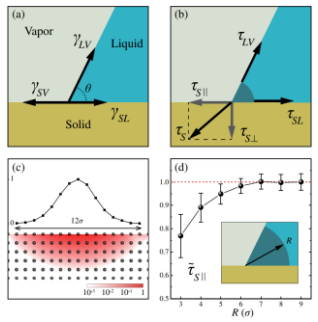
4.3 页岩油开发方案优选

地层条件下流体相态特征及分布、赋存状态、可流动性、液固-液气作用机理复杂，亟待深化研究，指导开发方案优选及提高采收率技术选择。

4.3.1 页岩油微观力学作用与可动性评价

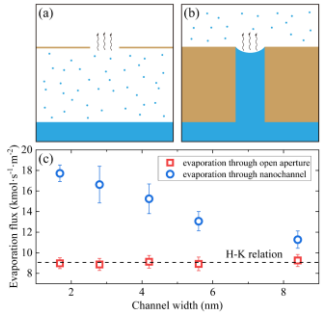
应构建纳米级孔隙模型并开展纳米力学分析，重点研究描述固液界面润湿性的杨氏方程和描述毛细凝聚现象的开尔文方程等经典理论在古龙页岩复杂环境、纳米尺度下的适用性问题，深入分析微观界面力学机理，为纳米级孔隙内油气相态和赋存状态的实验技术和表征方法提供理论支持；基于精细表征、分子模拟与纳米力学测试技术，定量区分游离油与吸附油，明确页岩油的赋存状态与分布规律，探索矿物、固态有机质与原油间的相互作用类型与机制，明确固/液微观界面相互作用对原油吸附-游离态转化的影响；以此为基础，开展界面效应对页岩油不同组分在纳米通道中输运的影响研究，构建纳米尺度限域传质的理论体系，并进行分子尺度和微纳尺度物质输运的尺度关联，为建立页岩油的可动性评价方法提供分子模拟细节和微纳米尺度新理论基础。

接触线力平衡理论



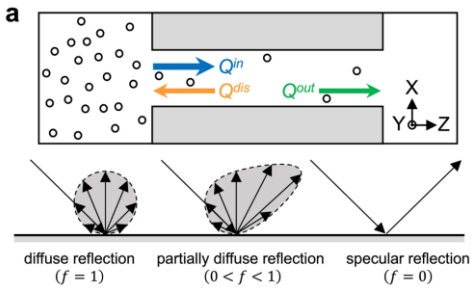
Phys. Rev. Lett. 2020.

限域增强流动



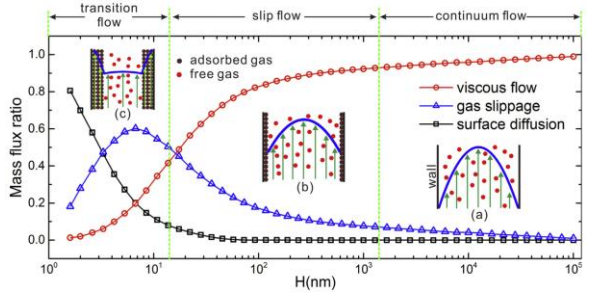
Nat. Mater. 2023.

固气碰撞理论



Nat. Commun. 2023.

