

УДК 537.635

doi 10.26089/NumMet.v18r317

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИГНАЛА ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА В НАСЫЩЕННЫХ ПОРИСТЫХ СРЕДАХ С УЧЕТОМ ДВИЖЕНИЯ ФАЗ

К. Л. Клименок¹, А. Ю. Демьянов²

Представлена методика моделирования ядерного магнитного резонанса (ЯМР), позволяющая проводить расчеты для многокомпонентных многофазно насыщенных пористых сред с учетом движения всех фаз. Приведены результаты применения этого метода к цифровым моделям пористых сред, распределение фаз в которых определяется путем прямого гидродинамического моделирования методом функционала плотности. Обсуждаются результаты моделирования сигнала для различных последовательностей импульсов, повторяющих реальные ЯМР-эксперименты, и их использование для получения информации о транспорте флюида в пористой среде. Построены потоковые пропагаторы для различных течений. Проведено сравнение пропагатора со смещением, рассчитанным на основе модели переноса пассивной примеси.

Ключевые слова: численное моделирование, ядерный магнитный резонанс, ядерная магнитная релаксация, потоковый пропагатор, перенос пассивной примеси.

1. Введение. Релаксометрия ядерного магнитного резонанса (далее в тексте будет использовано сокращение ЯМР) является важным экспериментальным методом для изучения насыщенных пористых сред [1]. Она чувствительна к реологическим свойствам образца, его проницаемости [2], структуре порового пространства [3], смачиваемости [4], а также к молекулярной диффузии и к переносу флюида. В частности, одним из самых распространенных методов получения информации о транспорте является потоковый пропагатор.

Пропагатор по определению представляет собой функцию плотности вероятности смещения для всех частиц в образце от начального положения за исследуемый промежуток времени [5]. Первый пропагатор, полученный экспериментально методами ЯМР, был построен [5] для процессов самодиффузии в микропористых цеолитах. Методика его построения основывалась на серии экспериментов с последовательностями, содержащими не только радиочастотные импульсы, но и кратковременные включения градиента внешнего магнитного поля.

Дальнейшие экспериментальные работы [6–8], посвященные построению распределения смещений, учитывали не столько самодиффузию, но и конвективный перенос флюида вследствие градиента давления на торцах исследуемого образца.

Следует также отметить работу [9], где экспериментально были изучены случаи многофазного течения, а сигналы от различных компонентов разделялись по химическому сдвигу. По форме пропагатора изучались отклонения от закона Фика [10, 11] в пористых средах и зависимость эффективного коэффициента диффузии от времени [12].

Подходы к моделированию потоковых пропагаторов можно разделить на две категории: решение решеточных уравнений Больцмана [13–16] и метод случайных блужданий [17–20]. Однако стоит заметить, что оба эти подхода не повторяют ЯМР-эксперименты и никак не учитывают свойства многофазно насыщенного образца, связанные с релаксацией намагниченности.

Авторы настоящей статьи предлагают методику прямого моделирования ЯМР и построения численных аналогов реальных лабораторных экспериментов для насыщенных пористых сред. При проведении численных расчетов используются построенные методом рентгеновской микротомографии [21] цифровые модели пористых сред (в контексте изучения свойств горных пород часто употребляется термин “цифровые модели керна”). При этом используемые в настоящей работе распределения фаз, насыщающих поровое пространство образца и поля их скоростей, получены путем прямого численного моделирования методом функционала плотности [22].

¹ Московский физико-технический институт, факультет управления и прикладной математики, Институтский переулок, д. 9, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный; аспирант, e-mail: klimenok.kl@gmail.com

² Московский научно-исследовательский центр Шлюмберже, ул. Пудовкина, д. 13, 119285, Москва; ст. науч. сотр., e-mail: ademianov@slb.com

Ставится цель проверить факт совпадения результатов численных ЯМР-экспериментов с потоковым пропагатором, построенным в соответствии с [5]. Для случаев модельных течений пропагатор сравнивается с аналитической функцией. В случае реальных образцов ведется независимый от ЯМР-свойств среды параллельный расчет переноса концентрации пассивной примеси, на основании которой рассчитывается распределение смещений и соответствующий этому распределению пропагатор. Методика расчета переноса пассивной примеси тоже реализована авторами и описана ниже.

2. Постановка задачи. В нашей модели удельная намагниченность на единицу объема рассматривается как непрерывная вектор-функция \mathbf{M} , которая является решением обобщенного уравнения Блоха [23]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = & g[\mathbf{M} \times \mathbf{B}_0] + g[\mathbf{M} \times d\mathbf{B}] - \frac{1}{T_1} (\mathbf{n}_0(\mathbf{n}_0\mathbf{M}) - \mathbf{M}_{\text{eq}}) - \frac{1}{T_2} (\mathbf{M} - \mathbf{n}_0(\mathbf{n}_0\mathbf{M})) + \frac{\partial(\mathbf{M} \cdot \mathbf{v}_x)}{\partial x} + \\ & + \frac{\partial(\mathbf{M} \cdot \mathbf{v}_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\mathbf{M} \cdot \mathbf{v}_z)}{\partial z} + \left(\frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial}{\partial x} \right) \mathbf{M} + \left(\frac{\partial}{\partial y} D \frac{\partial}{\partial y} \right) \mathbf{M} + \left(\frac{\partial}{\partial z} D \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{M}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь \mathbf{M} — вектор намагниченности; g — гиромагнитное отношение; \mathbf{B}_0 и $d\mathbf{B}$ — соответственно сильное однородное и слабое неоднородное внешнее магнитное поле; вектор $\mathbf{n}_0 = \frac{\mathbf{B}_0}{|\mathbf{B}_0|}$ — нормированный вектор направления внешнего магнитного поля; \mathbf{M}_{eq} — равновесная средняя намагниченность в образце до включения каких-либо возмущающих факторов (например, градиента магнитного поля, радиочастотных импульсов и др.), T_1 и T_2 — времена продольной и поперечной релаксации соответственно; x, y, z — пространственные координаты; v_x, v_y, v_z — проекции скоростей на соответствующие направления; D — коэффициент самодиффузии.

Следует сделать замечание о линейности уравнения (1) относительно всех процессов: релаксации, диффузии и конвекции. Рассмотренная добавка с учетом конвекционного переноса, так же как и добавка, сделанная Торри при учете диффузии [23], не вносит никаких нелинейных эффектов в процессы релаксации. Уравнение (1) решается только для жидких фаз в порах, при этом динамика ЯМР в окружающем твердом веществе не рассматривается. Это связано с тем, что времена релаксации в жидкой и твердых фазах значительно разнятся, и мы можем отделить сигнал одной фазы от другой [1].

Для решения уравнения (1) используется описанная подробно в [1] стандартная процедура перехода в систему отсчета, вращающуюся с ларморовской частотой для данного внешнего однородного поля \mathbf{B}_0 . Это действие направлено также на то, чтобы не решать уравнение с различными по порядку величины членами, поскольку член с внешним однородным полем много больше, чем остальные.

