

УДК 537.635

doi 10.26089/NumMet.v19r110

## ВЛИЯНИЕ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ НА ПОТОКОВЫЕ ПРОПАГАТОРЫ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

К. Л. Клименок<sup>1</sup>, А. Ю. Демьянов<sup>2</sup>, О. Ю. Динариев<sup>3</sup>

Статья посвящена развитию подхода, ранее предложенного авторами для численного моделирования ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в пористых средах с учетом движения фаз. Более детально рассмотрено влияние граничных условий на контакте “пористая среда–порода” и релаксационных процессов, протекающих в объеме флюида, на функцию потокового пропагатора. С использованием численного моделирования на примерах течений в модельных и реальных пористых средах показана значимость этих процессов. Сделан вывод о необходимости их учета в лабораторных экспериментах и представлена методика оценки влияния значения релаксационной активности поверхности пор на пропагатор.

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

**1. Введение.** Исследование процессов транспорта флюида в пористых средах имеет большое значение для различных областей научной сферы, таких как катализ, хроматография или петрофизические исследования. Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) является практически единственным способом получения наиболее полной и разносторонней информации о характере и структуре насыщения пористой среды [1, 2]. Среди обширных ресурсов ЯМР-релаксометрии выделим возможность получать данные о непосредственном смещении атомов флюида в образце [3–5], заложенную в механизме диффузионной релаксации. Ключевой характеристикой транспорта флюида является потоковый пропагатор, который представляет собой функцию плотности вероятности смещения от начального положения за исследуемый промежуток времени для всех частиц в образце. На его основе делаются выводы о характере поведения флюида в пористой среде и о геометрии самой среды. В работе [6], на наш взгляд наиболее значимой в области исследования транспорта, показано отличие диффузии от закона Фика внутри карбонатов, а также рассмотрен асимптотический режим поведения флюида для различных чисел Пекле. Выводы, полученные в упомянутом исследовании, подтверждены экспериментальными данными [6, 7] по изучению формы потокового пропагатора, однако остается нерассмотренным вопрос о влиянии на эту форму различных факторов, которые крайне сложно изменить в эксперименте, таких как, например, релаксационная активность поверхности пор (surface relaxivity) или продольная и поперечная релаксации. Кроме того, следует отметить, что этот вопрос не изучался в других работах по моделированию пропагатора [8–11].

Потоковый пропагатор, который по определению является функцией распределения плотности вероятности смещения молекул за некоторое время, может быть получен различными методами. Основным из них являются эксперименты по ЯМР-релаксометрии. В работе [1] показано, что потоковый пропагатор, рассчитанный на основании моделирования этого подхода, совпадал с пропагатором, рассчитанным на основе модели переноса пассивной примеси. С использованием предложенной численной модели представлен сравнительный анализ факторов, влияющих на структуру пропагатора, рассчитанного из моделирования ЯМР. Исследовано влияние релаксации в объеме и на поверхности, а также исследована зависимость отличия пропагаторов от распределения смещений пассивной примеси.

**2. Теоретическое обоснование наличия факторов, влияющих на потоковый пропагатор ЯМР.** Рассмотрим математическую модель поведения намагниченности в пористых средах. В качестве исходного уравнения решается обобщенное уравнение Блоха–Тори [12] для флюида в поровом простран-

<sup>1</sup> 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

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

<sup>3</sup> Московский научно-исследовательский центр Шлюмберже, ул. Пудовкина, д. 13, 119285, Москва; вед. науч. сотр. e-mail: odinariyev@slb.com

стве:

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

Здесь  $\mathbf{M}(\mathbf{r})$  — вектор намагниченности,  $g$  — гиромагнитное отношение,  $\mathbf{B}_0$  и  $d\mathbf{B}(\mathbf{r})$  — однородная и неоднородная составляющие индукции внешнего магнитного поля соответственно. Вектор  $\mathbf{n}_0 = \frac{\mathbf{B}_0}{|\mathbf{B}_0|}$  — нормированный вектор направления внешнего магнитного поля,  $\mathbf{M}_{\text{eq}}(\mathbf{r})$  — 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.

Рассмотрим область  $\Omega$ , где решается уравнение (1), более подробно. Ее схематичное изображение в двухмерном представлении демонстрирует рис. 1. Вся область разделена на поровое пространство  $\omega$  (незаштрихованная область) и породу (заштрихованная область). Сплошной линией обозначена внешняя граница области  $\partial\Omega$ , пунктирной — внутренняя граница порового пространства и породы  $\partial\omega$ . Вектор  $\mathbf{n}$  — это нормальный вектор к границе  $\partial\omega$ . Решение ищется только в области  $\omega$ . В качестве результата моделирования берутся суммарные проекции вектора намагниченности внутри выделенного объема  $V$ .

