



دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده مهندسی عمران

رساله دکتری

رشته و گرایش

مهندسی عمران - ژئوتکنیک

عنوان

شبیه سازی نانومقیاس فضای متخلخل شیل جهت تخمین حجم ذخیره گاز

استاد راهنما

دکتر حسن قاسم زاده

نگارش

سعید بابائی

آذر ۱۴۰۲

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



تاسیس ۱۳۰۷
دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

تأییدیه هیأت داوران

شماره:

تاریخ:

هیأت داوران پس از مطالعه رساله و شرکت در جلسه دفاع از رساله تهیه شده تحت عنوان: شبیه سازی نانومقیاس فضای متخلخل شیل جهت تخمین حجم ذخیره گاز توسط آقای سعید بابائی صحت و کفایت تحقیق انجام شده را برای اخذ درجه دکترا با رتبه عالی رشته مهندسی عمران گرایش ژئوتکنیک در تاریخ ۱۴۰۲/۰۹/۲۰ مورد تأیید قرار می دهند.

۱- استاد راهنما

جناب آقای دکتر حسن قاسم زاده

امضاء

۲- استاد ممتحن داخلی

جناب آقای دکتر محمد رسول دلفانی

امضاء

۳- استاد ممتحن داخلی

جناب آقای دکتر سیف اله جلیلی

امضاء

۴- استاد ممتحن خارجی

جناب آقای دکتر سید محمود رضا پیشوایی

امضاء

۵- استاد ممتحن خارجی

جناب آقای دکتر عباس شهرآبادی

امضاء

۶- نماینده تحصیلات تکمیلی دانشکده

جناب آقای دکتر حسن قاسم زاده

امضاء

اظهار نامه دانشجویی

اینجانب سعید بابائی دانشجوی دوره دکتری رشته مهندسی عمران گرایش ژئوتکنیک دانشکده مهندسی عمران دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی گواهی می‌نمایم که در تحقیقات ارائه شده در رساله با عنوان شبیه‌سازی نانومقیاس فضای متخلخل شیل جهت تخمین حجم ذخیره گاز با راهنمایی استاد محترم جناب آقای دکتر حسن قاسم‌زاده، توسط شخص اینجانب انجام شده و صحت و اصالت مطلب نگارش شده در این رساله مورد تأیید می‌باشد و در مورد استفاده از کار سایر محققان به مرجع مورد استفاده اشاره شده است. بعلاوه، گواهی می‌نمایم که مطلب مندرج در رساله تا کنون برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی توسط اینجانب یا فرد دیگری در هیچ جا ارائه نشده است و در تدوین متن رساله چارچوب مصوب دانشگاه به طور کامل رعایت شده است.

امضا دانشجو:



حق طبع و نشر و مالکیت نتایج

۱- حق چاپ و تکثیر این رساله متعلق به نویسنده آن می‌باشد. هرگونه کپی برداری بصورت کل رساله یا بخشی از آن تنها با موافقت نویسنده یا کتابخانه دانشکده مهندسی عمران دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی مجاز می‌باشد.

۲- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی می‌باشد و بدون اجازه کتبی دانشگاه به شخص ثالث قابل واگذاری نیست.
همچنین استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در رساله بدون ذکر مراجع مجاز نمی‌باشد.

تقدیم بہ بہترین رفیق زندگیم وصال

تقدیر و تشکر:

اکنون که به یاری پروردگار و با راهنمایی‌های استاد گرانقدرم موفق به پایان این رساله شده‌ام، وظیفه خود می‌دانم که نهایت سپاسگزاری خود را از تمام عزیزانی که در این مسیر همراه و پشتیبانم بوده‌اند به جای آورم. در آغاز، از استاد ارجمند، جناب آقای دکتر حسن قاسم‌زاده، که با راهنمایی‌ها، مشاوره‌ها و دلسوزی‌های خود، مسیر پژوهشی مرا هموار کردند و به ثمر رساندند، صمیمانه سپاسگزاری می‌کنم. از خانواده عزیزم که با تحمل سختی‌ها و فراهم کردن آرامش، شرایط لازم برای پیمودن مسیر علم‌آموزی را برایم فراهم کردند، بی‌نهایت سپاسگزارم. از داوران گرامی، جناب آقایان دکتر دلفانی، دکتر جلیلی، دکتر پیشوایی و دکتر شهرآبادی، که با دقت و تخصص، زحمت داوری و ارزیابی این پژوهش را بر عهده داشتند، نهایت تشکر را دارم. از دوستان عزیزم در سایت دکتری که در طول شش سال گذشته همچون خانواده‌ای در کنار هم لحظات خوب و بد را سپری کردیم، قدردانی می‌کنم. و در پایان، از همسر عزیزم که همواره همراه و پشتیبانم بوده و در تمامی فراز و نشیب‌های این مسیر در کنارم ایستاده است، صمیمانه قدردانی می‌کنم.

چکیده:

پیش‌بینی دقیق مکانیزم جذب سطحی در مخازن شیل گازی برای تخمین گاز درجا و فرآیند استخراج ضروری است. یکی از چالش‌های اصلی در تبدیل جذب اضافی به جذب مطلق، محاسبه چگالی گاز جذب‌شده است. پژوهشگران اخیراً استفاده از شبیه‌سازی مولکولی را برای محاسبه این چگالی پیشنهاد کرده‌اند، اما هنوز ارزیابی دقیقی از نحوه انتخاب بازه مناسب از پروفایل توزیع چگالی متان برای این منظور وجود ندارد. همچنین، ماهیت پیچیده مخازن شیل، شامل ساختار ناهمگن، نانو منافذ مواد آلی - غیرآلی، رطوبت و تورم، چالش‌هایی در درک مکانیزم جذب متان ایجاد می‌کند. به همین دلیل، پژوهشگران با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی به دنبال ساخت مدل‌های نانوکامپوزیت شیل برای بررسی دقیق‌تر این مکانیزم هستند. با این حال، اثرات حضور آب و تورم در نانوکامپوزیت شیل هنوز به خوبی درک نشده است. این رساله در دو بخش مجزا، به بررسی چگالی جذب‌شده برای تبدیل جذب اضافی به جذب مطلق در گرافن تحت شرایط مختلف دما، فشار و اندازه منافذ و همچنین ساخت مدل نانوکامپوزیت شیل با کروژن نوع II-C و ایلیت با اندازه منافذ ۱، ۲ و ۴ نانومتر پرداخته و اثرات فشار، دما، رطوبت و تورم کروژن را بررسی کرده است. برای مطالعه مکانیزم جذب، از ترکیب روش‌های مونت‌کارلو در هنگرد کانونی بزرگ و دینامیک مولکولی در هنگرد کانونی به صورت سری استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که بازه انتخابی برای محاسبه چگالی جذب‌شده و حجم قابل‌دسترس هر دو پارامترهای مهمی در تبدیل جذب اضافی به جذب مطلق هستند و باید اثر هر دو پارامتر را به طور همزمان در نظر گرفت. علاوه بر این، استفاده از روش انبساط هلیوم، به دلیل جذب گاز هلیوم بر سطح جاذب، می‌تواند منجر به تخمین بیش از حد حجم قابل‌دسترس و مقادیر منفی جذب اضافی در فشارهای بالا شود. در مدل شیل، انعطاف‌پذیری ماتریس کروژن منجر به افزایش زبری سطح و کاهش چگالی جذب‌شده می‌شود. حضور رطوبت نیز سایت‌های جذب متان در ایلیت را کاهش می‌دهد و این امر به رفتارهای پیچیده و وابسته به اندازه منافذ در مدل شیل منجر می‌شود. در منافذ ۱ و ۲ نانومتری، کل آب بر سطح ایلیت جذب می‌شود، اما در منفذ ۴ نانومتری، پس از اشباع سطح ایلیت، خوشه‌هایی از آب بر سطح کروژن تشکیل می‌شود. در منافذ ۱ و ۲ نانومتری، کل گاز درجا ناشی از جذب سطحی است، درحالی‌که در منفذ ۴ نانومتری، هر دو حالت گاز جذب‌شده و گاز آزاد به مقدار گاز درجا کمک می‌کنند. در حالت خشک برای منفذ ۴ نانومتری، سهم گاز آزاد و جذب‌شده تقریباً برابر است و از این مقدار جذب، سهم ایلیت و کروژن به ترتیب ۶۰ و ۴۰ درصد است. با این حال، در حضور رطوبت، سهم جذب در مقدار کل گاز درجا کاهش یافته و به حدود ۳۲ درصد می‌رسد. همچنین، در حضور آب، استفاده از حجم قابل‌دسترس مدل شیل خشک منجر به پیش‌بینی نادرست جذب اضافی می‌شود و باید حجم اشغال‌شده توسط آب از حجم قابل‌دسترس کسر شود.