Распределение фаз в случаях многофазного насыщения рассчитывается методом функционала плотности [22]. В случае, когда в некоторой точке пространства содержится более одной фазы (такая ситуация реализуется на фазовом контакте), необходимо правильно выстроить параметры в задаче моделирования ЯМР, учитывающие это обстоятельство.

Обратные времена релаксации смеси рассчитываются как средневзвешенные обратные времена в чистых фазах:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{C_1}{T_1^{1\text{-я фаза}}} + \frac{C_2}{T_1^{2\text{-я фаза}}, \quad \frac{1}{T_2} = \frac{C_1}{T_2^{1\text{-я фаза}}} + \frac{C_2}{T_2^{2\text{-я фаза}}.}$$

Коэффициенты C_1 и C_2 являются здесь объемными долями 1 и 2 фаз соответственно. Суммирование не прямых, а обратных величин связано с тем, что в уравнение Блоха входят именно обратные величины времени релаксации.

Объединенный коэффициент самодиффузии для смеси нельзя рассчитать аналогично временам релаксации. Дело в том, что по физическому смыслу процесса, диффузии намагниченности между фазами не происходит, поэтому необходимо искусственно “убирать” диффузионные потоки, например путем занижения эффективного коэффициента самодиффузии на межфазном фронте. Для этого в настоящей работе используется следующая форма записи этого коэффициента:

$$D = (C_1 D_1 + C_2 D_2) \left(1 - \frac{2C_1 C_2}{C_1 + C_2} \right)^5.$$

При постановке задачи моделирования ЯМР-сигнала в насыщенной пористой среде следует разделять два различных типа граничных условий. Первые, или внешние, описывают поведение вектора намагниченности на границах расчетной области, а вторые, или внутренние, — на границе насыщенная пористая среда–порода.

В ходе расчетов используются внешние граничные условия двух типов: нулевая первая производная (или условие “непротекания”) и нулевое значение намагниченности.

В случае диффузионной задачи без конвективного переноса используется только первое.

При наличии конвективного переноса на сторонах, параллельных изучаемому направлению транспорта, устанавливается условие непротекания, а на сторонах, перпендикулярных этому направлению, устанавливается нулевое значение намагниченности.

Для границы порода–порода граничные условия на намагниченность описаны в [24,25] и задаются следующим образом:

$$D \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \mathbf{M} \right) = \rho_1 (\mathbf{n}_0 (\mathbf{n}_0 \mathbf{M}) - \mathbf{M}_{\text{eq}}) + \rho_2 (\mathbf{M} - \mathbf{n}_0 (\mathbf{n}_0 \mathbf{M})). \quad (2)$$

Здесь коэффициенты ρ_1 и ρ_2 соответствуют продольной и поперечной поверхностной релаксивности соответственно и имеют размерность скорости, а вектор \mathbf{n} соответствует нормальному вектору к поверхности, направленному в сторону поры.

В качестве начальных условий для расчетных вариантов изменения намагниченности будем использовать условие равновесной намагниченности \mathbf{M}_{eq} , направленной вдоль основного поля во всей расчетной области.

Как говорилось выше, кроме расчетов ЯМР нами дополнительно реализована методика расчета пропагатора на основе численного моделирования движения пассивной примеси. Такая методика необходима в тех случаях, когда нет возможности записать аналитическое решение относительного смещения пассивной примеси и сравнить результаты с ним. Она использует в качестве входных данных только информацию об образце, его насыщении различными фазами и о скорости течения.

Для решения задачи о переносе пассивной примеси в цифровой модели пористой среды используется следующее уравнение для концентрации примеси m :

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \frac{\partial(m \cdot v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(m \cdot v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(m \cdot v_z)}{\partial z} + \left(\frac{\partial}{\partial x} D \frac{\partial}{\partial x} \right) m + \left(\frac{\partial}{\partial y} D \frac{\partial}{\partial y} \right) m + \left(\frac{\partial}{\partial z} D \frac{\partial}{\partial z} \right) m. \quad (3)$$

Здесь, как и в уравнении Блоха (1), x, y, z соответствуют пространственным координатам. Граничные условия тоже делятся на внешние (на границе расчетной области) и внутренние (на контакте порода–порода). Внешние совпадают с внешними условиями для (1), а внутренние соответствуют нулевому потоку на стенке.

Начальные условия задачи переноса представляют собой слой пассивной примеси, перпендикулярный выделенному направлению. За время эволюции этот слой распространяется в пространстве, и по финальному распределению примеси строится относительное смещение примеси. Процедура повторяется для каждого поперечного слоя в образце, после чего происходит усреднение по относительным смещениям. Именно эти результаты и сравниваются с потоковым пропагатором, полученным после моделирования ЯМР.

3. Численный метод. Для решения уравнений (1) и (3) используется конечно-разностная аппроксимация на ортогональной равномерной сетке, состоящей из $N_x N_y N_z$ ячеек, в прямоугольном параллелепипеде Ω с координатами центров $\{x_i, y_i, z_i\}$:

$$\begin{aligned} x_i &= x_{\min} + \left(i - \frac{1}{2} \right) \Delta x : \quad i \in \{1, 2, \dots, N_x\}, & \Delta x &= \frac{x_{\max} - x_{\min}}{N_x}, \\ y_i &= y_{\min} + \left(j - \frac{1}{2} \right) \Delta y : \quad j \in \{1, 2, \dots, N_y\}, & \Delta y &= \frac{y_{\max} - y_{\min}}{N_y}, \\ z_i &= z_{\min} + \left(k - \frac{1}{2} \right) \Delta z : \quad k \in \{1, 2, \dots, N_z\}, & \Delta z &= \frac{z_{\max} - z_{\min}}{N_z}. \end{aligned}$$

Часть ячеек сетки являются порами (активными), а часть — породой (неактивными). Намагниченность $\mathbf{M}_{ijk} = \mathbf{M}(x_i, y_j, z_k)$ из уравнения (1) и концентрация пассивной примеси $m_{ijk} = m(x_i, y_j, z_k)$ из уравнения (3) приписываются к центру каждой активной ячейки. Значения скоростей $\mathbf{v}_{ijk} = \mathbf{v}(x_i, y_j, z_k)$ рассчитываются методом функционала плотности [22] в центрах ячеек для несжимаемых жидкостей. Коэффициент диффузии $D_{ijk} = D(x_i, y_j, z_k)$, заданный в центрах ячеек, пересчитывается на границах как удвоенное среднее гармоническое в двух соседних ячейках $D_{i+1/2,j,k} = \frac{2D_{ijk}D_{i+1,j,k}}{D_{ijk} + D_{i+1,j,k}}$; таким образом, на границе активной и неактивной ячеек этот коэффициент обращается в нуль, а между ячейками с одинаковыми значениями сохраняется. Времена релаксации $T_{1ijk} = T_1(x_i, y_j, z_k)$, $T_{2ijk} = T_2(x_i, y_j, z_k)$ и неоднородности поля $d\mathbf{B}_{ijk} = d\mathbf{B}(x_i, y_j, z_k)$ из уравнения (1) тоже заданы в центрах ячеек.