Внутренние граничные условия на контакте “флюид–порода” определяются через поверхностные продольную и поперечную релаксационные активности  $\rho_1$  и  $\rho_2$  [13, 14]:

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

Внешние граничные условия характеризуются нулевым значением намагниченности:  $\mathbf{M}|_{\partial\Omega} = \mathbf{0}$ .

В качестве начальных условий для решения уравнения (1) зафиксируем значение намагниченности во всем объеме порового пространства:  $\mathbf{M}(\mathbf{r}, 0) = \mathbf{M}_0$ .

Видно, что на решение задачи моделирования эволюции намагниченности влияют не только факторы, связанные со смещением флюида, но и с взаимодействием с внешним магнитным полем, а также релаксационные члены в объеме и на поверхности пористой среды. Можно показать, что в силу линейности уравнения (1) от его фундаментального решения можно отделить часть, связанную с влиянием внешнего поля. В тематической литературе такая процедура называется переходом во вращающуюся систему отсчета [2]. Кроме того, если представить исходный вектор намагниченности в виде  $\mathbf{M} = \mathbf{M}_{\parallel} + \mathbf{M}_{\perp}$ , где  $\mathbf{M}_{\parallel}$  — продольный вектор, направленный вдоль внешнего поля, а  $\mathbf{M}_{\perp}$  — поперечный вектор в плоскости, перпендикулярной ему, и рассматривать только поперечную составляющую, то ее релаксация тоже отделяется и не влияет на структуру пропагатора. Таким образом, если при численном моделировании использовать только те последовательности, которые работают с поперечной намагниченностью, то единственным фактором, влияющим на пропагатор, останется поперечная релаксационная активность, задаваемая внутренними граничными условиями (2).

Рассмотрим более подробно процесс обработки численных результатов, полученных в рамках рассмотренной модели. Для поиска одномерной функции пропагатора вдоль выделенного направления  $x$  на момент времени  $t$  необходимо провести серию экспериментов, в каждом из которых рассчитывается

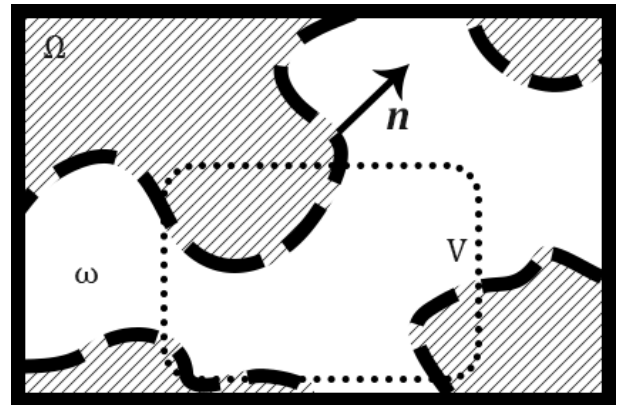


Рис. 1. Схематичный вид структуры области решения уравнения (1). Заштрихованные области соответствуют породе, пунктирная линия — границе порового пространства и породы, сплошная линия — внешней границе. Точками выделен объем  $V$

суммарная проекция поперечной намагниченности:

$$M_{i,\Sigma}(t) = \int_{x_l}^{x_r} M_i(x, t) dx. \quad (3)$$

В этом случае интегрирование ведется от левой до правой границы области  $V$  (индексы “ $l$ ” и “ $r$ ” соответственно). Здесь необходимо обратить внимание на буфер (зоны, примыкающие к левой и правой границам расчетной области, которые обеспечивают отсутствие влияния этих границ на форму пропагатора), который остается от вычитания области  $V$  из всей исследуемой области  $\Omega$ . Этот буфер становится необходимым и его размер будет иметь решающее значение для правильного расчета пропагатора. Влияние размера буфера можно обнаружить, предварительно обсудив структуру самого интеграла (3). Интегрирование ведется по всей такой проекции функции  $M_i(x, t)$ , которая не зависит от выбранного объема  $V$ , а эволюционирует во всей области  $\Omega$ . Таким образом, сказанное должно быть учтено при численном моделировании. Если выбрать буферы недостаточно большими, то часть информации не попадет в исследуемый объем и, как следствие, не будет учтена. Об учете этой особенности рассказано в следующем разделе.