کلمات کلیدی: مخازن شیل گازی، جذب سطحی، گاز درجا، شبیه‌سازی مولکولی، چگالی جذب‌شده

فهرست مطالب

۱	فصل ۱: مقدمه
۲	۱-۱- مقدمه
۵	۲-۱- اهمیت موضوع
۶	۳-۱- ضرورت تحقیق
۸	۴-۱- روش تحقیق
۹	۵-۱- نوآوری های تحقیق
۱۱	۱-۵-۱- پرسش های کلیدی تحقیق
۱۱	۶-۱- ساختار رساله
۱۳	فصل ۲: آشنایی با مخازن شیل گازی
۱۴	۱-۲- دسته بندی مخازن
۱۴	۲-۲- شیل گازی
۱۵	۳-۲- مواد تشکیل دهنده مخازن شیل
۱۵	۱-۳-۲- مواد آلی
۱۹	۲-۳-۲- کانی ها
۲۲	۴-۲- مؤلفه های سیال
۲۲	۵-۲- اندازه و شکل منافذ
۲۳	۶-۲- رطوبت و حضور آب
۲۴	۷-۲- مکانیزم های ذخیره سازی گاز
۲۶	۲-۷-۲- همدمای جذب
۳۳	۳-۷-۲- مدل لانگمویر
۳۴	۴-۷-۲- مدل توث
۳۴	۵-۷-۲- مدل SDR
۳۵	۶-۷-۲- مدل SBET
۳۵	۸-۲- مخازن شیل گازی ایران
۳۵	۱-۸-۲- زمین شناسی منطقه و سازندهای مطالعه شده
۳۶	۲-۸-۲- سازند گرو
۳۷	۳-۸-۲- سازند سرگلو
۳۷	۹-۲- مطالعات انجام شده درباره مخازن شیل گازی ایران
۳۸	۱۰-۲- جمع بندی
۴۰	فصل ۳: مروری بر پیشینه تحقیق
۴۱	۱-۳- شبیه سازی اتمی ساختار کِروژن
۴۵	۲-۱-۳- پیشینه تحقیق
۵۰	۳-۱-۳- مطالعات مربوط به تورم کِروژن
۵۲	۴-۱-۳- کانی های رسی

۵۸.....۳-۱-۵- برهمکنش مواد آلی و معدنی.....

فصل ۴: مبانی شبیه‌سازی مولکولی ۷۲

۷۴.....۴-۱-۱- مبانی روش‌های شبیه‌سازی مولکولی.....

۷۵.....۴-۱-۱- هنگرد.....

۷۶.....۴-۱-۲- روش شبیه‌سازی GCMC.....

۷۸.....۴-۱-۳- الگوریتم ورله سرعتی.....

۷۹.....۴-۱-۴- گام زمانی.....

۷۹.....۴-۱-۵- شرایط مرزی.....

۸۰.....۴-۱-۶- میدان نیرو.....

۸۶.....۴-۲- نرم افزار لمپس.....

فصل ۵: بررسی نحوه محاسبه چگالی جذب‌شده برای تبدیل جذب اضافی به جذب مطلق ۸۸

۸۹.....۵-۱- مقدمه.....

۹۱.....۵-۲- شبیه‌سازی مولکولی.....

۹۳.....۵-۲-۲- شبیه‌سازی GCMC/MD.....

۹۳.....۵-۳- بحث و نتیجه‌گیری.....

۹۳.....۵-۳-۱- حجم قابل دسترس.....

۹۶.....۵-۳-۲- پروفایل توزیع چگالی.....

۹۷.....۵-۳-۳- چگالی جذب‌شده.....

۹۹.....۵-۳-۴- ضخامت لایه جذب‌شده.....

۱۰۱.....۵-۳-۵- تأثیر اندازه منفذ، فشار و دما.....

۱۰۳.....۵-۳-۶- جذب مطلق.....

۱۰۶.....۵-۴- نتیجه‌گیری.....

فصل ۶: جذب متان در نانو کامپوزیت شیل ۱۰۸

۱۰۹.....۶-۱- مقدمه.....

۱۰۹.....۶-۲- مواد و روش‌ها.....

۱۰۹.....۶-۲-۱- ایلیت.....

۱۱۰.....۶-۲-۲- کروژن.....

۱۱۰.....۶-۲-۳- مدل شیل.....

۱۱۳.....۶-۲-۴- شبیه‌سازی GCMC/MD.....

۱۱۵.....۶-۳- بحث و نتیجه‌گیری.....

۱۱۵.....۶-۳-۱- صحت‌سنجی میدان نیرو، ماتریس کروژن و مدل شیل.....

۱۱۶.....۶-۳-۲- جذب متان در مدل کامپوزیت کروژن صلب- ایلیت.....

۱۲۲.....۶-۳-۳- جذب متان در مدل کامپوزیت کروژن انعطاف‌پذیر- ایلیت.....

۱۲۵.....۶-۳-۴- جذب اضافی.....

۱۲۹.....۶-۳-۵- جذب مطلق.....