Для решения уравнения (3) используется явный метод МакКормака, описанный в [26]:

$$\begin{aligned}
 \tilde{m}_j^{n+1} &= m_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_{x_{ijk}} (m_{i+1,j,k}^n - m_{ijk}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta y} v_{y_{ijk}} (m_{i,j+1,k}^n - m_{ijk}^n) - \\
 &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta z} v_{z_{ijk}} (m_{i,j,k+1}^n - m_{ijk}^n) + \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(D_{i+1/2,j,k} \frac{(m_{i+1,j,k}^n - m_{ijk}^n)}{\Delta x} - D_{i-1/2,j,k} \frac{(m_{ijk}^n - m_{i-1,j,k}^n)}{\Delta x} \right) + \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(D_{i,j+1/2,k} \frac{(m_{i,j+1,k}^n - m_{ijk}^n)}{\Delta y} - D_{i,j-1/2,k} \frac{(m_{ijk}^n - m_{i,j-1,k}^n)}{\Delta y} \right) + \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(D_{i,j,k+1/2} \frac{(m_{i,j,k+1}^n - m_{ijk}^n)}{\Delta z} - D_{i,j,k-1/2} \frac{(m_{ijk}^n - m_{i,j,k-1}^n)}{\Delta z} \right), \\
 m_j^{n+1} &= \frac{1}{2} \left(m_i^n + \tilde{m}_j^{n+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_{x_{ijk}} (\tilde{m}_{ijk}^n - \tilde{m}_{i-1,j,k}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta y} v_{y_{ijk}} (\tilde{m}_{ijk}^n - \tilde{m}_{i,j-1,k}^n) - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\Delta t}{\Delta z} v_{z_{ijk}} (\tilde{m}_{ijk}^n - \tilde{m}_{i,j,k-1}^n) \right) + \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(D_{i+1/2,j,k} \frac{(m_{i+1,j,k}^n - m_{ijk}^n)}{\Delta x} - D_{i-1/2,j,k} \frac{(m_{ijk}^n - m_{i-1,j,k}^n)}{\Delta x} \right) + \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(D_{i,j+1/2,k} \frac{(m_{i,j+1,k}^n - m_{ijk}^n)}{\Delta y} - D_{i,j-1/2,k} \frac{(m_{ijk}^n - m_{i,j-1,k}^n)}{\Delta y} \right) + \\
 &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta z} \left(D_{i,j,k+1/2} \frac{(m_{i,j,k+1}^n - m_{ijk}^n)}{\Delta z} - D_{i,j,k-1/2} \frac{(m_{ijk}^n - m_{i,j,k-1}^n)}{\Delta z} \right).
 \end{aligned} \tag{4}$$

Первое выражение соответствует шагу предиктора, а второе – корректору. Шаг Δt по времени выбирается исходя из условия устойчивости схемы:

$$\Delta t \leq \left(\frac{\max(|v_x|, |v_y|, |v_z|)}{\min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)} + \frac{2 \max(D_{ijk})}{\min(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2)} \right)^{-1}. \tag{5}$$

Заметим, что в случае задач моделирования пропатора на использованных нами сетках с характерными параметрами моделирования ($\min \Delta x = 10^{-6}$ м, $\max |v| = 5 \times 10^{-3}$ м/с, $\max D = 3 \times 10^{-9}$ м/с²) основным является условие конвективного переноса (за исключением чисто диффузионных случаев) и именно это условие ограничивает шаг по времени:

$$\left(\frac{\max(|v_x|, |v_y|, |v_z|)}{\min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)} \right)^{-1} = 2 \times 10^{-5} \text{ с}, \quad \left(\frac{2 \max(D_{ijk})}{\min(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2)} \right)^{-1} \approx 1.6 \times 10^{-4} \text{ с}.$$

Таким образом, нет необходимости использовать альтернативные (в том числе и неявные) схемы для расчета диффузионной части уравнения. Выбор именно схемы МакКормака связан с тем, что она проста в реализации и допускает распараллеливание расчета. Проверка сеточной сходимости проводилась на одномерной постановке задачи для каждого из направлений трехмерного кода и дала второй порядок точности по пространству и по времени.

Для уравнения (1) можно заметить, что, хотя это уравнение векторное, влияния одних компонент вектора на другие нет, за исключением члена с векторным произведением. Однако в разделе 4 ниже описано, почему неоднородности поля не учитываются в численном моделировании. Таким образом, можно независимо решать уравнение для каждой из компонент. Для его решения тоже используется метод МакКормака (4), описанный выше, но в предиктор и корректор добавляются члены, связанные с релаксацией $\frac{\Delta t}{T_1} (\mathbf{n}_0(\mathbf{n}_0 \mathbf{M}) - \mathbf{M}_{\text{eq}})$ и $\frac{\Delta t}{T_2} (\mathbf{M} - \mathbf{n}_0(\mathbf{n}_0 \mathbf{M}))$. Однако при характерных временах релаксации ($T_1, T_2 = 0.5 \div 3$ с) условие устойчивости метода (5) не меняется.

Для учета граничных условий (2) можно воспользоваться тем фактом, что диффузионный поток для границы порода–порода имеет ту же структуру, что и соответствующие члены в исходном уравнении

Блоха (1). Воспользуемся идеей, описанной в книге Патанкара [27], и заменим времена релаксации в ячейках, соседствующих со стенками, следующим образом:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_{1\text{bulk}}} + \rho_1 \frac{S}{V}, \quad \frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_{2\text{bulk}}} + \rho_2 \frac{S}{V}.$$

Здесь S — площадь поверхности контакта, V — объем ячейки, индекс bulk соответствует объемному значению времени релаксации.

Программно метод реализован на параллельных системах вычислений с распределенной памятью на ускорителях вычислений на основе GPU (Graphics Processing Units).

4. Моделирование импульсного воздействия и учет неоднородностей. Включение радиочастотного поля с собственной ларморовской частотой поворачивает намагниченность на некоторый угол, который определяется временем действия этого поля [1]. Наиболее распространены импульсы, которые поворачивают намагниченность на 90 и 180 градусов во вращающейся системе отсчета. Поскольку время действия этого импульса много меньше времени эксперимента, в численной модели он принят мгновенным. Для его моделирования достаточно домножить намагниченность в каждой расчетной ячейке на матрицу поворота вдоль оси, сонаправленной с импульсом, на соответствующий ему угол.

Помимо радиочастотных, в экспериментах используются импульсные включения градиента внешнего магнитного поля. Моделирование таких градиентных импульсов тоже основывается на повороте вектора намагниченности, но в данном случае величина угла поворота рассчитывается на основании величины градиента, умноженного на его длительность, и зависит от положения в пространстве.