油气跨尺度输运

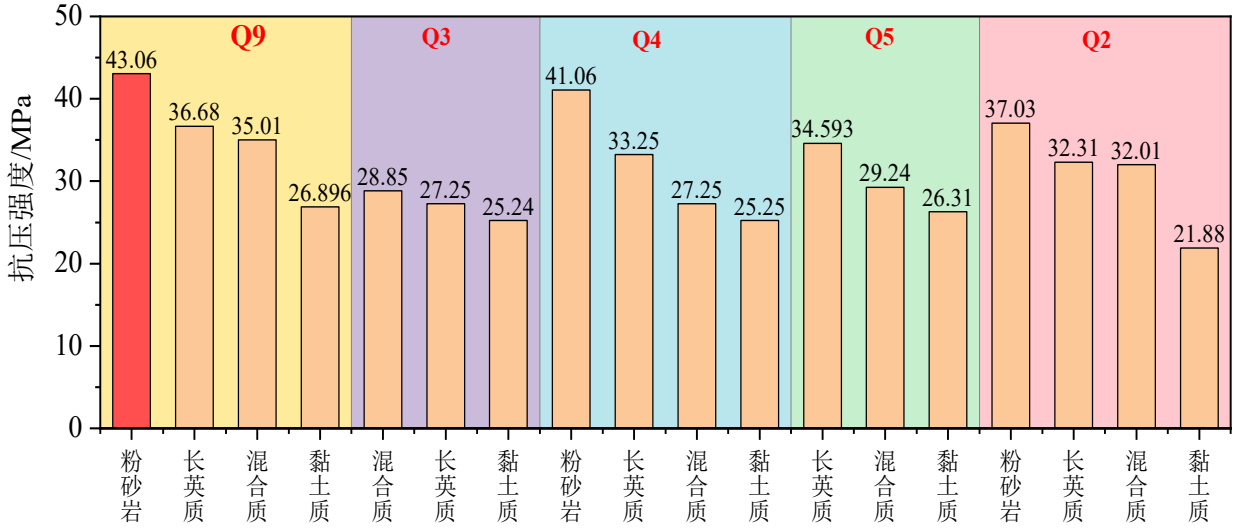


Energy Fuels 2021

报告提纲

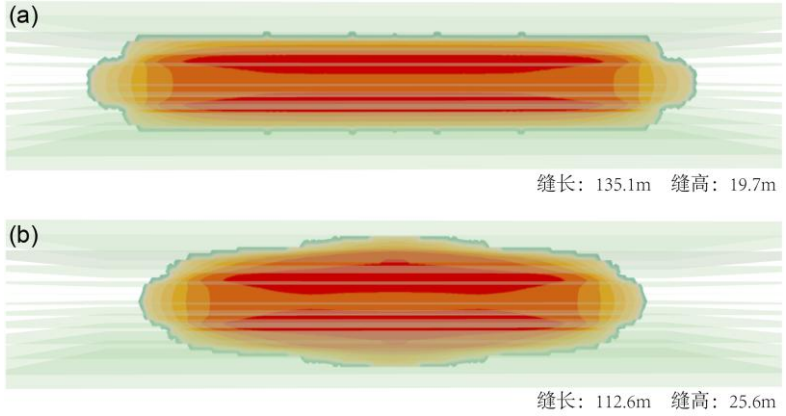
1. 材料多尺度力学建模和设计
   - ① 研究背景
   - ② 微纳结构材料力学设计
   - ③ 纳米孔隙膜材料力学设计
2. **油气开发计算方法及工程应用**
   - ① 研究背景
   - ② 数值模型和求解算法
   - **③ 油田现场应用**

地质-工程综合甜点判识：选区块

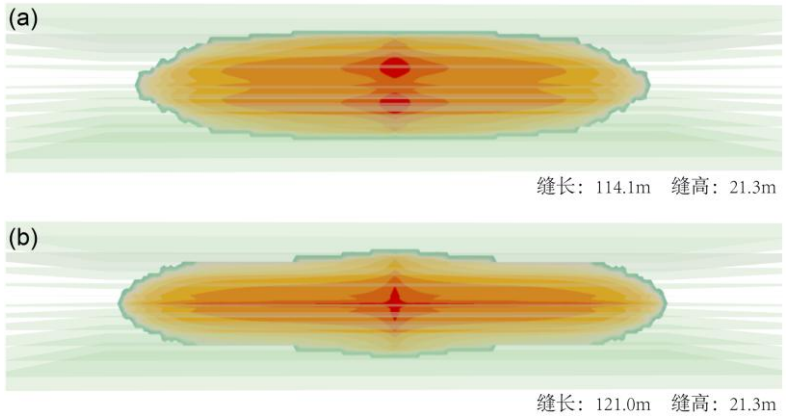


不同油层的岩性和力学特征

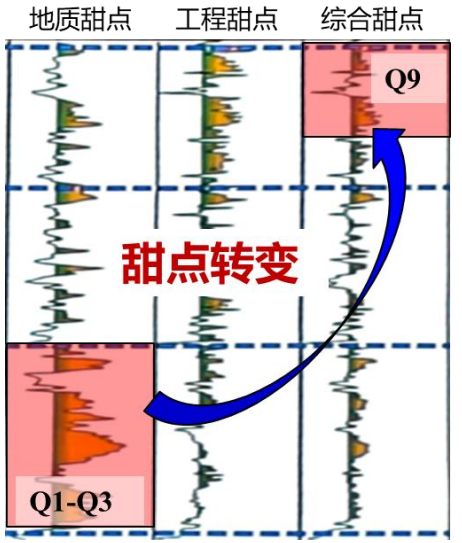
- 受非均质性控制，裂缝纵向扩展普遍受限，而**Q9层由于杨氏模量高、脆性强且整体更有利于裂缝扩展，改造体积明显优于Q3层**；
- **优选出Q9储层为最优工程甜点**，支撑了大庆古龙页岩油青山口组靶体选择由下甜点（地质甜点：Q1-Q8）向上甜点（工程甜点：Q9）的转变。