۴-۶- نتیجه گیری ۱۳۴

فصل ۷: نتیجه گیری و پیشنهادات ۱۳۶

۷-۱- جمع بندی و نتیجه گیری ۱۳۷

۷-۲- پیشنهادات برای کارهای آتی ۱۳۹

پیوست ۱۴۰

مراجع ۱۶۴

فهرست اشکال

- شکل (۱-۱) پیش‌بینی و مقایسه سوخت‌های مختلف تا سال ۲۰۴۰ ۲
- شکل (۲-۱) پیش‌بینی مصرف گاز طبیعی از منابع متعارف و غیرمتعارف در آمریکا ۳
- شکل (۳-۱) موقعیت‌های حوضه‌های رسوبی و نواحی آنالیز شده برای سازندهای شیل ۴
- شکل (۴-۱) تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از برهمکنش‌های مواد آلی و غیرآلی در شیل ۷
- شکل (۱-۲) مقایسه ماتریس و سیال بین مخازن متعارف و غیرمتعارف ۱۴
- شکل (۲-۲) تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از نمونه شیل ۱۵
- شکل (۳-۲) نمودار ون- کرولن ۱۶
- شکل (۴-۲) ساختار انواع کانی ۲۰
- شکل (۵-۲) الف) واحد تتراهدرال ب) واحد اوکتاهدرال ۲۱
- شکل (۶-۲) الگوی تشکیل انواع کانی رس ۲۱
- شکل (۷-۲) مؤلفه‌های سیال شیل ۲۲
- شکل (۸-۲) تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از نمونه شیل لانگماکسی ۲۳
- شکل (۹-۲) محدوده اشباع آب اولیه مخازن شیل مختلف ۲۴
- شکل (۱۰-۲) تصویر شماتیک از جذب سطحی، جذب عمقی و گاز آزاد ۲۵
- شکل (۱۱-۲) محدوده گرمای جذب متان در جاذب‌های مختلف ۲۶
- شکل (۱۲-۲) دسته‌بندی انواع همدمای جذب سطحی ۲۷
- شکل (۱۳-۲) محدوده قرارگیری عمق مخازن شیل آمریکا و چین ۲۸
- شکل (۱۴-۲) دیاگرام فاز الف) متان، ب) آب ۲۸
- شکل (۱۵-۲) تصویر شماتیک از جذب مطلق و جذب اضافی ۲۹
- شکل (۱۶-۲) تعریف سطح کنولی ۳۱
- شکل (۱۷-۲) مقایسه چگالی جذب‌شده متان فوق بحرانی با چگالی فاز مایع و گاز متان ۳۳
- شکل (۱۸-۲) نقشه زمین‌شناسی ناحیه لرستان حوضه رسوبی زاگرس ۳۶
- شکل (۱-۳) ساختار شیمیایی دوبعدی انواع کِروژن در شروع مرحله دیاژنز، شروع مرحله کاتازنز و پایان مرحله کاتازنز ۴۱
- شکل (۲-۳) مدل دوبعدی سیسکین برای کِروژن رودخانه گرین ۴۲
- شکل (۳-۳) تصویر سمت چپ. مثالی از یک فرگمنت کِروژن و تصویر سمت راست ساختار مولکول کِروژن ۴۲
- شکل (۴-۳) ساختار انواع کِروژن ارائه‌شده توسط آنگرر و همکاران ۴۳

- شکل (۳-۵) کروژن با بلوغ‌های مختلف..... ۴۴
- شکل (۳-۶) برهمکنش کروژن با مونت موریلونیت ۵۹
- شکل (۳-۷) مدل ماتریس شیل. الف) متیل نفتالن و مونت موریلونیت، ب) متیل نفتالن و سیلیکا، ج) متیل نفتالن و ایلیت..... ۶۰
- شکل (۳-۸) مدل شیل ساخته شده با الف) کوارتز-گرافیت و نانولوله کربن برای شبیه‌سازی منافذ بین کروژن - مواد غیرآلی و کروژن، ب) گرافن-کلسیت، گرافن-سیلیکا-سیلیکا-کلسیت، ج) گرافن و مونت موریلونیت، د) گرافن و کائولینیت..... ۶۳
- شکل (۳-۹) مدل‌های شیل ساخته شده با کروژن-ایلیت، کروژن-سیلیکا و کروژن-کلسیت..... ۶۵
- شکل (۳-۱۰) ساخت مدل شیل با الف) کروژن نوع II-D و کائولینیت، ب) کروژن نوع I و مونت موریلونیت، ج) کروژن نوع II-A و مونت موریلونیت، د) کروژن نوع II-C و ایلیت، ه) کروژن نوع II-D و کائولینیت..... ۶۶
- شکل (۳-۱۱) ماتریس شیل ساخته شده با الف) مونت موریلونیت، کوارتز، ایلیت و کروژن نوع II-D، ب) مونت موریلونیت، کوارتز، ایلیت و کروژن نوع III در حضور آب، ج) مونت موریلونیت، کلریت، ایلیت، کائولینیت و کروژن، د) ایلیت، اسمیت و کروژن..... ۶۹
- شکل (۴-۱) شرایط مرزی متناوب..... ۸۰
- شکل (۴-۲) نمای کلی از انواع برهمکنش‌های پیوندی و غیرپیوندی..... ۸۱
- شکل (۴-۳) پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲..... ۸۲
- شکل (۴-۴) فلوچارت شبیه‌سازی مولکولی الف) دینامیک مولکولی، ب) GCMC..... ۸۷
- شکل (۵-۱) الف) تصویر شماتیک عرضهای مؤثر نانومنافذ شیاری گرافن و ب) پروفایل توزیع چگالی متان. ۹۰
- شکل (۵-۲) نمای سه‌بعدی جعبه شبیه‌سازی..... ۹۲
- شکل (۵-۳) پروفایل توزیع چگالی هلیوم در منفذ با اندازه ۶ نانومتر در دمای ۳۳۳/۱۵ کلوین..... ۹۲
- شکل (۵-۴) جذب اضافی متان محاسبه شده با استفاده از روش انبساط هلیوم در دماهای الف) ۳۰۳/۱۵، ب) ۳۱۸/۱۵، ج) ۳۳۳/۱۵، د) ۳۴۸/۱۵ کلوین..... ۹۵
- شکل (۵-۵) جذب اضافی متان محاسبه شده با استفاده از روش پویشگر هلیوم در دماهای الف) ۳۰۳/۱۵، ب) ۳۱۸/۱۵، ج) ۳۳۳/۱۵، د) ۳۴۸/۱۵ کلوین..... ۹۵
- شکل (۵-۶) چگالی جذب شده متان با استفاده از سیستم‌های مختلف در منفذ ۰/۹ نانومتری در دماهای مختلف..... ۹۶
- شکل (۵-۷) توزیع پروفایل چگالی متان در منافذ با اندازه‌های مختلف در فشار ۴۰ مگاپاسکال و دمای ۳۰۳/۱۵ کلوین..... ۹۷