Кроме того, важно отметить следующий факт, оказывающий влияние на дальнейший ход рассуждений и методику выбора последовательностей для моделирования. В реальных экспериментах внешнее поле не идеально, что приводит к ускоренному затуханию сигнала из-за расфазировки спинов [1]; однако при помощи метода Хановского или стимулированного эха [29] можно получить представ-

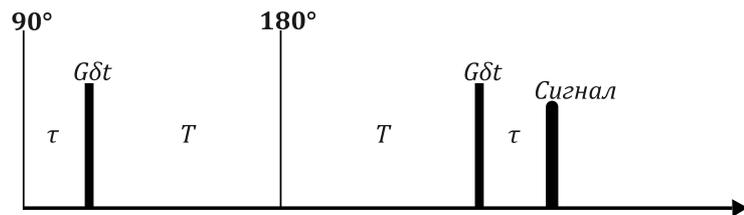


Рис. 1. Последовательность радиочастотных и градиентных импульсов, используемая в моделировании

ление о реальной проекции намагниченности и скорости релаксации. При моделировании введение дополнительных неоднородностей существенно усложняет расчет и, поскольку уравнение (1) решается с описанным выше упрощением, приводит к дополнительному затуханию сигнала, который не восстанавливается в эхо из-за дополнительных потоков, возникающих между соседними ячейками. Таким образом, при моделировании не учитываются неоднородности внешнего поля, а последовательности импульсов показывают реальное поведение проекций вектора намагниченности. Это ограничивает выбор моделируемых последовательностей теми, где вклад в итоговый сигнал вносит только поперечная релаксация, поскольку в случае с комбинированными последовательностями (например, стимулированное эхо) итоговый сигнал усредняется по всем направлениям, а в численной модели этого не происходит.

В качестве основной последовательности в настоящей статье использована последовательность, изображенная на рис. 1 [30]. Для нее выписано аналитическое решение амплитуды действительной части сигнала в случае релаксации и самодиффузии:

$$M_{\perp}(2\tau + 2T, gG\delta t) = M_{\text{eq}} \cdot \exp\left(-\left(\frac{2\tau + 2T}{T_2} + D \frac{(gG\delta t)^2}{2T}\right)\right). \quad (6)$$

В этом решении τ и T являются временными параметрами последовательности (они представлены на рис. 1), D — коэффициент самодиффузии, а $gG\delta t$ — произведение гиромагнитного отношения, величины градиента и длительности его работы соответственно.

Здесь следует привести комментарий о сигнале ЯМР в эксперименте и о его связи с намагниченностью. Он представляет собой комплексное число, действительная часть которого является суммарной проекцией вектора намагниченности на исходное направление после первого 90-градусного импульса, а мнимая тоже соответствует суммарной проекции вектора намагниченности в поперечной плоскости, но в перпендикулярном импульсу направлении.

Для построения пропагатора используется именно комплексное представление сигнала, который снимается для серии различных градиентов и от которых делается Фурье-преобразование. В силу такой интерпретации действительная часть сигнала оказывается четной функцией, а мнимая — нечетной, и результатом преобразования является действительная функция, которую собственно и называют пропагатором.

5. Верификация модели и полученные результаты. Для верификации модели сравниваются аналитический результат (6) с рассчитанным в модели. Для этого варьируются независимо значение времени T при фиксированном градиенте и величина эффективного градиента при фиксированном времени в сплошной среде без породы. В обоих случаях сигнал имеет только действительную часть.

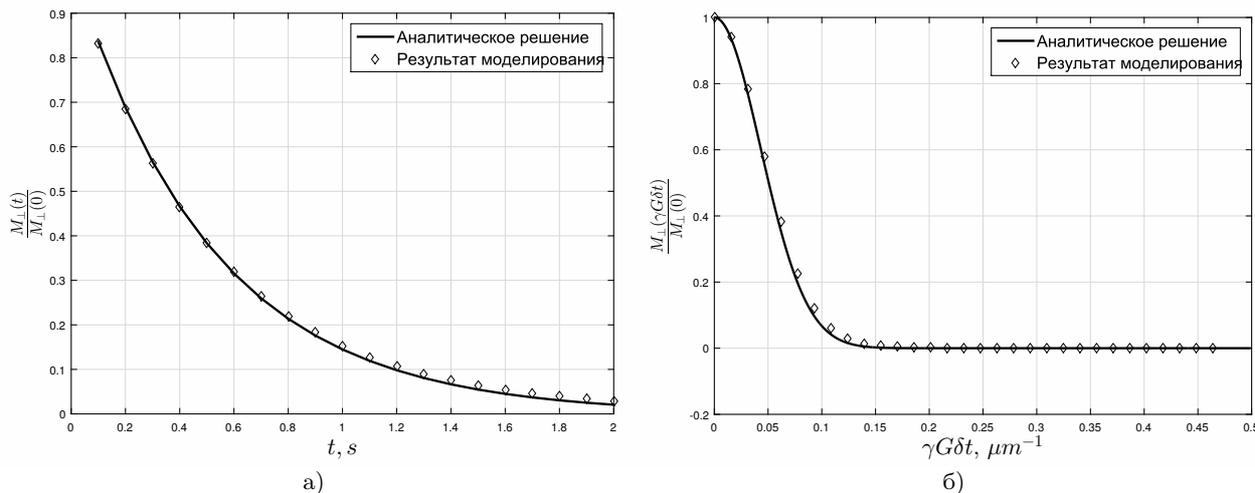


Рис. 2. Сравнение аналитического решения и результатов численного расчета поперечной намагниченности (формула 6) для случаев вариации времени (а) и градиента (б)

Цифровая модель представляет собой куб из $100 \times 100 \times 100$ вокселей размером 1 мкм. Моделирование проводилось для следующих параметров последовательности: $\tau = 5 \times 10^{-3}$ сек., время эволюции $2T = 0.09, 0.19, \dots, 1.99$ сек. Эффективное значение градиентного импульса $G dt = 5 \times 10^{-4}$ Тл/м·с, коэффициент самодиффузии $D = 2.7 \times 10^{-9}$ м²/с. Сравнение результатов представлено на рис. 2а. При вариации градиентных импульсов значение $2T$ фиксировалось равным 0.1 сек. Соответствующее сравнение результатов показано на рис. 2б.

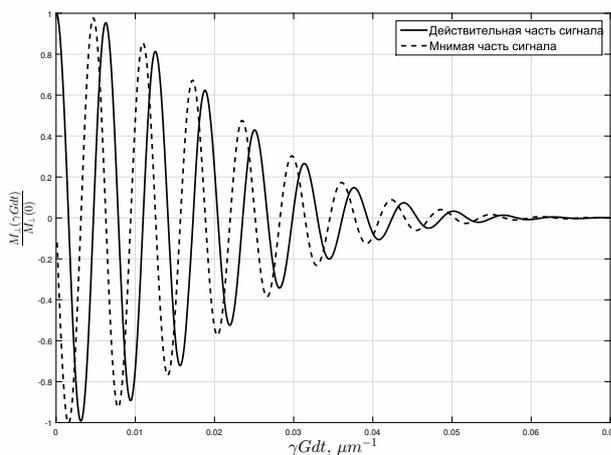


Рис. 3. Действительная и мнимая часть поперечной намагниченности для случая одномерного однофазного течения

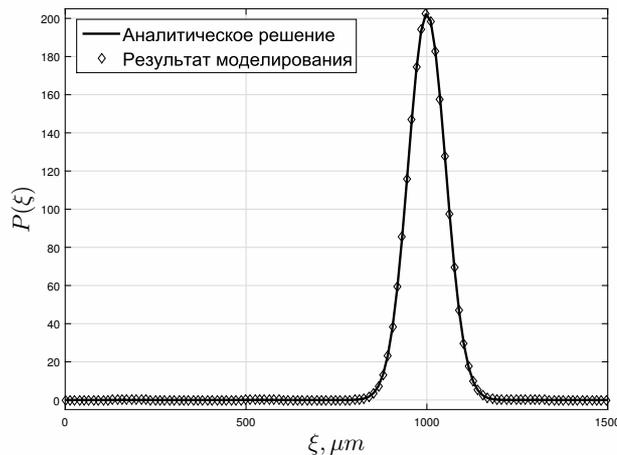


Рис. 4. Сравнение аналитической формы (сплошная линия) и результата моделирования пропагатора одномерного течения методом ЯМР (точки)

Дальнейшая верификация модели проводится для двух случаев: А) одномерное течение, В) двумерное двухфазное течение Пуазейля.