Q9层中代表参数多层模型压裂模拟结果

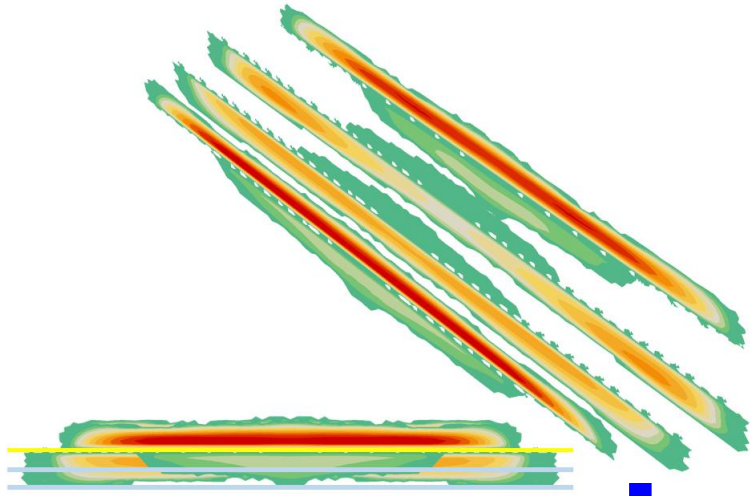


Q3层中代表参数多层模型压裂模拟结果



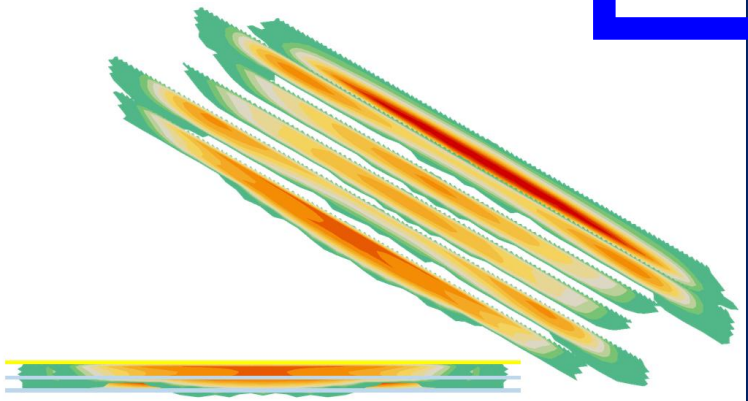
区块中最优压裂位置选择：定点位

- 在高应力隔层内实施注水压裂有利于裂缝有效穿层并实现上下层协同改造