**3. Модификация предложенного подхода для численного моделирования.** Напомним основные положения моделирования, детальный разбор и мотивация метода описаны в работе [1]. Для решения уравнений (1) используется конечно-разностная аппроксимация на ортогональной равномерной сетке, состоящей из  $N_x \times N_y \times N_z$  ячеек, в прямоугольном параллелепипеде с границей  $\Omega$ . Часть ячеек этой сетки являются порами (активными), а часть — породой (неактивными).

Значения скоростей  $\nu_{i,j,k} = \nu(x_i, y_j, z_k)$  рассчитываются методом функционала плотности [15] в центрах активных ячеек для несжимаемых жидкостей. Остальные параметры относятся к центрам ячеек. Для упрощения решения уравнений (1) используется процедура перехода во вращающуюся систему отсчета, которая описывалась выше, и рассматривается случай отсутствия неоднородностей внешнего поля. Для решения уравнений используется явный метод МакКормака, описанный в [16], шаг по времени определяется из условий устойчивости метода.

В учете граничных условий (2) используется идея, описанная в книге Патанкара [17], когда изменяются времена релаксации в ячейках, соседствующих со стенками, как представлено ниже:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_{1\text{bulk}}} + \rho_1 \frac{S}{V}, \quad \frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_{2\text{bulk}}} + \rho_2 \frac{S}{V}. \quad (4)$$

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

Для учета буфера используется моделирование переноса пассивной примеси [1]. Предварительно по методике пассивной примеси проводится расчет переноса примеси для слоев правой и левой границ всей модели, и их область влияния является буфером для итогового расчета при моделировании ЯМР.

**4. Результаты моделирования и обсуждение.** В этом разделе рассмотрено влияние поперечной компоненты релаксационной активности поверхности пор на потоковые пропагаторы в рамках численной модели. Эти результаты представляют интерес, так как вариация значения релаксационной активности в эксперименте крайне затруднительна, а при моделировании этот эффект легко учитывается.

В качестве результатов, подтверждающих тезис о влиянии релаксационных процессов на структуру пропагатора, проведены серии расчетов для течения Пуазеля в плоском канале, а также для реконструированной области образца реальной породы (по данным рентгеновской микротомографии). Использовалась последовательность импульсов  $90^\circ - \text{grad} - 180^\circ - \text{grad}$  для построения пропагатора только по данным о поперечной намагниченности (рис. 2). В каждой серии расчетов варьировалась релаксационная активность  $\rho_2$ . В качестве флюида проводилось моделирование воды с вязкостью  $\mu = 10^{-3}$  Па·с, коэффициентом самодиффузии  $D = 2.7 \times 10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с и временами продольной и поперечной релаксации  $T_1 = T_2 = 2.5$  с. Параметры последовательности:  $\tau = 5 \times 10^{-3}$  с,  $T = 100 \times 10^{-3}$  с.

Рассмотрим два различных случая течения Пуазеля в плоских каналах шириной  $d = 2 \times 10^{-4}$  м и  $d = 2 \times 10^{-5}$  м: случаи А и Б соответственно. Расчетная область длиной  $l = 5 \times 10^{-3}$  м состоит из кубических ячеек со стороной  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 10^{-6}$  м. Ячейки породы соответствуют стенкам канала. Таким образом, доля ячеек у стенки для рассматриваемых случаев равны 0.01 (случай А) и 0.1 (случай Б). Для случая А градиент давления составлял  $\Delta P/l = 200$  Па/м, для Б —  $\Delta P/l = 30\,000$  Па/м. Такие низкие значения градиента давления выбраны для демонстрации влияния поверхностной релаксации, когда пропагатор находится в зоне преимущественно положительных смещений. Диапазон изменения

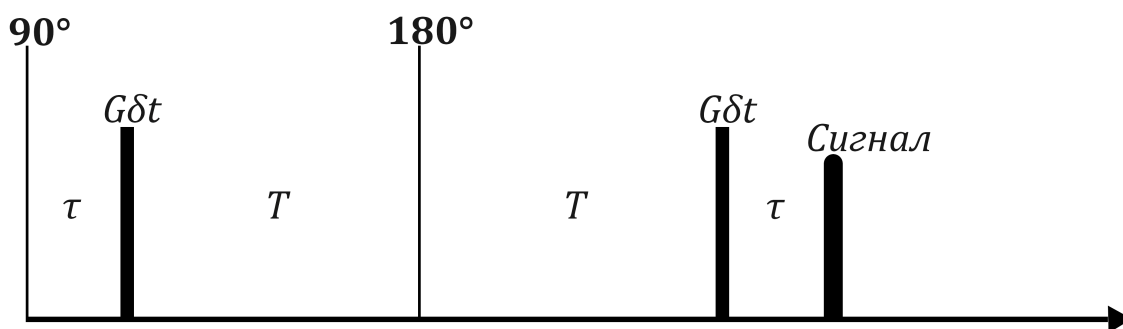


Рис. 2. Последовательность радиочастотных и градиентных импульсов, используемая в моделировании