В случае А (одномерное течение несжимаемой жидкости) уравнение (3) имеет аналитическое решение

для распределения концентрации:

$$m(t, x) = m_0 \cdot \exp\left(-\frac{(x - vt)^2}{2Dt}\right). \quad (7)$$

Для численного анализа используем данные из рассмотренной выше модели, но изменим ее размеры. Поскольку задача является одномерной, то поперечные размеры составляют 1 ячейку, а продольные — 10 000 численных ячеек. Скорость течения равна 1 мм/с вдоль внешнего поля, остальные параметры модели остаются без изменений. Результаты расчета сигнала представлены на рис. 3, а сравнение нормированных пропагатора и аналитического решения (7) — на рис. 4.

Таблица 1

Параметры моделирования двумерного двухфазного течения Пуазейля

Параметр	Значение
Размер расчетной области	4000 × 30 × 1
Размер ячейки	1 мкм × 1 мкм × 1 мкм
Градиент давления a	30 Па/м
μ_1	1e-3 Па·с
μ_2	1e-2 Па·с
h_1	15 мкм
h_2	30 мкм
D_1	2.7e-9 м ² /с
D_2	8.2e-10 м ² /с
τ	5e-3 с
$2T$	0.2 с

Таблица 2

Параметры моделирования однофазного течения в образце Berea B28(1)

Параметр	Значение
Размер расчетной области	300 × 150 × 150
Размер ячейки	2.32 мкм × 2.32 мкм × 2.32 мкм
Пористость	45%
Вязкость воды	1e-3 Па·с
Средняя скорость течения	0.5 мм/с
Коэффициент самодиффузии воды	2.7e-9 м ² /с
τ	5e-3 с
$2T$	0.2 с

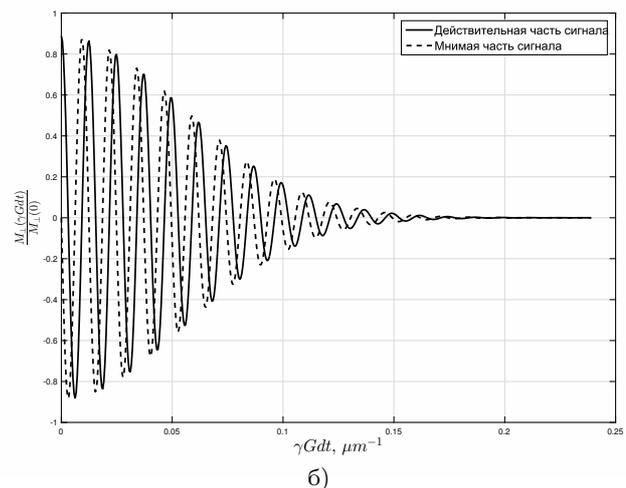
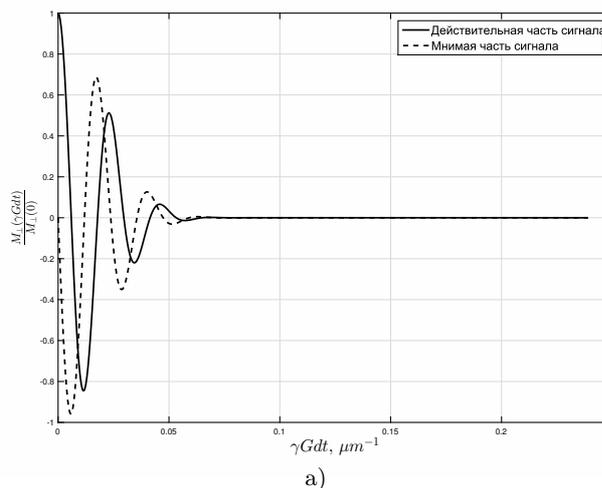


Рис. 5. Действительная и мнимая части сигналов от каждой из фаз: а) фаза 1, б) фаза 2. Сигналы отнормированы на значение сигнала 1 фазы при нулевом градиентном импульсе

В случае В рассматривается плоское течение двух несмешивающихся жидкостей, для которых известно аналитическое распределение скоростей [30]:

$$V_x(y) = \begin{cases} \frac{a}{2\mu_1} (h_2^2 - y^2), & h_1 \leq y \leq h_2, \\ \frac{a}{2\mu_1} (h_2^2 - h_1^2) + \frac{a}{2\mu_2} (h_1^2 - y^2), & 0 \leq y < h_1. \end{cases}$$

Здесь $y \in [0, h_1]$ — часть канала, занятая 1 фазой; $y \in [h_1, h_2]$ — часть канала, занятая 2 фазой, где h_1 соответствует стенке, а h_2 — расстоянию до оси симметрии; μ_1, μ_2 — коэффициенты вязкости соответствующих фаз; a — градиент давления на торца канала.

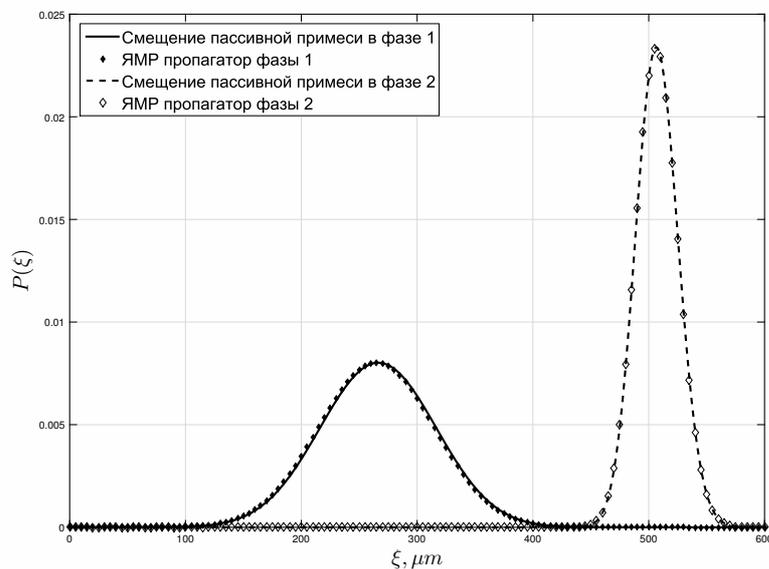
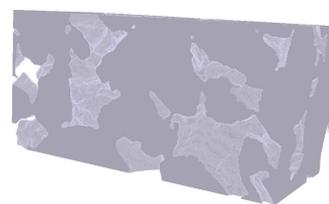
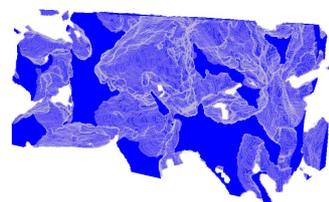