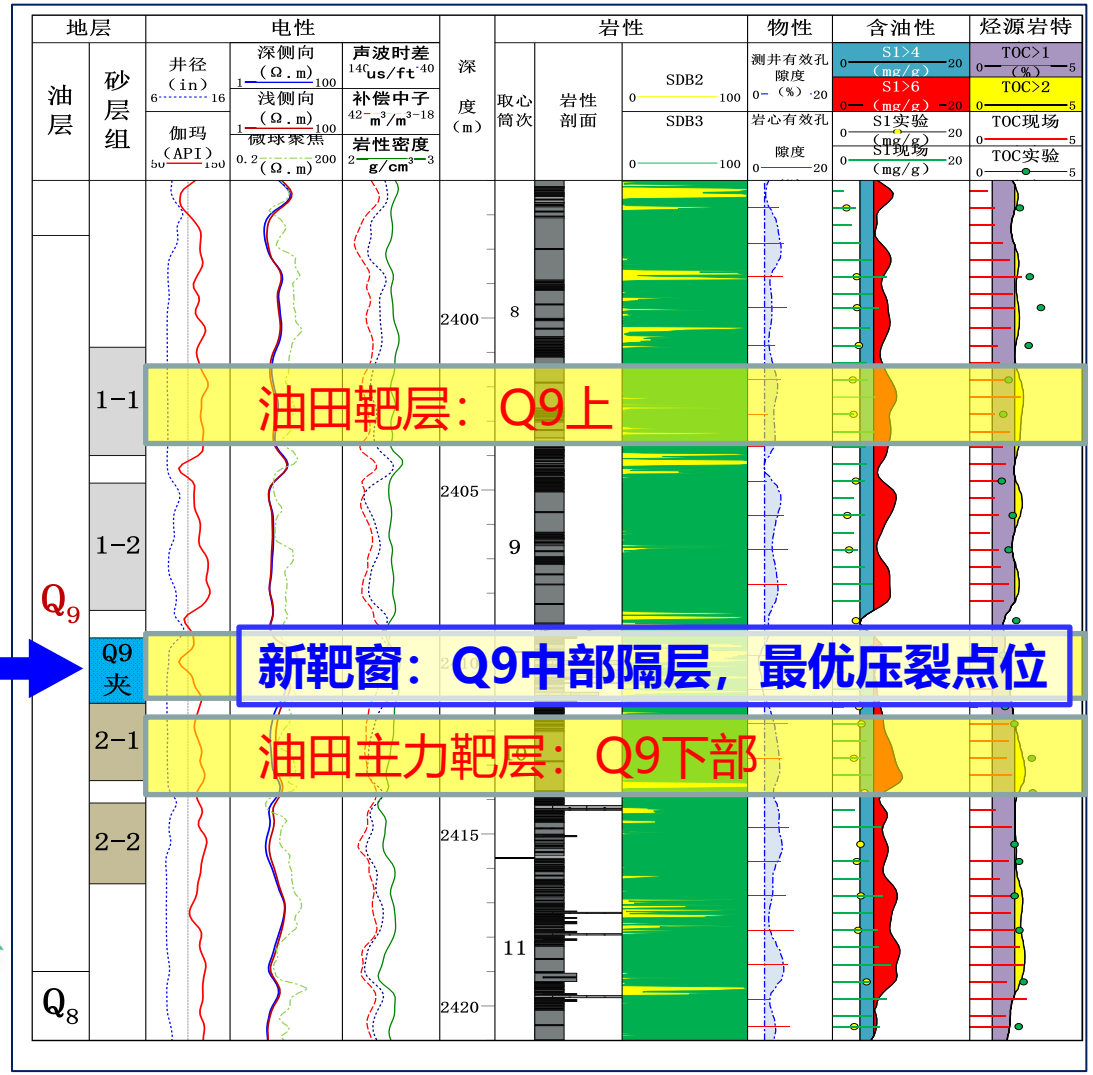


在高应力隔层中压裂

- 在隔层下方注水时裂缝受阻明显，难以穿透隔层，仅局限于下部地层扩展。

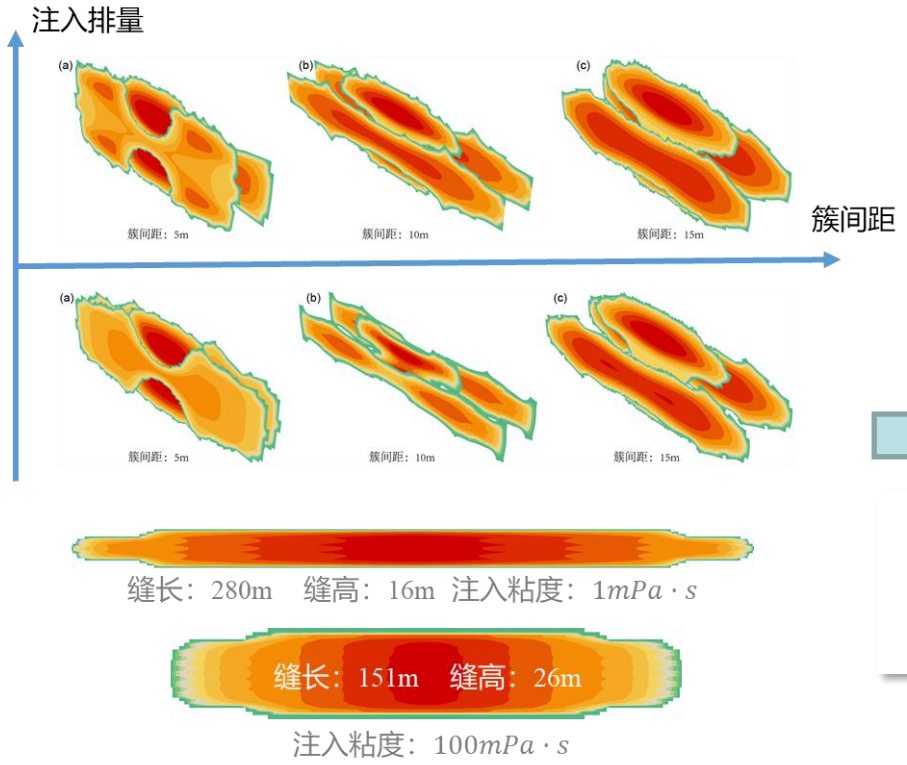


在高应力隔层下方压裂