- شکل (۵-۸) چگالی جذب شده متان با استفاده از سیستم‌های مختلف در منفذ ۶ نانومتری در دماهای الف)
- ۳۰۳/۱۵ (ب) ۳۱۸/۱۵ (ج) ۳۳۳/۱۵ (د) ۳۴۸/۱۵ کلوین ۹۹
- شکل (۵-۹) الف) و ج) درصد خطا ضخامت لایه اول جذب شده با استفاده از سیستم‌های مختلف، ب) و د)
- ضخامت لایه اول جذب شده در منافذ با اندازه‌های مختلف در دماهای ۳۰۳/۱۵ و ۳۴۸/۱۵ کلوین ۱۰۰
- شکل (۵-۱۰) توزیع پروفایل چگالی متان در دماهای مختلف ۱۰۱
- شکل (۵-۱۱) چگالی جذب شده متان به دست آمده با سیستم‌های مختلف الف) در دمای ثابت ۳۴۸/۱۵ کلوین و فشارهای مختلف، ب) فشارهای ثابت ۴۱/۷۶ (رنگ قرمز) و ۴۳/۳ مگاپاسکال (رنگ سبز) و دماهای مختلف ۱۰۲
- شکل (۵-۱۲) مقایسه نتایج جذب اضافی همدمای به دست آمده از شبیه‌سازی مولکولی با نتایج آزمایشگاهی ۱۰۳
- شکل (۵-۱۳) همدمای جذب مطلق متان محاسبه شده بر اساس چگالی جذب شده توسط سیستم‌های ۱a، ۲a و ۳a با روش‌های الف) انبساط هلیوم ب) پوششگر هلیوم در دماهای مختلف ۱۰۴
- شکل (۵-۱۴) همدمای جذب مطلق متان، محاسبه شده بر اساس چگالی جذب شده توسط سیستم‌های متفاوت در حجم‌های قابل دسترس، که با استفاده از روش انبساط هلیوم تعیین شده‌اند، در دماهای الف) ۳۰۳/۱۵ (ب) ۳۱۸/۱۵ (ج) ۳۳۳/۱۵ (د) ۳۴۸/۱۵ کلوین ۱۰۵
- شکل (۵-۱۵) همدمای جذب مطلق متان، محاسبه شده بر اساس چگالی جذب شده توسط سیستم‌های متفاوت در حجم‌های قابل دسترس، که با استفاده از روش پوششگر هلیوم تعیین شده‌اند، در دماهای الف) ۳۰۳/۱۵ (ب) ۳۱۸/۱۵ (ج) ۳۳۳/۱۵ (د) ۳۴۸/۱۵ کلوین ۱۰۶
- شکل (۶-۱) الف) پیکربندی اولیه ایلیت با صفحات تتراهدرال، ب) ساختار مولکولی کروژن نوع II-C، ج) پیکربندی اولیه استفاده‌شده برای ساخت ماتریس کروژن، د) پیکربندی نهایی برای ساخت ماتریس کروژن، ه) مدل شیل با منفذ شیاری، و) پروفایل توزیع چگالی ایلیت، پتاسیم و کروژن ۱۱۰
- شکل (۶-۲) الف) رابطه بین پتانسیل شیمیایی و فشار در دما و فشارهای مختلف ب) رابطه بین فشار ورودی و فشار خروجی محاسبه شده با استفاده از معادله حالت و پتانسیل شیمیایی ۱۱۳
- شکل (۶-۳) پروفایل چگالی متان در اندازه منفذ ۲ نانومتر، در دمای ۳۰۳/۱۵ کلوین و فشار ۵۰ مگاپاسکال
- الف) خشک ب) حضور آب ۱۱۵
- شکل (۶-۴) مقایسه الف) نتایج چگالی توده‌ای به دست آمده از شبیه‌سازی مولکولی با نتایج NIST، ب) همدمای جذب اضافی مدل شیل، کروژن و ایلیت با نتایج آزمایشگاهی ۱۱۶
- شکل (۶-۵) توزیع پروفایل چگالی متان در مدل کروژن صلب - ایلیت در فشارهای مختلف در منفذ با اندازه ۱ نانومتر و دماهای الف) ۳۰۳/۱۵ K (ب) ۳۳۳/۱۵ K (ج) ۳۶۳/۱۵ K، در منفذ با اندازه ۲ نانومتر و دماهای د) ۳۰۳/۱۵ K (ه) ۳۳۳/۱۵ K (و) ۳۶۳/۱۵ K، در منفذ با اندازه ۴ نانومتر دماهای ز) ۳۰۳/۱۵ K (ح) ۳۳۳/۱۵ K، ط) ۳۰۳/۱۵ K

- ۳۶۳/۱۵ K. خط چین‌ها چگالی توده‌ای متان است. (در توزیع پروفایل چگالی، سمت چپ نمودار ایلیت و سمت راست کروژن است)..... ۱۱۷
- شکل (۶-۶) انرژی پتانسیل متان با ایلیت و کروژن..... ۱۱۸
- شکل (۷-۶) توزیع پروفایل چگالی متان در دمای ۳۶۳/۱۵ کلوین در فشارهای مختلف در مدل کروژن صلب - ایلیت در منفذ با اندازه ۱ نانومتر و رطوبت‌های، الف) 0.1 g/cm^3 ، ب) 0.2 g/cm^3 ، در منفذ با اندازه ۲ نانومتر و رطوبت‌های، ج) 0.1 g/cm^3 ، د) 0.2 g/cm^3 ، در منفذ با اندازه ۴ نانومتر و رطوبت‌های، ه) 0.1 g/cm^3 ، و) 0.2 g/cm^3 . خط چین‌ها چگالی توده‌ای متان است..... ۱۲۰
- شکل (۸-۶) تصویر جعبه شبیه‌سازی همراه با توزیع پروفایل چگالی آب و متان در رطوبت و منافذ با اندازه‌های مختلف..... ۱۲۱
- شکل (۹-۶) تعداد پیوندهای هیدروژنی در مدل شیل صلب با رطوبت 0.2 g/cm^3 در منافذ با اندازه‌های مختلف..... ۱۲۱
- شکل (۱۰-۶) پروفایل توزیع چگالی متان در مدل کروژن-ایلیت انعطاف پذیر در شرایط خشک اندازه منافذ مختلف الف) ۱ نانومتر، ب) ۲ نانومتر، ج) ۴ نانومتر در دمای ۳۰۳/۱۵ کلوین و فشار ۵۰ مگاپاسکال..... ۱۲۳
- شکل (۱۱-۶) پروفایل دوبعدی زبری سطح ماتریس کروژن الف) صلب، ب) انعطاف پذیر..... ۱۲۳
- شکل (۱۲-۶) پروفایل توزیع چگالی متان در مدل کروژن-ایلیت انعطاف پذیر در شرایط رطوبت 0.2 g/cm^3 با اندازه منافذ مختلف الف) ۱ نانومتر، ب) ۲ نانومتر، ج) ۴ نانومتر در دمای ۳۶۳/۱۵ کلوین و فشار ۵۰ مگاپاسکال..... ۱۲۴
- شکل (۱۳-۶) حداکثر چگالی جذب شده متان در ماتریس کروژن الف) ب، ج) و ایلیت د، ه، و) در با اندازه منافذ ۱، ۲ و ۴ نانومتر. حرف اول "R" یا "F" به ترتیب نشان دهنده "Kerogen Rigid" و "Kerogen Flexible" است. حرف دوم "D" و "M" به ترتیب بیانگر شرایط "خشک" و "مرطوب" است. همچنین، "M1" رطوبت 0.1 g/cm^3 و "M2" رطوبت 0.1 g/cm^3 را نشان می‌دهد..... ۱۲۵
- شکل (۱۴-۶) همدمای جذب اضافی متان در شرایط خشک و مرطوب با اندازه منافذ مختلف الف) ۱ نانومتر، ب) ۲ نانومتر، ج) ۴ نانومتر در دماهای ۳۰۳/۱۵، ۳۳۳/۱۵ و ۳۶۳/۱۵ کلوین..... ۱۲۶
- شکل (۱۵-۶) تصاویر جعبه شبیه‌سازی مولکولی و حجم قابل دسترس در منافذ با اندازه‌های ۱، ۲ و ۴ نانومتر در شرایط رطوبتی مختلف..... ۱۲۷
- شکل (۱۶-۶) حجم قابل دسترس اصلاح شده در رطوبت و منافذ مختلف..... ۱۲۷
- شکل (۱۷-۶) جذب اضافی متان اصلاح شده، ب) پروفایل توزیع چگالی متان، ج) پروفایل توزیع چگالی آب در حضور رطوبت‌های مختلف در منفذ با اندازه ۴ نانومتر در دمای ۳۶۳/۱۵ کلوین و فشار ۵۰ مگاپاسکال در مدل شیل صلب..... ۱۲۸