Рис. 6. Сравнение результата моделирования пропатора плоского двухфазного течения Пуазейля методом пассивной примеси (сплошные линии) и методом ЯМР (точки)



а)



б)

Рис. 7. Структура породы (а) и пористого пространства (б) для образца Berea B28(1)

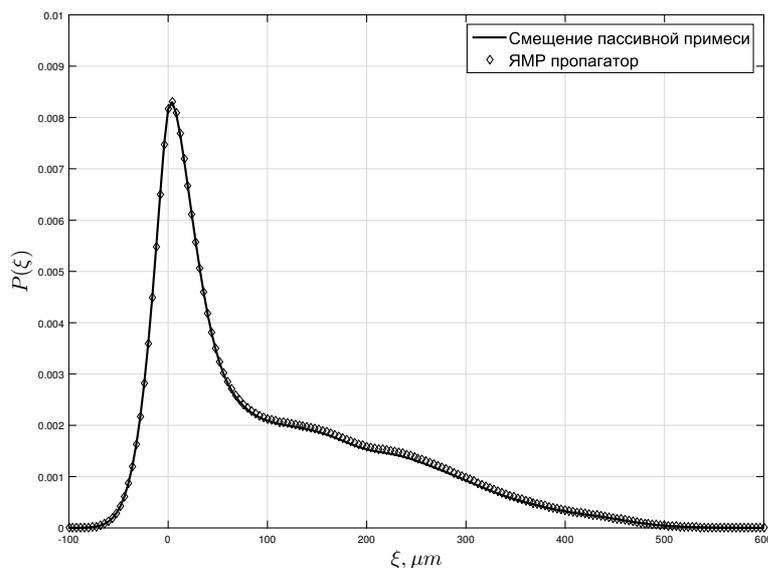
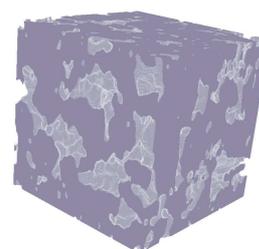
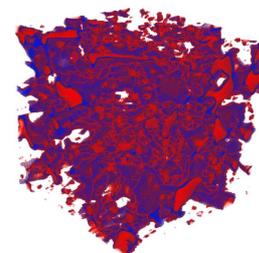


Рис. 8. Поточный пропатор для образца Berea B28(1)



а)



б)

Рис. 9. Структура породы (а) и насыщения пористого пространства (б) для образца Berea B28(2). Фаза 1 изображена синим цветом, фаза 2 — красным

В случае такого течения нельзя записать аналитическое решение уравнения (7), поэтому сравнивались результаты моделирования пропегатора и численного решения задачи переноса пассивной примеси. В табл. 1 представлены значения параметров моделирования.

Сигналы от каждой из фаз представлены на рис. 5, а пропегаторы в сравнении с переносом пассивной примеси для каждой из фаз представлены на рис. 6. Важно отметить, что ЯМР-пропегатор каждой из фаз нормируется на расчет переноса пассивной примеси независимо. Это необходимо, так как времена релаксации фаз различны и сигналы, по которым рассчитывается пропегатор, имеют разные амплитуды.

Практический интерес представляет использование этой модели для расчета потоковых пропегаторов на реальных образцах. Мы выполнили расчет образца Berea V28(1), насыщенного водой. На рис. 7 представлена пористая структура и поровое пространство образца. Параметры образца представлены в табл. 2, гидродинамика течения рассчитывалась методом функционала плотности. Рис. 8 показывает сравнение пропегатора, рассчитанного по двум описанным выше методикам.

Кроме того, был построен пропегатор для образца Berea V28(2), насыщенного двумя фазами с процентной объемной концентрацией 50%. Обе фазы находятся в покое; фаза 1 соответствует смачивающей фазе, а фаза 2 — несмачивающей. Образец представлен на рис. 9. Размер расчетной области $198 \times 198 \times 198$ ячеек. Параметры фаз совпадают с табл. 1, размер численных ячеек и времена последовательности совпадают с табл. 2. Результаты моделирования представлены на рис. 10. Как видно, несмотря на отличие коэффициентов диффузии ширина пропегаторов для каждой из фаз отличается незначительно, что свидетельствует об ограниченности пространства, насыщенного каждой из фаз.

6. Выводы. В настоящей статье предложен метод прямого моделирования сигнала ЯМР в пористых средах с многофазным насыщением с учетом движения фаз. Построенная численная модель прошла проверку, и получено совпадение с классическими аналитическими результатами.

Кроме того, предложена методика расчета пропегатора как функции плотности вероятности смещения пассивной примеси. Результаты расчета пропегаторов по этой методике и из моделирования ЯМР-экспериментов для модельных течений и реальных образцов полностью совпадают.

Проведен расчет пропегатора на реальных цифровых моделях пористой среды. Такой подход может быть использован для проверки влияния различных свойств флюида и среды на пропегаторы, полученные в реальных экспериментах.

Авторы выражают искреннюю благодарность О. Ю. Динариеву и Л. Е. Довгилевичу за продуктивные обсуждения проблем, возникших в ходе выполнения работы. Авторы также благодарят Московский научно-исследовательский центр Шлюмберже за поддержку и разрешение опубликовать результаты работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Slichter C.P.* Principles of magnetic resonance. Т. 1. Heidelberg: Springer, 1990.
2. *Timur A.* Pulsed nuclear magnetic resonance studies of porosity, movable fluid, and permeability of sandstones // *J. Pet. Technol.* 1969. **21**, N 6. 775–786.
3. *Loren J.D., Robinson J.D.* Relations between pore size fluid and matrix properties, and NMR measurements // *Soc. Pet. Eng. J.* 1970. **10**, N 3. 268–278.