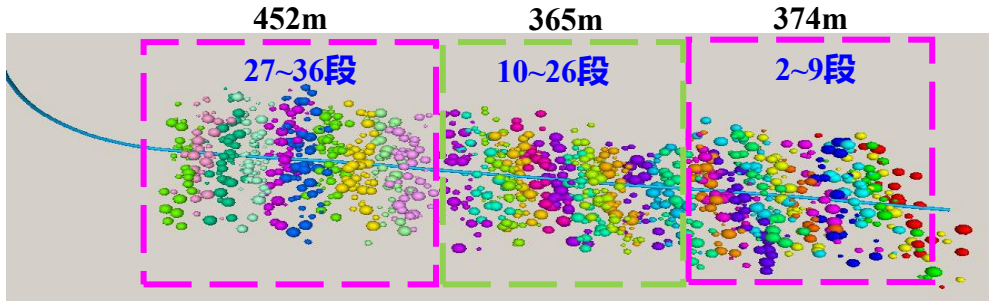


压裂排量、流体性质优选：提方案

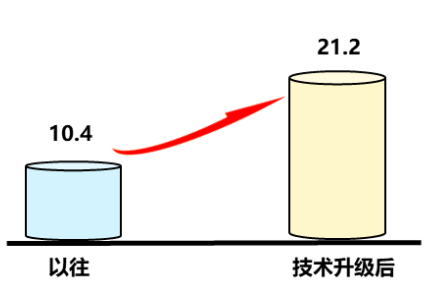
- 提高注入排量有助于减弱应力干扰、促进裂缝向远端扩展并扩大改造范围，同时配合提高压裂液黏度有利于增强裂缝纵向扩展能力。因此建议采用“提胍胶、增排量”的压裂优化方案。