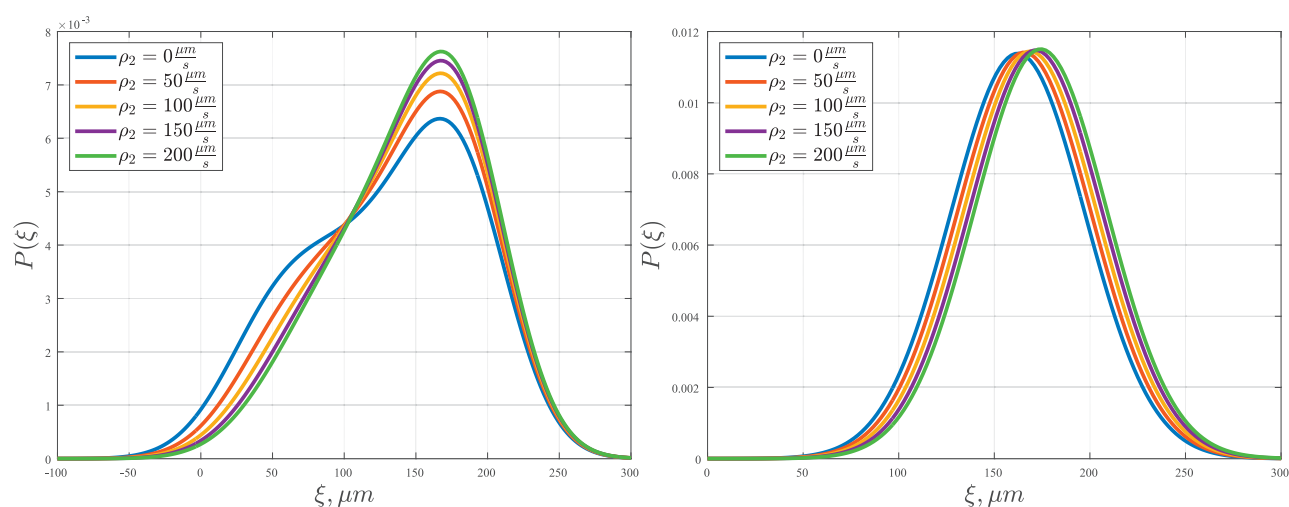


Рис. 3. Потокные пропагаторы для случаев течения Пуазеля в плоском канале (А — слева, Б — справа).

Различным цветом обозначены различные релаксационные активности поверхности пор, их значения представлены на легендах

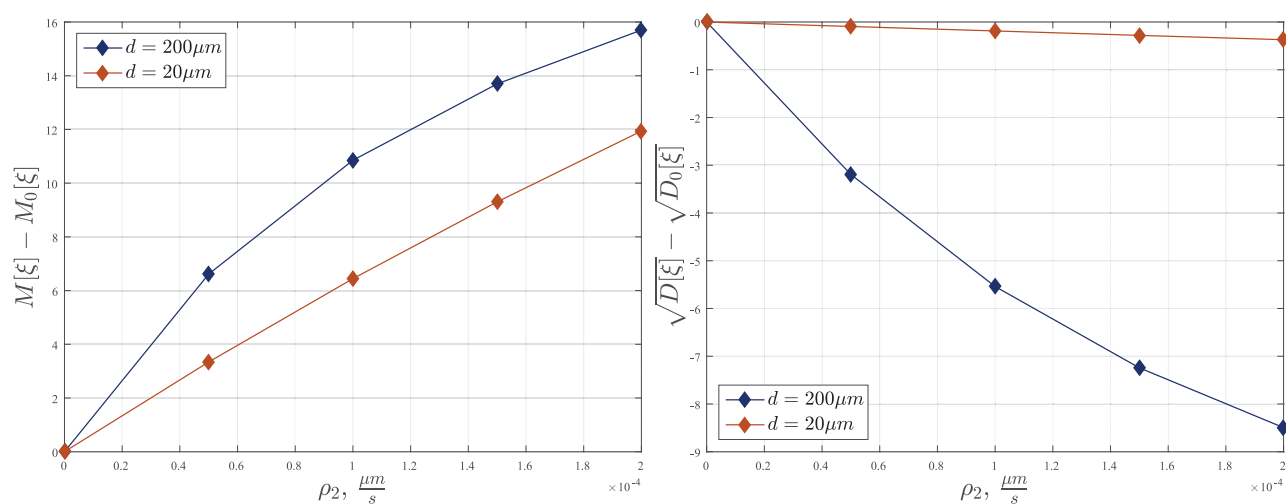


Рис. 4. Зависимость сдвига среднего значения  $M[\xi]$  (слева) и корня из дисперсии  $D[\xi]$  (справа) пропагаторов от коэффициента релаксационной активности поверхности пор для течения Пуазеля в плоском канале.