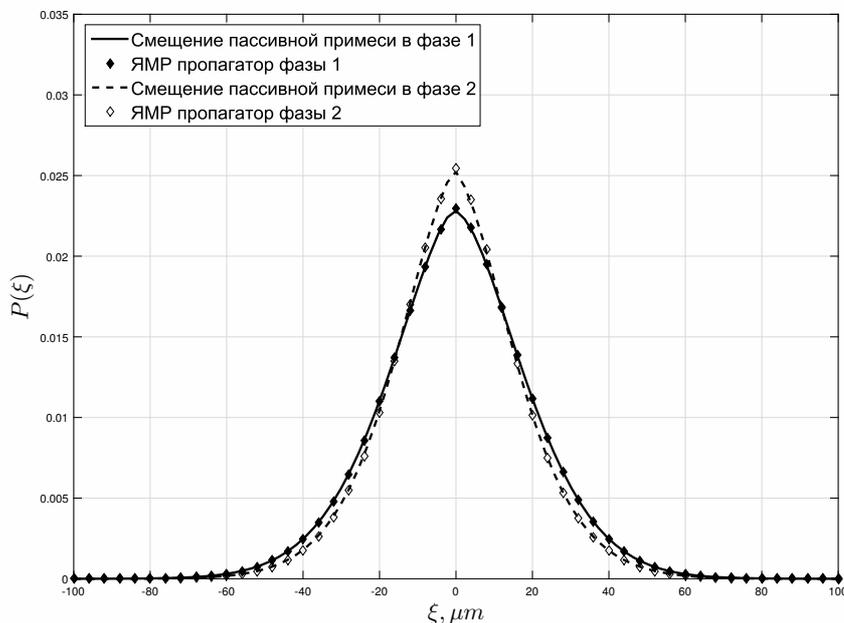


Рис. 10. Сравнение результата моделирования пропегатора методом пассивной примеси (сплошные линии) и методом ЯМР (точки) для каждой из фаз образца Berea V28(2)

4. *Looyestijn W.J.* Wettability index determination from NMR Logs // Soc. Petrophys. Well-Log Anal. 2008. **49**, N 2. 130–145.
5. *Kärger J., Heink W.* The propagator representation of molecular transport in microporous crystallites // J. Magn. Reson. 1983. **51**, N 1. 1–7.
6. *Lebon L. et al.* Pulsed field gradient NMR measurements of probability distribution of displacement under flow in sphere packings // Magn. Reson. Imaging. 1996. **14**, N 7–8. 989–991.
7. *Packer K.J. et al.* The characterisation of fluid transport in porous solids by means of pulsed magnetic field gradient NMR // Magn. Reson. Imaging. 1998. **16**, N 5–6. 463–469.
8. *Tessier J.J. et al.* NMR measurements and numerical simulation of fluid transport in porous solids // AIChE J. 1997. **43**, N 7. 1653–1661.
9. *Tessier J.J., Packer K.J.* The characterization of multiphase fluid transport in a porous solid by pulsed gradient stimulated echo nuclear magnetic resonance // Phys. Fluids. 1998. **10**, N 1. 75–85.
10. *Bijeljic B. et al.* Predictions of non-Fickian solute transport in different classes of porous media using direct simulation on pore-scale images // Phys. Rev. E. 2013. **87**, N 1. doi: 10.1103/PhysRevE.87.013011.
11. *Karadimitriou N.K. et al.* Critical role of the immobile zone in non-Fickian two-phase transport: a new paradigm // Environ. Sci. Technol. 2016. **50**, N 8. 4384–4392.
12. *Zhang Z., Johnson D.L., Schwartz L.M.* Simulating the time-dependent diffusion coefficient in mixed-pore-size materials // Phys. Rev. E. 2011. **84**. doi: 10.1103/PhysRevE.84.031129.
13. *Yang J., Boek E.S.* Pore scale simulation of flow in porous media using the lattice-Boltzmann method // SPE Annual Technical Conference and Exhibition. Society of Petroleum Engineers. Richardson: SPE Press, 2011. 1–13.
14. *Yang J., Crawshaw J., Boek E.S.* Quantitative determination of molecular propagator distributions for solute transport in homogeneous and heterogeneous porous media using lattice Boltzmann simulations // Water Resour. Res. 2013. **49**, N 12. 8531–8538.
15. *Boek E.S., Venturoli M.* Lattice-Boltzmann studies of fluid flow in porous media with realistic rock geometries // Comput. Math. with Appl. 2010. **59**, N 7. 2305–2314.
16. *Manz B., Gladden L.F., Warren P.B.* Flow and dispersion in porous media: lattice-Boltzmann and NMR studies // AIChE J. 1999. **45**, N 9. 1845–1854.
17. *Ferrari M. et al.* Study of dispersion by NMR: comparison between NMR measurements and stochastic simulation // Diffus. Fundam. 2013. **18**, N 11. 1–4.
18. *Grebenkov D.S.* A fast random walk algorithm for computing the pulsed-gradient spin-echo signal in multiscale porous media // J. Magn. Reson. Elsevier Inc. 2011. **208**, N 2. 243–255.
19. *Damion R.A. et al.* Pore-scale network modelling of flow propagators derived from pulsed magnetic field gradient spin echo NMR measurements in porous media // Chem. Eng. Sci. 2000. **55**, N 24. 5981–5998.
20. *Zhao W. et al.* Characterization of single-phase flow through carbonate rocks: quantitative comparison of NMR flow propagator measurements with a realistic pore network model // Transp. Porous Media. 2010. **81**, N 2. 305–315.
21. *Mees F. et al.* Applications of X-ray computed tomography in the geosciences // Applications of X-Ray Computed Tomography in the Geosciences. Vol. 215. London: Geological Society Press, 2003. 1–6.
22. *Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю., Евсеев Н.В.* Основы метода функционала плотности в гидродинамике. М.: Физматлит, 2009.
23. *Torrey H.C.* Bloch equations with diffusion terms // Phys. Rev. 1956. **104**, N 3. 563–565.
24. *Brownstein K.R., Tarr C.E.* Importance of classical diffusion in NMR studies of water in biological cells // Phys. Rev. A. 1979. **19**, N 6. 2446–2453.
25. *Brownstein K.R., Tarr C.E.* Spin-lattice relaxation in a system governed by diffusion // J. Magn. Reson. 1977. **26**, N 1. 17–24.
26. *MacCormack R.W.* A numerical method for solving the equations of compressible viscous flow // AIAA J. 1982. **20**, N 9. 1275–1281.
27. *Patankar S.V.* Numerical heat transfer and fluid flow: computational methods in mechanics and thermal science. Boca Raton: CRC press, 1980.
28. *Hahn E.L.* Spin echoes // Phys. Rev. 1950. **80**, N 4. 580–594.
29. *Stejskal E.O., Tanner J.E.* Spin diffusion measurements: spin echoes in the presence of a time-dependent field gradient // J. Chem. Phys. 1965. **42**, N 1. 288–292.
30. *Низматуллин Р.И.* Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.

Поступила в редакцию
27.04.2017

**Numerical Simulation of Nuclear Magnetic Resonance in Saturated Porous Media
with Consideration of Phase Motion**

К. Л. Клименок¹ and А. Ю. Демьянов²

¹ *Moscow Institute of Physics and Technology, Faculty of Control and Applied Mathematics; Institutskii pereulok 9, Dolgoprudny, Moscow Region, 141700, Russia; Graduate Student, e-mail: klimenok.kl@gmail.com*

² *Schlumberger Moscow Research Center; ulitsa Pudovkina 13, Moscow, 119285, Russia; Ph.D., Senior Scientist, e-mail: ademianov@slb.com*

Received April 27, 2017

Abstract: A method to perform the numerical simulation of Nuclear Magnetic Resonance (NMR) for porous media saturated with a multicomponent fluid with consideration of phase motion is proposed. This method is applied to numerical models of porous media whose fluid component distribution is determined by the direct hydrodynamic simulation using the density functional method. Numerical results for NMR signals obtained for various pulse sequences and their usage for the transport description of fluid in porous media are discussed. Flow propagators for various flows are calculated. The flow propagators and the results obtained during passive admixture simulation are compared.