شکل (۶-۱۸) مقایسه مدل‌های جذب برای پیش‌بینی مقدار جذب مطلق با نتایج به‌دست آمده از شبیه‌سازی GCMC/MD در مدل کروژن صلب - ایلیت در منفذ با اندازه ۴ نانومتر در دماهای الف) ۳۰۳/۱۵، ب) ۳۳۳/۱۵، ج) ۳۶۳/۱۵ کلوین..... ۱۳۱

شکل (۶-۱۹) مقدار گاز درجا در اندازه منافذ مختلف در مدل شیل صلب در الف) فشار ۳۰ MPa و دمای K ۳۰۳/۱۵، ب) فشار ۵۰ MPa و دمای K ۳۰۳/۱۵، ج) فشار ۳۰ MPa و دمای K ۳۶۳/۱۵، د) فشار ۵۰ MPa و دمای K ۳۶۳/۱۵..... ۱۳۳

شکل (۶-۲۰) مقدار گاز درجا در اندازه منافذ مختلف در مدل شیل انعطاف‌پذیر در فشار ۵۰ مگاپاسکال و دمای ۳۰۳/۱۵ کلوین..... ۱۳۳

شکل (۶-۲۱) مقدار گاز درجا در اندازه منافذ مختلف در مدل شیل انعطاف‌پذیر با رطوبت آب 0.2 g/cm^3 در فشار ۵۰ مگاپاسکال و دمای ۳۶۳/۱۵ کلوین..... ۱۳۴

شکل (۶-۲۲) مقدار گاز درجا در منفذ ۴ نانومتری در مدل شیل در شرایط مختلف..... ۱۳۴

فهرست جداول

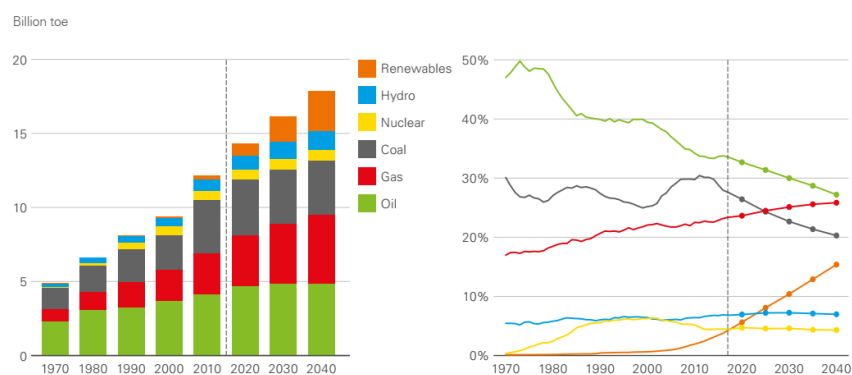
- جدول (۱-۱) ده کشور با بیشترین منابع شیل نفت و گاز قابل استحصال..... ۴
- جدول (۱-۲) تقسیم‌بندی سنگ‌های منشأ هیدروکربنی بر اساس محتوای کل کربن آلی ۱۸
- جدول (۱-۳) مدل‌های شیل ساخته‌شده با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی توسط محققان مختلف..... ۷۱
- جدول (۱-۴) پارامترهای لنارد-جونز و الکترواستاتیکی گرافن، متان و آب..... ۸۵
- جدول (۱-۵) بازه‌های محاسبه چگالی جذب‌شده متان در منافذ شیاری گرافن..... ۹۰
- جدول (۲-۵) عرض مؤثر، عرض غیر مؤثر و حجم منافذ قابل دسترس در اندازه منافذ مختلف..... ۹۴
- جدول (۱-۶) مراحل ساخت ماتریس کروژن..... ۱۱۲
- جدول (۲-۶) پارامترهای مدل‌های جذب به‌دست آمده در دماهای مختلف..... ۱۳۰

فصل ۱:

مقدمه

۱-۱- مقدمه

منابع هیدروکربوری به عنوان اصلی‌ترین منبع تأمین انرژی برای جوامع امروزی به‌شمار می‌روند، و به همین دلیل نفت و گاز نقش راهبردی در معادلات اقتصادی و سیاسی جهانی ایفا می‌کنند. بر اساس گزارش شرکت بریتیش پترولیوم^۱، شکل ۱-۱ نشان‌دهنده افزایش چهار برابری مصرف انرژی بین سال‌های ۱۹۷۰ تا ۲۰۴۰ است. در این بازه زمانی، بیشترین رشد مربوط به انرژی‌های تجدیدپذیر خواهد بود. با این حال، پیش‌بینی می‌شود که در سال‌های آینده، بخش عمده‌ای از انرژی مورد نیاز همچنان از سوخت‌های فسیلی نظیر نفت، گاز و زغال‌سنگ تأمین گردد [۱،۲]. گاز طبیعی در مقایسه با نفت، به‌عنوان یک سوخت دوستدار محیط‌زیست شناخته می‌شود، زیرا انتشار آلاینده‌های گلخانه‌ای کمتری دارد. این ویژگی موجب شده است که توجه بیشتری به گاز طبیعی جلب شود. پیش‌بینی‌ها نشان می‌دهد که با افزایش تولید و کاهش قیمت، مصرف گاز در سال‌های آینده نسبت به نفت با سرعت بیشتری رشد خواهد کرد [۱].