Случай А — синий, Б — оранжевый

релаксационной активности  $\rho_2$  составляет от 0 до  $2 \times 10^{-4}$  м/с. Верхняя граница диапазона специально выбрана выше экспериментальных [18], рассчитанных для реальных горных пород.

Для количественного описания влияния эффектов будем рассматривать пропагатор как функцию распределения плотности вероятности смещения молекул на определенное расстояние  $\xi$  от начального положения за время действия последовательности. Это распределение мы будем характеризовать средним значением  $M[\xi]$  и корнем из дисперсии  $\sqrt{D[\xi]}$ . Кроме того, следует отметить, что все пропагаторы нормированы одинаково.

Рассмотрим рис. 3, где представлены все пропагаторы для случаев А и Б. Как можно заметить, для случая А в отсутствии влияния поверхностной релаксации структура пропагатора отлична от обычного распределения Гаусса, а около нулевых смещений наблюдается перегиб, который возникает из-за отсутствия полного диффузионного перемешивания в поперечном направлении за время эволюции. При увеличении значения  $\rho_2$  этот перегиб уходит и пропагатор становится более симметричным. Одновременно происходит увеличение среднего смещения, а дисперсия, наоборот, уменьшается (рис. 4). В отличие от случая А, в случае Б, когда ширина канала мала, перемешивание за счет диффузии происходит поперек всего канала, и пропагатор почти не отличается от нормального распределения, смещенного на расстояние, равное произведению средней скорости и времени эволюции. Однако при увеличении значения  $\rho_2$  видно, как пропагатор смещается в сторону увеличения смещения с неизменной дисперсией, оставаясь тем же по форме. Объяснение этих эффектов кроется во влиянии поверхностной релаксации на значение поперечной намагниченности, соответствующее амплитуде результирующего сигнала. Поскольку релаксация на стенках происходит быстрее чем в объеме, вклад от флюида у стенок будет меньше, чем от его объемной части, а смещение у стенок меньше из-за того, что скорость жидкости на стенках равна нулю.



Рис. 5. Структуры порового пространства образцов породы ачимовского горизонта (случай В — слева) и образца Fontainebleau (случай Г — справа)

Теперь рассмотрим влияние поверхностной релаксации в моделях реальных образцов породы ачимовской толщи одного из месторождений Западно-Сибирской нефтегазоносной провинции (случай В) и образца крупнопористого песчаника Fontainebleau (случай Г). Реконструкции структуры порового пространства этих образцов представлены на рис. 5. Образец В имеет пористость, равную 10% (доля пристеночных ячеек 0.33), у образца Г пористость равна 13% (доля пристеночных ячеек 0.18). В обоих образцах использована расчетная кубическая сетка с шагом  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1.5 \times 10^{-6}$  м. Размер образцов составляет  $250 \times 150 \times 150$  ячеек; вдоль исследуемого (наиболее длинного) направления до и после образца добавлена буферная зона в 100 активных ячеек; таким образом, вся расчетная область составляет  $450 \times 150 \times 150$  ячеек. В обоих случаях перепад давления, приложенный вдоль исследуемого направления, равен 25 000 Па/м, что соответствует средней скорости потока  $2.6 \times 10^{-6}$  м/с в образце В и  $45.3 \times 10^{-6}$  м/с — в образце Г.

Из данных об образцах и течении флюида можно сделать вывод, что в образце В основной вклад в пропагатор будет вносить диффузия, ограниченная стенками порового пространства, а для образца Г — диффузии и конвективный перенос будут воздействовать в одинаковой мере. Это видно из рис. 6 для

случая нулевой релаксационной активности (темно-синяя линия): для случая В пропагатор симметричен относительно нулевого смещения, а для Г — нет. Теперь рассмотрим поведение пропагатора с увеличением значения  $\rho_2$  (использовано допущение об идентичности параметра в рамках исследованной геометрии пор). Здесь следует отметить, что влияние релаксационной активности поверхности пор проявляется уже на значениях, близких к экспериментальным [18]. Для случаев В и Г, так же как и для плоского канала различной ширины, рассмотрен сдвиг среднего значения и корня из дисперсии (рис. 7). Как можно заметить, для разных образцов влияние поверхности различно. Например, для образца породы ачимовского горизонта среднее значение смещения уменьшается, а дисперсия, наоборот, увеличивается. Для образца Fontainebleau среднее значение почти не меняется, равно как и дисперсия, но изменяется форма и положение максимума распределения.