Keywords: numerical simulation, nuclear magnetic resonance, nuclear magnetic relaxation, flow propagator, passive admixture transport.

References

1. C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance* (Springer, Heidelberg, 1990), Vol. 1.
2. A. Timur, "Pulsed Nuclear Magnetic Resonance Studies of Porosity, Movable Fluid, and Permeability of Sandstones," *J. Pet. Technol.* **21** (6), 775–786 (1969).
3. J. D. Loren, J. D. Robinson, "Relations between Pore Size Fluid and Matrix Properties, and NML Measurements," *Soc. Pet. Eng. J.* **10** (3), 268–278 (1970).
4. W. J. Looyestijn, "Wettability Index Determination from NMR Logs," *Soc. Petrophys. Well-Log Anal.* **49** (2), 130–145 (2008).
5. J. Kärger and W. Heink, "The Propagator Representation of Molecular Transport in Microporous Crystallites," *J. Magn. Reson.* **51** (1), 1–7 (1983).
6. L. Lebon, J. Leblond, J.-P. Hulin, et al., "Pulsed Field Gradient NMR Measurements of Probability Distribution of Displacement under Flow in Sphere Packings," *Magn. Reson. Imaging* **14** (7–8), 989–991 (1996).
7. K. J. Packer, S. Stapf, J. J. Tessier, and R. A. Damion, "The Characterisation of Fluid Transport in Porous Solids by Means of Pulsed Magnetic Field Gradient NMR," *Magn. Reson. Imaging* **16** (5–6), 463–469 (1998).
8. J. J. Tessier, K. J. Packer, J. F. Thovert, and P. M. Adler, "NMR Measurements and Numerical Simulation of Fluid Transport in Porous Solids," *AIChE J.* **43** (7), 1653–1661 (1997).
9. J. J. Tessier and K. J. Packer, "The Characterization of Multiphase Fluid Transport in a Porous Solid by Pulsed Gradient Stimulated Echo Nuclear Magnetic Resonance," *Phys. Fluids.* **10** (1), 75–85 (1998).
10. B. Bijeljic, A. Raeini, P. Mostaghimi, and M. J. Blunt, "Predictions of Non-Fickian Solute Transport in Different Classes of Porous Media Using Direct Simulation on Pore-Scale Images," *Phys. Rev. E* **87** (2013). doi: 10.1103/PhysRevE.87.013011
11. N. K. Karadimitriou, V. Joekar-Niasar, M. Babaei, and C. A. Shore, "Critical Role of the Immobile Zone in Non-Fickian Two-Phase Transport: A New Paradigm," *Environ. Sci. Technol.* **50** (8), 4384–4392 (2016).
12. Z. Zhang, D. L. Johnson, and L. M. Schwartz, "Simulating the Time-Dependent Diffusion Coefficient in Mixed-Pore-Size Materials," *Phys. Rev. E* **84** (2011). doi: 10.1103/PhysRevE.84.031129
13. J. Yang and E. S. Boek, "Pore Scale Simulation of Flow in Porous Media Using the Lattice-Boltzmann Method," in *Proc. SPE Annual Tech. Conf. and Exhibition, Denver, USA, October 30–November 2, 2011* (SPE Press, Richardson, 2011), pp. 1–13.
14. J. Yang, J. Crawshaw, and E. S. Boek, "Quantitative Determination of Molecular Propagator Distributions for Solute Transport in Homogeneous and Heterogeneous Porous Media Using Lattice Boltzmann Simulations," *Water Resour. Res.* **49** (12), 8531–8538 (2013).
15. E. S. Boek and M. Venturoli, "Lattice-Boltzmann Studies of Fluid Flow in Porous Media with Realistic Rock Geometries," *Comput. Math. Appl.* **59** (7), 2305–2314 (2010).
16. B. Manz, L. F. Gladden, and P. B. Warren, "Flow and Dispersion in Porous Media: Lattice-Boltzmann and NMR Studies," *AIChE J.* **45** (9), C. 1845–1854 (1999).

17. M. Ferrari, J-P. Mérel, S. Leclerc, et al., “Study of Dispersion by NMR: Comparison between NMR Measurements and Stochastic Simulation,” *Diffus. Fundam.* **18** (11), 1–4 (2013).
18. D. S. Grebenkov, “A Fast Random Walk Algorithm for Computing the Pulsed-Gradient Spin-Echo Signal in Multiscale Porous Media,” *J. Magn. Reson.* **208** (2), 243–255 (2011).
19. R. A. Damion, K. J. Packer, K. S. Sorbie, and S. R. McDougall, “Pore-Scale Network Modelling of Flow Propagators Derived from Pulsed Magnetic Field Gradient Spin Echo NMR Measurements in Porous Media,” *Chem. Eng. Sci.* **55** (24), 5981–5998 (2000).
20. W. Zhao, G. Picard, G. Leu, and P. M. Singer, “Characterization of Single-Phase Flow through Carbonate Rocks: Quantitative Comparison of NMR Flow Propagator Measurements with a Realistic Pore Network Model,” *Transp. Porous Media* **81** (2), 305–315 (2010).
21. F. Mees, R. Swennen, M. van Geet, and P. Jacobs, “Applications of X-Ray Computed Tomography in the Geosciences,” in *Applications of X-Ray Computed Tomography in the Geosciences* (Geological Society Press, London, 2003), Vol. 215, pp. 1-6.
22. A. Yu. Dem’yanov, O. Yu. Dinariev, and N. V. Evseev, *Foundations of the Density Functional Method in Hydrodynamics* (Fizmatlit, Moscow, 2009) [in Russian].
23. H. C. Torrey, “Bloch Equations with Diffusion Terms,” *Phys. Rev.* **104** (3), 563–565 (1956).
24. K. R. Brownstein and C. E. Tarr, “Importance of Classical Diffusion in NMR Studies of Water in Biological Cells,” *Phys. Rev. A* **19** (6), 2446–2453 (1979).
25. K. R. Brownstein and C. E. Tarr, “Spin-Lattice Relaxation in a System Governed by Diffusion,” *J. Magn. Reson.* **26** (1), 17–24 (1977).
26. R. W. MacCormack, “A Numerical Method for Solving the Equations of Compressible Viscous Flow,” *AIAA J.* **20** (9), 1275–1281 (1982).
27. S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow: Computational Methods in Mechanics and Thermal Science* (CRC Press, Boca Raton, 1980).
28. E. L. Hahn, “Spin Echoes,” *Phys. Rev.* **80** (4), 580–594 (1950).
29. E. O. Stejskal and J. E. Tanner, “Spin Diffusion Measurements: Spin Echoes in the Presence of a Time-Dependent Field Gradient,” *J. Chem. Phys.* **42** (1), 288–292 (1965).
30. R. I. Nigmatulin, *Foundations of Mechanics of Heterogeneous Media* (Nauka, Moscow, 1978) [in Russian].