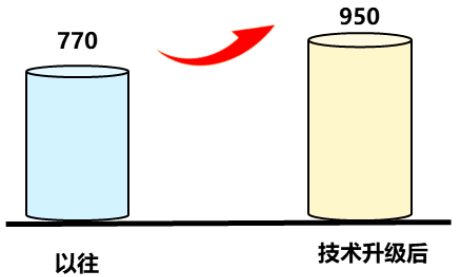
提胍胶
增排量



压裂裂缝成果图



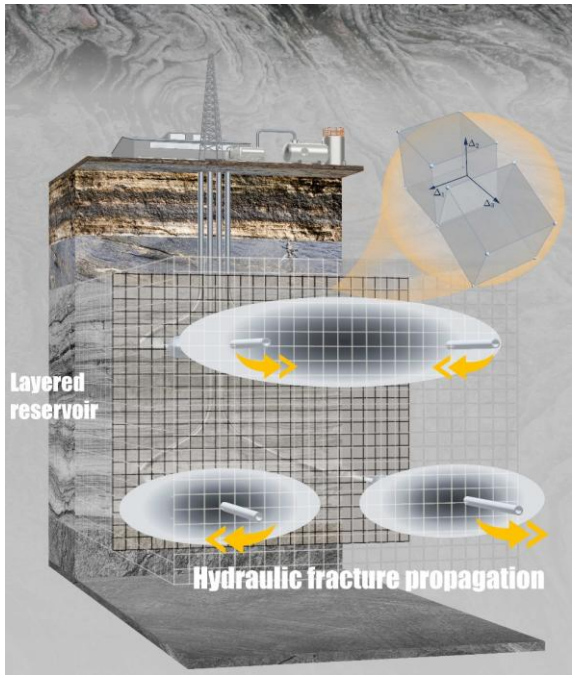
油井初期产量对比（吨/天）

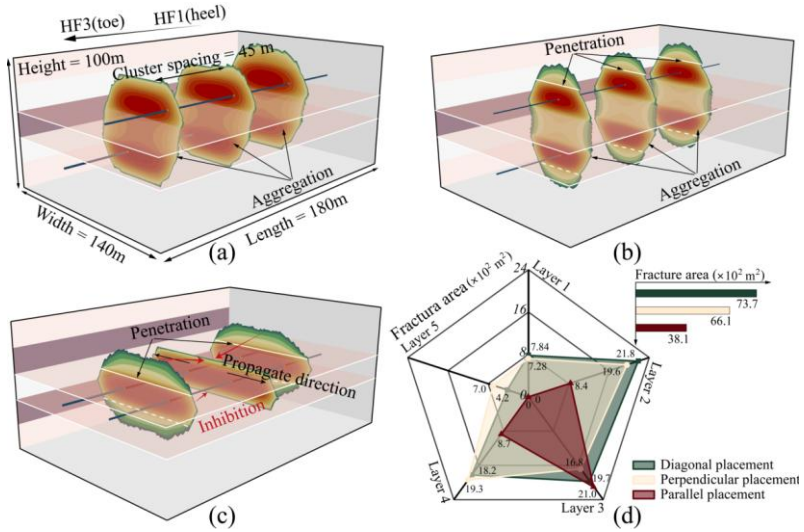


同等施工规模改造体积（万方）

多层系立体井网开发：设井距

- **降低纵向井距可重塑层状储层应力干扰场，可有效调控裂缝侧向扩展、穿透与聚集模式，实现裂缝均匀发育，最大化储层改造体积（SRV）；**
- **数值分析表明原有井距过大，将横、纵向井距调整到400m、20m左右，确保储层充分开发。**

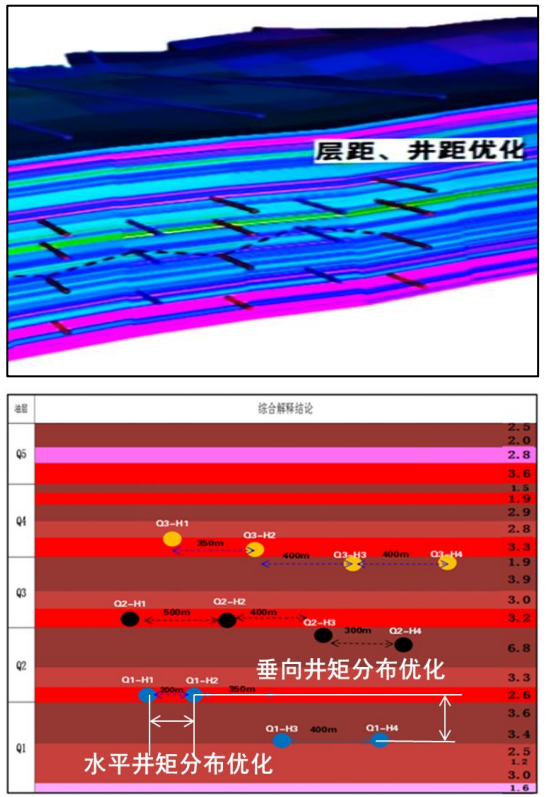




对角布井可强化井间应力干扰，合理簇间距可增大裂缝面积，为 SRV 优化提供依据

井距降低

有效提高SRV

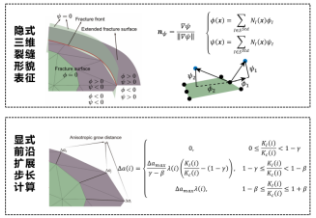


承担任务和应用评价





大庆油田有限责任公司



中国科学技术大学



中国石油勘探开发研究院



应用证明

项目名称	非常规油藏 CO_2 压裂埋存及增产协同评价方法与优化技术研究	
应用单位	中国石油吉林油田分公司油气工艺研究院	
单位注册地址	吉林省松原市宁江区长宁北街 618 号	
应用起止时间	2019 年 10 月—2024 年 10 月	
经济效益（万元）		
自 然 年	新增产值	新增利润
2019	3123.40	1267.90
2020	4755.80	3012.12
2021	4944.52	2165.60
2022	3998.74	1647.53
2023	4041.68	1786.90
2024	3305.33	1341.75
累 计	24169.47	11221.81