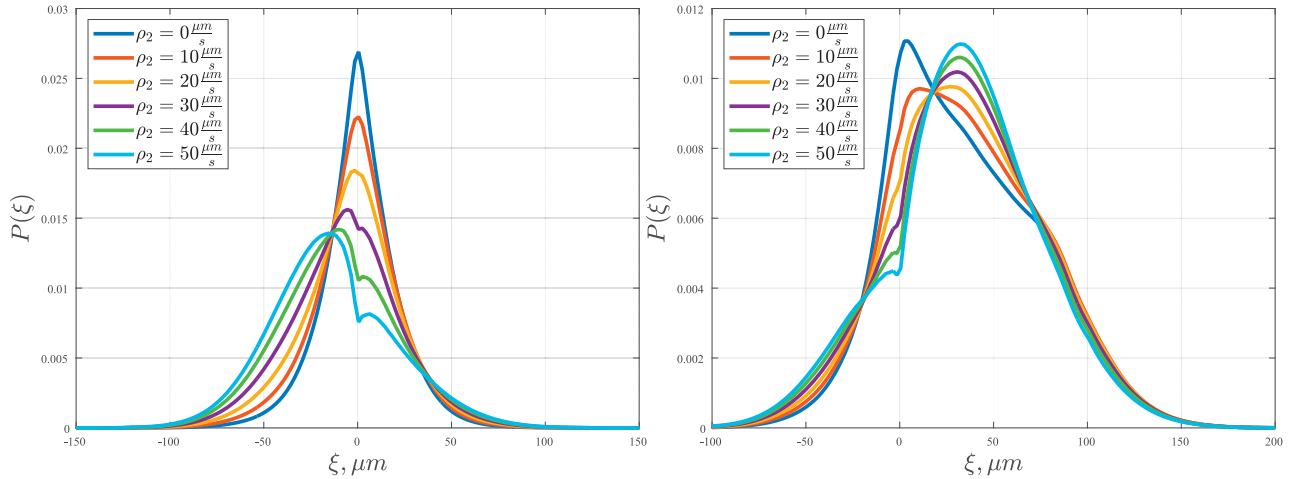


Рис. 6. Поточковые пропагаторы для случаев моделирования течения в реальных образцах пород (случай В — слева, случай Г — справа). Цвета соответствуют результатам расчета с различными значениями релаксационной активности  $\rho_2$ , их значения указаны на легендах

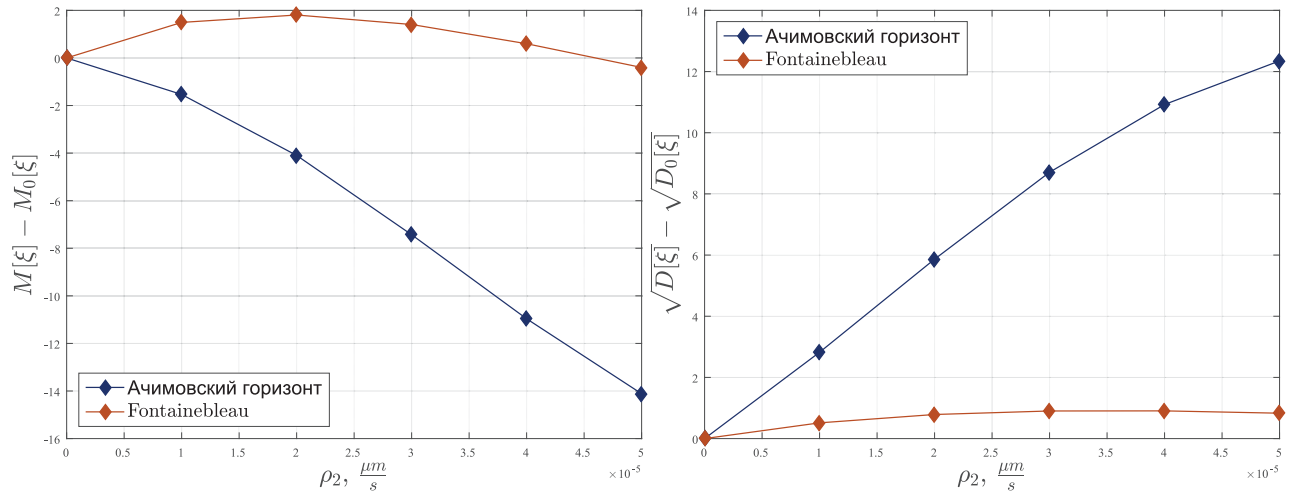


Рис. 7. Зависимость сдвига среднего значения  $M[\xi]$  (слева) и корня из дисперсии  $D[\xi]$  (справа) пропагаторов от коэффициента релаксационной активности поверхности пор для течения в реальных образцах пород.