شکل (۱-۱) پیش‌بینی و مقایسه سوخت‌های مختلف تا سال ۲۰۴۰ [۱]

افزایش تقاضا برای انرژی و سوخت، همراه با کاهش تولید نفت و گاز از مخازن متعارف^۲، کشورها را به سمت جستجو و کشف منابع جدید و جایگزین سوق داده است. در سال‌های اخیر، با افزایش قیمت نفت و گاز و کاهش هزینه‌های اکتشاف و تولید، استخراج از مخازن غیرمتعارف^۳ به مرکز توجه جهانی تبدیل شده است. به‌کارگیری فناوری‌های پیشرفته نظیر شکاف هیدرولیکی^۴ و حفاری چاه‌های افقی^۵ امکان استخراج اقتصادی از این منابع را فراهم کرده و در کشورهای توسعه‌یافته، توجیه‌پذیری اقتصادی این فعالیت‌ها را افزایش داده است. به‌طوری‌که در حال حاضر، سهم قابل توجهی از نیازهای انرژی این

^۱ British Petroleum

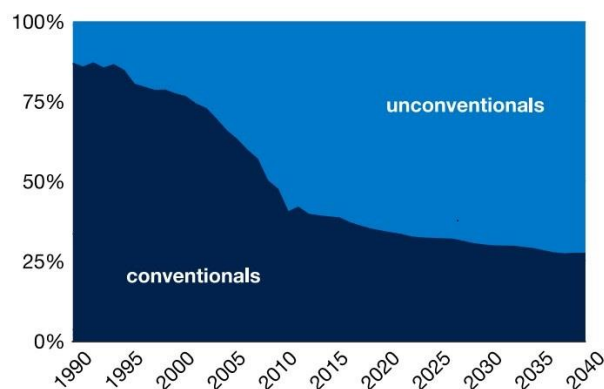
^۲ Conventional reservoir

^۳ Unconventional reservoir

^۴ Hydraulic fracturing

^۵ Horizontal well

کشورها از طریق منابع غیرمتعارف تأمین می‌شود. به طور مثال، مطابق شکل ۱-۲ انتظار می‌رود تا سال ۲۰۴۰ بیش از ۷۵ درصد گاز مصرفی در آمریکا از مخازن غیرمتعارف استخراج شود [۳]. علاوه بر این، مخازن غیرمتعارف برای برخی کشورها پتانسیل کاهش قیمت انرژی و کاهش وابستگی به واردات انرژی از دیگر کشورها را فراهم می‌کند. از این رو، منابع غیرمتعارف تأثیرات گسترده‌ای بر چشم‌اندازهای اقتصادی و سیاسی کشورها خواهد داشت.



شکل (۱-۲) پیش‌بینی مصرف گاز طبیعی از منابع متعارف و غیرمتعارف در آمریکا [۳]

بر اساس چشم‌انداز اکسن موبیل^۱ در سال ۲۰۱۴، حدود ۴۰ درصد از منابع گاز طبیعی جهان در مخازن غیرمتعارف نظیر شیل گازی^۲، مخازن متراکم گازی^۳ و متان موجود در لایه‌های زغالی^۴ قرار دارد [۴]. شیل به‌عنوان یکی از مهم‌ترین منابع غیرمتعارف در سال‌های اخیر توجه ویژه‌ای را به خود جلب کرده است. شکل ۱-۳ موقعیت‌های حوضه‌های رسوبی و نواحی آنالیز شده ۱۳۷ سازند شیلی در ۴۱ کشور را طبق گزارش منتشر شده از دفتر اطلاعات انرژی^۵ در سال ۲۰۱۳ نشان می‌دهد. نواحی مشخص شده با رنگ قرمز موقعیت حوضه‌های رسوبی با سازند شیلی^۶ را نشان می‌دهد که برآوردهای احتمالی نفت و گاز طبیعی درجا^۷ و منابع قابل استحصال را ارائه می‌دهد. نواحی قهوه‌ای رنگ موقعیت حوضه‌هایی را نشان می‌دهد که بازبینی شده‌اند، اما منابع شیل در این نواحی به دلیل کمبود اطلاعات ضروری برای ارزیابی پیدا نشده است. نواحی سفید رنگ در این گزارش مورد ارزیابی قرار نگرفته‌اند [۵]. مطابق شکل ۱-۳ و جدول ۱-۱، روسیه، آمریکا و چین به ترتیب بیش‌ترین منابع شیل نفتی و چین، آرژانتین، آلبانیا و آمریکا به ترتیب بیش‌ترین شیل گازی قابل برداشت را دارند [۵].

¹ ExxonMobil

² Shale gas

³ Tight gas

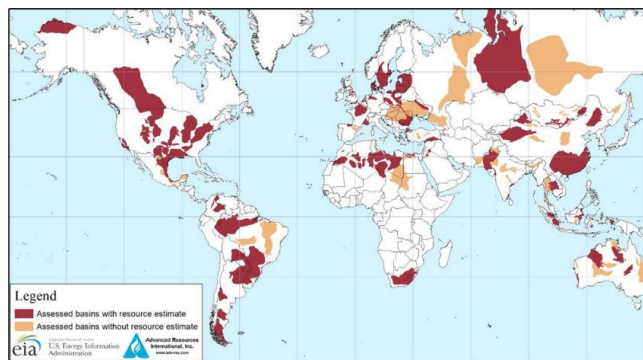
⁴ Coalbed methane (CBM)

⁵ Basin

⁶ Energy Information Administration (EIA)

⁷ Shale Formation

⁸ Gas in place (GIP)



شکل (۳-۱) موقعیت‌های حوضه‌های رسوبی و نواحی آنالیز شده برای سازندهای شیل [۵]

جدول (۱-۱) ده کشور با بیشترین منابع شیل نفت و گاز قابل استحصال [۵]

شیل نفتی			شیل گازی	
رتبه	کشور	میلیارد بشکه	رتبه	کشور
۱	روسیه	۷۵	۱	چین
۲	ایالات متحده آمریکا	۵۸	۲	آرژانتین
۳	چین	۳۲	۳	الجزایر
۴	آرژانتین	۲۷	۴	ایالات متحده آمریکا
۵	لیبی	۲۶	۵	کانادا
۶	استرالیا	۱۸	۶	مکزیک
۷	ونزوئلا	۱۳	۷	استرالیا
۸	مکزیک	۱۳	۸	آفریقای جنوبی
۹	پاکستان	۹	۹	روسیه
۱۰	کانادا	۹	۱۰	برزیل
				تریلیون فوت مکعب
				۳۱/۶
				۲۲/۷
				۲۰
				۱۸/۸
				۱۶/۲
				۱۵/۴
				۱۲/۴
				۱۱
				۸/۱
				۶/۹

طبق گزارش دفتر برنامه‌ریزی و اقتصاد کلان برق و انرژی، ایران با دارا بودن بیش از ۱۵۹/۱ میلیارد بشکه نفت پس از ونزوئلا، عربستان سعودی و کانادا در رتبه چهارم جهان قرار دارد و ۹/۱ درصد از ذخایر نفت جهان را در اختیار دارد. همچنین ایران با دارا بودن ۱۳/۱ درصد از ذخایر نفت اوپک، پس از ونزوئلا و عربستان سعودی در رتبه سوم در میان کشورهای عضو این سازمان قرار دارد. در حوضه گاز طبیعی، کل میزان ذخایر قابل استحصال ایران تا سال ۱۳۹۹ به ۳۲/۸ تریلیون مترمکعب رسیده است. بر اساس آخرین آمار منتشرشده در سال ۲۰۲۰ از سوی شرکت بریتیش پترولیوم، روسیه با ۳۷/۴ تریلیون مترمکعب ذخایر گاز طبیعی و سهم ۱۹/۹ درصدی از ذخایر گاز طبیعی جهان، در جایگاه نخست قرار دارد. ایران با حدود ۱۷/۱ درصد از ذخایر گاز طبیعی جهان، پس از روسیه در جایگاه دوم قرار دارد [۶].