所列经济效益的有关说明及计算依据：

新增销售额=增油量×吨油价格

新增利润=增油量×（吨油价格-吨油生产成本）

具体应用情况：

截止 2024 年 10 月，CO_2 压裂增产-埋存一体化技术在吉林油田油井累计应用 408 井次，较常规压裂井平均增产 50%，累计增产 6.92 万吨，累计新增产值 24169.47 万元，新增利润 11221.81 万元；

CO_2 压裂增产-埋存一体化技术在吉林油田的规模化应用，累计埋存 CO_2 20.38 万吨，在油气增产的同时，实现了 CO_2 永久埋存，取得了显著的经济和社会效益，为国内其他油田同类油气藏的开发提供了经验借鉴。

应用单位（公章）：2024 年 10 月 18 日　　应用单位财务专用章：2024 年 10 月 18 日

注：社会公益类项目如无经济效益，可不填经济效益相关栏目。



应 用 证 明

成果名称	古龙页岩油控近扩远压裂技术		
应用单位	大庆油田页岩油勘探开发指挥部		
技术应用起止时间	2023 年 1 月 1 日-2025 年 12 月 31 日		
联系人	邓大伟	联系电话	15045967978

近年来，陆相页岩油已成为我国油气资源的重要接替领域。古龙页岩油作为陆相高黏土页岩油的典型代表，储层塑性强、压裂改造难度极大。国际石油公司系统评估后认为交付商业油流的风险非常高，不存在已知的具有商业开发价值的类似区块。依托黑龙江省揭榜挂帅项目“古龙页岩油相态、渗流机理及地质工程一体化增产改造研究”，从基础研究入手，主持建立了古龙页岩油地质/工程理点综合评价方法，推动开发目标层由 Q_1 油层向 Q_1 油层转变，并率先实现规模有效开发；建立了“千层小薄饼”页岩压裂力学模型，深入揭示压裂裂缝扩展机理和主控因素，以此为基础创新提出控近扩远压裂理念和技术对策。历经三次迭代，形成了多态起裂、缝网扩展及控制、人工裂缝全域支撑技术。

该成果在松辽盆地大庆古龙陆相页岩油国家级示范区现场应用 247 口井，新工艺应用后单段改造体积同比增加 57.5%，压后全部获得工业油流，单井初年平均日产油由 7.7 吨提高至 17.3 吨，单井 EUR 由 1.1 万吨提高至 3.2 万吨，成果有力支撑了陆相页岩“生油”到“产油”的重大历史性突破，显著提升了我国陆相页岩油理论认识及核心技术水平，取得了巨大应用实效。

该成果的规模化应用支撑了古龙页岩油 Q_1 油层提交探明储量 3.03 亿吨，示范区 2025 年产油 108.5 万吨，其中 Q_1 油层产油达 100.9 万吨，折算新增产量利润 6.78 亿元，按照科技成果增产经济效益分成率 9.88%计算，直接经济效益 0.67 亿元。

该成果将持续推动古龙页岩油建成千万吨级页岩油生产基地，也可推广应用到国内其他陆相页岩油气盆地，推动我国陆相页岩油革命，具有广阔的应用前景。

应用单位负责人（签字或盖章）：　　应用单位（盖章）：2026 年 3 月 17 日

- **基金委企业创新发展联合基金集成项目**，中高熟陆相页岩油富集理论与绿色有效开发基础研究，2024-2027
- **基金委面上项目**，富层理页岩任意曲率非平面水力裂缝的扩展有限元增强与并行算法研究，2025-2028
- **黑龙江省科技厅揭榜挂帅项目**，古龙页岩油相态、渗流机理及地质工程一体化增产改造研究，2021-2024
- **中国石油勘探开发研究院委托技术研发**，古龙页岩油多尺度压裂机理研究，2022
- **中国石油勘探开发研究院委托技术研发**，高密度弱面调控的页岩地质工程一体化压裂裂缝扩展测试，2023
- **中国石油勘探开发研究院委托技术研发**，CO2相变冲击致裂对页岩基质渗流和增产效果影响测试，2024

“大庆古龙2号实验井组现场实验数据表明，研究团队提出的“控近扩远”压裂方案使水平井提产普遍见效，平均产能增加50%以上，其中古页9HC井日产30.3吨、古页8H1井日产34.2吨，古页1002H-Q4井日产28.8吨。”

Love our USTC