Случай В — синий, Г — оранжевый

Кроме того, следует отметить общий эффект “провала” величины пропагатора около нулевого смещения. Появление “провала” объясняется аналогично случаям А и Б, однако здесь он выражен более явно, поскольку область нулевых смещений близка к центру распределения. Асимметрия для случая В при  $\rho_2 = (40 \div 50) \times 10^{-6}$  м/с объясняется неоднородностью образца вдоль направления течения на таких масштабах. Этот эффект возникает, если при течении флюид переходит из больших пор в меньшие, и на фоне влияния поверхностной релаксации такая асимметрия становится заметной.

Отметим, что степень влияния поверхностной релаксации на аналитический вид интегральной на-

магнитичности и, как следствие, на конечный результат, рассмотренная Броунштейном и Тарром [14], полностью согласуется с моделированием и объяснением результатов. Для этого используем введенную в [1] оценку для безразмерного параметра  $\rho a/D$ , где  $a$  — характерный размер поры, а  $\rho$  — коэффициент релаксационной активности поверхности пор. Последний характеризует режим релаксации как одно- или мультиэкспоненциальный (“быстрая” диффузия–слабая релаксация и “медленная” диффузия–сильная релаксация). Если этот параметр много меньше единицы, то релаксация отдельных спинов в поре усредняется за счет многократного соударения со стенками пор, весь объем перемешивается и релаксирует с единым характерным временем; если же  $\rho a/D$  порядка единицы или намного больше, то падение намагнитичности представляет собой сумму экспонент с различными временами, и вклад магнитных спинов у поверхности и в центральных областях пор можно разделить. В рассмотренных случаях для характерного размера пор  $20 \times 10^{-6}$  м, коэффициента релаксационной активности  $50 \times 10^{-6}$  м/с и коэффициента диффузии  $10^{-9}$  м<sup>2</sup>/с значение этого параметра оказывается порядка единицы, что подтверждает сложный характер полученных распределений с принципиально иной точки зрения.

**5. Выводы.** В настоящей статье показано, что коэффициент релаксационной активности поверхности пор влияет на структуру пропагатора. Рассмотрен широкий диапазон возможных эффектов, таких как смещение пропагатора или изменение его формы, и детально рассмотрены полученные результаты. Предложено физическое объяснение влияния поверхностной релаксационной активности и указана согласованность с фундаментальными работами ЯМР.

Авторы выражают искреннюю благодарность Денисенко А.С. и Довгилевичу Л.Е. за продуктивное обсуждение и полезные замечания, возникавшие в ходе выполнения и оформления работы. Авторы также благодарят Московский научно-исследовательский центр Шлюмберже за поддержку и разрешение опубликовать результаты работы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Клименок К.Л., Демьянов А.Ю. Численное моделирование сигнала ядерного магнитного резонанса в насыщенных пористых средах с учетом движения фаз // Вычислительные методы и программирование. 2017. **18**. 192–203.
2. Slichter C.P. Principles of magnetic resonance. Heidelberg: Springer, 1990.
3. Lehoux A.P., et al. Magnetic resonance imaging measurements evidence weak dispersion in homogeneous porous media // Phys. Rev. E. 2016. **94**, N 5. doi 10.1103/PhysRevE.94.053107.
4. 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.
5. 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.
6. Scheven U.M., et al. Quantitative nuclear magnetic resonance measurements of preasymptotic dispersion in flow through porous media // Phys. Fluids. 2005. **17**. doi 10.1063/1.2131871
7. Mitchell J., et al. Determining NMR flow propagator moments in porous rocks without the influence of relaxation // J. Magn. Reson. 2008. **193**, N 2. 218–225.
8. 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.
9. Yang J., Boek E.S. Pore scale simulation of flow in porous media using the lattice-Boltzmann method // Proc. SPE Annual Technical Conference and Exhibition. Richardson: SPE Press, 2011. 1–13
10. Grebenkov D.S. A fast random walk algorithm for computing the pulsed-gradient spin-echo signal in multiscale porous media // J. Magn. Reson. 2011. **208**, N 2. 243–255.
11. Ferrari M., et al. Study of dispersion by NMR: comparison between NMR measurements and stochastic simulation // Diffus. Fundam. 2013. **18**, N 11. 1–4.
12. Torrey H.C. Bloch equations with diffusion terms // Phys. Rev. 1956. **104**, N 3. 563–565.
13. Brownstein K.R., Tarr C.E. Spin-lattice relaxation in a system governed by diffusion // J. Magn. Reson. 1977. **26**, N 1. 17–24.
14. 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.
15. Демьянов А.Ю., Динариев О.Ю., Евсеев Н.В. Основы метода функционала плотности в гидродинамике. М.: Физматлит, 2009.
16. MacCormack R.W. A numerical method for solving the equations of compressible viscous flow // AIAA J. 1982. **20**, N 9. 1275–1281.
17. Patankar S.V. Numerical heat transfer and fluid flow: computational methods in mechanics and thermal science. Boca Raton: CRC Press, 1980.