همان‌طور که اشاره شد، ایران به‌عنوان یکی از کشورهای دارای بیشترین منابع نفت و گاز، اقتصاد خود را به‌طور عمده بر پایه این صنعت بنا نهاده است. با توجه به اهمیت روزافزون مخازن غیرمتعارف در تأمین انرژی، ایران نیز مطالعات اولیه خود را به‌منظور بررسی و اکتشاف این نوع مخازن آغاز کرده است. در سال ۱۳۹۰، مدیریت اکتشاف شرکت ملی نفت ایران، پی‌جویی مقدماتی منابع شیل گازی را در حوضه‌های رسوبی زاگرس، کپه‌داغ و ایران مرکزی به اتمام رساند [۷]. این مطالعه سازندهای گرو و سرگلو در بخش مرکزی ناحیه زمین‌شناسی لرستان را برای پی‌جویی‌های تفصیلی پیشنهاد کرد. در فاز اول این مطالعه، بررسی زمین‌شناسی و ژئوشیمی توالی‌های مورد مطالعه برای ارزیابی توانایی آن‌ها در تولید و ذخیره‌سازی گاز انجام شد. نتایج این بررسی‌ها نشان داد که این مخازن پتانسیل تولید و استخراج گاز را دارند [۸]. با این حال، تاکنون مطالعه تفصیلی جامعی بر روی منابع شیل گازی در ایران صورت نگرفته است.

۱-۲- اهمیت موضوع

در حال حاضر، دانش استخراج اقتصادی از مخازن شیل عمدتاً در اختیار ایالات متحده آمریکا قرار دارد. کشورهای دیگری مانند چین، استرالیا و کانادا نیز به دنبال دستیابی به این دانش هستند و در این راستا مطالعات گسترده‌ای را در دست اجرا دارند. بنابراین، با توجه به پتانسیل بالای مخازن غیرمتعارف در ایران، نیاز مبرم به انجام تحقیقات گسترده وجود دارد تا از روند پیشرفت جهانی و دانش روز در این حوزه عقب نمانیم.

مخازن غیرمتعارف، در مقایسه با مخازن متعارف، دارای پیچیدگی‌های زیادی هستند. یکی از اولین و مهم‌ترین مراحل در مطالعات مخازن شیل، تخمین دقیق حجم گاز درجا برای ارزیابی اقتصادی استخراج است. علاوه بر این، شناخت دقیق رفتار سیال در مقیاس نانومتری منافذ مخازن شیل برای استخراج از این منافذ ضروری است. دستیابی به درک کافی از این رفتارهای پیچیده، شرط بنیادین برای استخراج مؤثر و اقتصادی از این مخازن است. با این حال، بررسی تخمین حجم گاز درجا و مکانیزم جذب گاز در منافذ شیل با استفاده از امکانات آزمایشگاهی موجود، با چالش‌ها و محدودیت‌هایی همراه است. به‌عنوان مثال:

۱- بسیاری از مخازن شیل در اعماق زیاد و در محدوده دمایی ۶۰ تا ۱۲۰ درجه سانتی‌گراد و فشار ۱۵ تا ۴۰ مگاپاسکال قرار دارند [۹]. ایجاد چنین شرایط فشار و دمای بالا در محیط آزمایشگاهی نیازمند

تجهیزات پیشرفته و هزینه‌بر است که در بسیاری از موارد، دسترسی به آن‌ها محدود است.

۲- اگرچه تجهیزات آزمایشگاهی موجود، امکان مطالعه تغییرات رفتار فاز سیال محبوس در منافذ را فراهم می‌کند، اما این تجهیزات عمدتاً برای بررسی هیدروکربورهای تک‌فاز و سبک (مانند متان) در شرایط دما و فشار پایین تا متوسط طراحی شده‌اند؛ شرایطی که با وضعیت واقعی مخازن شیل تفاوت قابل توجهی دارد. همچنین، در مخازن واقعی، ترکیبی از سیالات مختلف وجود دارد که با تجهیزات آزمایشگاهی کنونی، به‌طور کامل قابل مطالعه نیست [۱۰].

۳- تجهیزات آزمایشگاهی موجود قادر به بررسی دقیق رفتار و مکانیزم سیالات درون منافذ در مقیاس نانو و میکرو، به ویژه از نظر اندازه و هندسه منافذ نیستند. این امر باعث محدودیت در تحلیل‌های دقیق و کامل رفتار سیال در این مقیاس‌ها می‌شود.

۴- تجهیزات آزمایشگاهی تنها قادر به اندازه‌گیری همدمای جذب اضافی^۱ هستند و نمی‌توانند همدمای جذب مطلق^۲ را به‌طور مستقیم محاسبه کنند. برای محاسبه همدمای جذب مطلق از رابطه گیبس^۳ استفاده می‌شود که مستلزم فرضیات ساده‌ای نظیر ثابت در نظر گرفتن چگالی جذب شده است؛ این فرضیات می‌توانند به ارائه نتایج نادقیق منجر شوند [۱۱].

یکی از روش‌های کاربردی برای مطالعه پدیده‌ها در مقیاس میکرو و نانو، استفاده از شبیه‌سازی مولکولی است. این روش می‌تواند بر بسیاری از مشکلات و محدودیت‌های آزمایشگاهی غلبه کند. با این حال، باید توجه داشت که هر دو روش آزمایشگاهی و شبیه‌سازی مولکولی مکمل یکدیگر هستند و در سال‌های اخیر، تحقیقات پیرامون مکانیزم جذب گاز در مخازن شیل با استفاده از این دو روش به‌طور همزمان در حال توسعه و پیشرفت است. این ترکیب از روش‌ها می‌تواند به درک بهتر و کامل‌تری از رفتار مخازن شیل منجر شود و ابزارهای بهتری را برای بهره‌برداری از این منابع فراهم کند.