18. Перепухов А.М., Кишенков О.В., Гуденко С.В., Максимычев А.В. Исследование порового пространства силикатов и протонной релаксации флюида магнитно-резонансными методами // Труды МФТИ. 2013. **5**, № 3. 154–163.

Поступила в редакцию  
09.01.2018

## Surface Relaxation Effect on Nuclear Magnetic Resonance Flow Propagators

K. L. Klimenok<sup>1</sup>, A. Yu. Demianov<sup>2</sup>, and O. Yu. Dinariev<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *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*

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

<sup>3</sup> *Schlumberger Moscow Research Center; ulitsa Pudovkina 13, Moscow, 119285, Russia; Ph.D., Leading Scientist, e-mail: odinariev@slb.com*

Received January 9, 2018

**Abstract:** This paper is devoted to the development of the approach proposed earlier by the authors to the numerical simulation of nuclear magnetic resonance flow propagators in porous media. The agreement between the flow propagator and the admixture relative dispersion is discussed in detail and a theoretical conclusion on this fact is given. The conditions under which this conclusion is valid are also discussed. It is shown that the laboratory experiments do not take into account them because of relaxation processes in fluids. The influence of these processes is shown by numerical simulation. A method for the surface relaxivity effect estimation is developed.

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

## References

1. K. L. Klimenok and A. Yu. Demianov, "Numerical Simulation of Nuclear Magnetic Resonance in Saturated Porous Media with Consideration of Phase Motion," *Vychisl. Metody Programm.* **18**, 192–203 (2017).
2. C. P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance* (Springer, Heidelberg, 1990), Vol. 1.
3. A. P. Lehoux, S. Rodts, P. Faure, et al., "Magnetic Resonance Imaging Measurements Evidence Weak Dispersion in Homogeneous Porous Media," *Phys. Rev. E* **94** (2016). doi 10.1103/PhysRevE.94.053107
4. 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).
5. 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).
6. U. M. Scheven, D. Verganelakis, R. Harris, et al., "Quantitative Nuclear Magnetic Resonance Measurements of Preasymptotic Dispersion in Flow through Porous Media," *Phys. Fluids* **17** (2005). doi 10.1063/1.2131871
7. J. Mitchell, D. A. Graf von der Schulenburg, D. J. Holland, et al., "Determining NMR Flow Propagator Moments in Porous Rocks without the Influence of Relaxation," *J. Magn. Reson.* **193** (2), 218–225 (2008).
8. 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).
9. 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.
10. 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).



11. 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).
12. H. C. Torrey, “Bloch Equations with Diffusion Terms,” *Phys. Rev.* **104** (3), 563–565 (1956).
13. K. R. Brownstein and C. E. Tarr, “Spin-Lattice Relaxation in a System Governed by Diffusion,” *J. Magn. Reson.* **26** (1), 17–24 (1977).
14. 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).
15. A. Yu. Dem’yanov, O. Yu. Dinariev, and N. V. Evseev, *Foundations of the Density Functional Method in Hydrodynamics* (Fizmatlit, Moscow, 2009) [in Russian].
16. R. W. MacCormack, “A Numerical Method for Solving the Equations of Compressible Viscous Flow,” *AIAA J.* **20** (9), 1275–1281 (1982).
17. S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow: Computational Methods in Mechanics and Thermal Science* (CRC Press, Boca Raton, 1980).
18. A. M. Perepukhov, O. V. Kishenkov, S. V. Gudenko, et al., “NMR Studies of Pore Space in Silicates and  $^1\text{H}$  Relaxation of Liquids in Porous Media,” *Trudy Mosk. Inst. Phiz. Tekhnol.* **5** (3), 154–163 (2013).