۱-۳- ضرورت تحقیق

شیل به‌عنوان یک سنگ رسوبی پیچیده شامل ترکیبی از مواد آلی، معدنی و کانی‌های رسی است. قسمت اصلی مواد آلی از کِروژن^۴ تشکیل می‌شود. اگرچه کِروژن تنها حدود ۵ درصد از کل وزن شیل را تشکیل می‌دهد [۱۲]، اما بخش عمده‌ای از گاز در نانو منافذ کِروژن جذب می‌شود. در مقابل، کانی‌های رسی نقش کمتری در این فرایند دارند و تنها سهمی حدود ۱۰ درصد از جذب سطحی را به خود اختصاص

¹ Excess adsorption isotherm

² Absolute adsorption isotherm

³ Gibbs

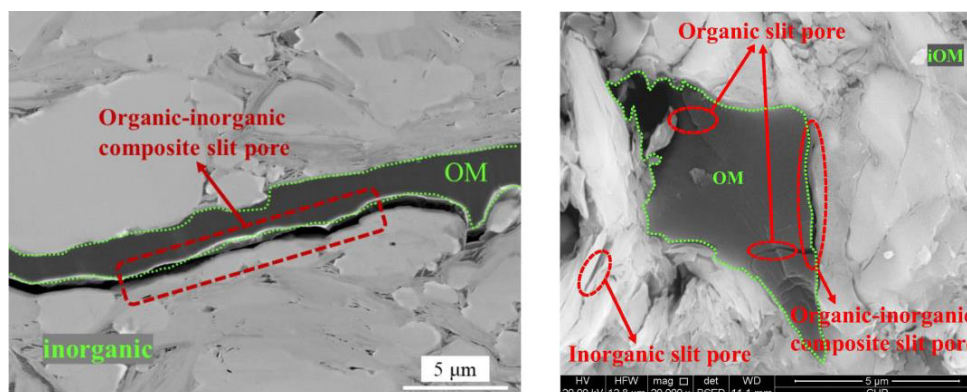
⁴ Kerogen

می‌دهند [۱۳]. از سوی دیگر، نتایج برخی مطالعات نشان داده است که در نمونه‌های شیل با کربن آلی کل^۱ (TOC) کم، جذب سطحی متان می‌تواند حتی بیش‌تر از نمونه‌های شیل با TOC بالا باشد [۱۴، ۱۵].

این موضوع بیانگر تأثیرات پیچیده مواد غیرآلی بر مکانیزم جذب گاز در شیل است.

به دلیل چالش‌های موجود در استخراج و تجزیه دقیق اجزای مختلف شیل، بسیاری از مطالعات آزمایشگاهی به بررسی جذب گاز در نمونه‌های شیل پرداخته‌اند. با این حال، تنوع مواد موجود در شیل و برهم‌کنش‌های پیچیده میان اجزای آن، مطالعه مکانیزم‌های جذب سطحی در مقیاس نانو را بسیار دشوار می‌کند. از سوی دیگر، شبیه‌سازی‌های مولکولی به دلیل محدودیت‌های محاسباتی و زمانی، معمولاً به بررسی هر جزء به‌صورت جداگانه تمرکز کرده‌اند و در ادامه نتایج جذب سطحی مواد مختلف با هم مقایسه شده‌اند.

نتایج تحقیقات اخیر [۱۶، ۱۷]، اهمیت برهم‌کنش‌های میان مواد آلی و غیرآلی در جذب گاز را برجسته کرده است. مطابق تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی^۲ در شکل ۴-۱، بخش بزرگی از منافذ شیل در مرز بین مواد آلی و غیرآلی قرار دارند و این فصل مشترک نقش مهمی در رفتار جذب سطحی گازها ایفا می‌کند. بنابراین، مطالعه برهم‌کنش این اجزا به‌ویژه در مقیاس نانو برای درک بهتر مکانیزم جذب و بهینه‌سازی فرآیندهای استخراج اهمیت بالایی دارد. رساله حاضر با تمرکز بر این برهم‌کنش‌ها در مقیاس نانو به دنبال ارائه بینش‌های جدیدی از مکانیزم‌های جذب گاز است. نتایج این رساله می‌تواند به بهبود روش‌های استخراج گاز از مخازن شیل کمک کند و در نهایت منجر به بهینه‌سازی فرآیندهای استخراج، کاهش هزینه‌ها و افزایش بهره‌وری در صنعت نفت و گاز شود.



شکل (۴-۱) تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از برهم‌کنش‌های مواد آلی و غیرآلی در شیل [۱۸، ۱۹]

^۱ Total organic carbon (TOC)

^۲ Scanning electron microscopy (SEM)

۴-۱- روش تحقیق

این رساله با تمرکز بر بررسی مکانیزم جذب سطحی متان و تخمین گاز در مخازن شیل ایران، به‌ویژه در منافذ نانومتری، طراحی شده است. به دلیل پیچیدگی‌های مخازن شیل، به‌ویژه برهم‌کنش‌های میان مواد آلی و غیرآلی، شبیه‌سازی مولکولی به عنوان ابزاری کلیدی در این تحقیق به کار گرفته می‌شود. در این راستا، مطالعات بر روی برهم‌کنش بین کروژن و کانی رسی (ایلیت)^۱ که در مخازن شیل ایران غالب است، متمرکز خواهد بود. رویکردهای شبیه‌سازی این تحقیق به شرح زیر هستند:

استفاده از نرم‌افزار متن‌باز لمپس^۲: این نرم‌افزار به دلیل انعطاف‌پذیری بالا و قابلیت‌های پیشرفته برای اجرای شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی^۳ و مونت کارلو^۴ انتخاب شده است. لمپس امکان بررسی دقیق و کارآمد ساختارهای مولکولی پیچیده مانند شیل را فراهم می‌کند.

شبیه‌سازی مونت کارلو در هنگرد کانونی بزرگ^۵ (GCMC): این روش برای بررسی میزان جذب سطحی به کار گرفته می‌شود و شرایط واقعی مخازن شیل را با ثابت نگه‌داشتن حجم، دما، و پتانسیل شیمیایی به‌خوبی شبیه‌سازی می‌کند.

الگوریتم متروپولیس^۶ در شبیه‌سازی‌های مونت کارلو: این الگوریتم به دلیل کارایی و دقت بالای خود برای محاسبه جذب سطحی مولکول‌های کوچک مانند متان در سیستم‌های پیچیده انتخاب شده است. تمرکز بر جذب سطحی فیزیکی: با توجه به گرمای جذب پایین (کمتر از ۴۰ kJ/mol) در مواد آلی و کانی‌های شیل، تمرکز اصلی این تحقیق بر روی جذب فیزیکی است، که در این نوع مخازن غالب است.

مدل کروژن نوع II-C: مدل کروژن نوع II-C که توسط آنگر^۷ و همکاران توسعه داده شده است، یکی از دقیق‌ترین و معتبرترین مدل‌های موجود برای شبیه‌سازی ساختار کروژن است و به دلیل توانایی بالای آن در بازتاب رفتار واقعی مواد آلی در منافذ نانومتری شیل، مورد تأیید بسیاری از محققان قرار گرفته است.

هندسه شیاری^۸ برای منافذ: در این تحقیق، هندسه منافذ به صورت شیاری در نظر گرفته می‌شود، که

^۱ Illite

^۲ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

^۳ Molecular dynamics

^۴ Monte Carlo

^۵ Grand canonical Monte Carlo

^۶ Metropolis

^۷ Ungerer

^۸ Slit pore