

(19)



**Евразийское
патентное
ведомство**

(21) **202290038** (13) **A1**

(12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ЕВРАЗИЙСКОЙ ЗАЯВКЕ

(43) Дата публикации заявки
2022.04.29

(51) Int. Cl. **G06F 19/00** (2011.01)
G01N 33/24 (2006.01)

(22) Дата подачи заявки
2015.12.03

(54) РАСЧЕТ УДЕЛЬНОЙ ПРОВОДИМОСТИ НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

(31) **14/566,520**

(32) **2014.12.10**

(33) **US**

(62) **201791282; 2015.12.03**

(71) Заявитель:
**БИПИ КОРПОРЕЙШН НОРД
АМЕРИКА ИНК. (US)**

(72) Изобретатель:

**Сиган Рэндалл, Фридрих Джоанн,
Грейтхаус Джеффри, Жерольд Гэри
Рассел (US)**

(74) Представитель:

**Гизатуллина Е.М., Гизатуллин Ш.Ф.,
Костюшенкова М.Ю., Пармонова
К.В., Джермакян Р.В., Прищепный
С.В., Христофоров А.А., Угрюмов
В.М., Строкова О.В. (RU)**

(57) Способы и системы для оценки удельной проводимости систем глинистых минералов и для применения результатов оценки в масштабном анализе. Удельную проводимость глины можно оценить, построив молекулярную модель безводной глины с нейтральным зарядом, а затем определив плотность заряда посредством замены ионов в модели глинистой структуры. Противоионы вводят для обеспечения нейтральности зарядов, а молекулы воды добавляют в модель для достижения выбранного уровня гидратации. После назначения коэффициентов силового поля выполняют моделирование методом молекулярной динамики для получения данных, на основании которых можно оценить коэффициенты диффузии. Использование соотношения Нернста-Эйнштейна с коэффициентами диффузии противоионов позволяет узнать ионную проводимость системы глины. Эту удельную проводимость можно использовать для получения пластового коэффициента и использовать в анализе прямым численным моделированием.

A1

202290038

202290038

A1

РАСЧЕТ УДЕЛЬНОЙ ПРОВОДИМОСТИ НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

Перекрестные ссылки на родственные заявки

[0001] Согласно настоящей заявке испрашивается приоритет в соответствии с заявкой на выдачу патента США № 14/566 520, поданной 10 декабря 2014 г. под названием «Estimation of Conductivity for Nanoporous Materials», которая включена в настоящий документ во всей полноте посредством ссылки.

ЗАЯВЛЕНИЕ КАСАТЕЛЬНО ФИНАНСИРУЕМЫХ ИЗ ФЕДЕРАЛЬНОГО БЮДЖЕТА ИССЛЕДОВАНИЙ И РАЗРАБОТОК

[0002] В соответствии с договором № DE-AC04-94AL85000, заключенным между Министерством энергетики США и корпорацией Sandia Corporation, правительство Соединенных Штатов Америки имеет права на это изобретение для работы Сандийских национальных лабораторий.

Предпосылки к созданию настоящего изобретения

[0003] Настоящее изобретение относится к анализу образцов горных пород для определения петрофизических свойств.

[0004] Основополагающим принципом в нефтегазовой области является знание свойств материалов пластов подземной породы, это важно для оценки коллекторов углеводородов в толще земли и для формулирования стратегии разработки таких коллекторов. В области техники, к которой относится настоящее изобретение, хорошо известны разнообразные приборы и методики получения такой информации, которые включают анализ сейсмических данных, получение образцов керна из изучаемых пластов и их анализ, а также различные косвенные измерения земли, получаемые во время процесса бурения.

[0005] Наиболее распространенным способом анализа подземного пласта является каротаж по методу сопротивления вдоль ствола скважины в пласте. Согласно традиционному каротажу по методу сопротивления измеряют электрический отклик пласта, расположенного вокруг ствола скважины, как правило, для получения значения, называемого пластовым коэффициентом, который представляет собой отношение удельного сопротивления насыщенной жидкостью породы к удельному сопротивлению

самой насыщающей жидкости. Согласно соотношению Арчи пластовый коэффициент зависит только от геометрии порового пространства породы, и с пористостью его можно увязать, используя показатель, называемый показателем цементации. Как следствие, анализируя традиционную диаграмму каротажа по методу сопротивления, можно получить важную информацию о пористости или водонасыщенности изучаемого пласта. Более того, на основании диаграммы каротажа по методу сопротивления в сочетании с правильной расшифровкой физических свойств породы можно получить подробную информацию о проницаемости пласта.

[0006] Несмотря на то, что соотношение Арчи широко используется для толкования электрического отклика на основании информации из диаграмм каротажа и образцов керна, изначально оно было составлено для ряда экспериментальных измерений. Однако было отмечено, что соотношение Арчи справедливо только для пластов породы с простыми петрофизическими свойствами, например, чистого песка. Также было отмечено, что соотношение Арчи не подходит для глинистого песка, а именно песка, содержащего глинистые минералы. Традиционный подход анализа диаграмм каротажа по методу сопротивления, полученных для глинистого песка, называется в области техники настоящего изобретения методом Уаксмана-Смита. Однако на практике такой подход несколько ограничен, поскольку для того, чтобы увязать удельное сопротивление с водонасыщенностью и пористостью, необходимо знать катионообменную емкость глинистого минерала в глинистом песке.

[0007] Было отмечено, что присутствие глины в образце горной породы усложняет расшифровку данных электроразведки, полученных из диаграмм каротажа и образцов керна. Одной из причин этого является то, что электрические свойства глинистых минералов (далее — «глины») мало понятны. В связи с этим расшифровка электрических свойств глин (а также связанных свойств, таких как катионообменная емкость), измеренных в лабораторных условиях, затруднена. Также расшифровка данных электроразведки в глинах усложняется из-за наноразмерности структуры обычных глин, которая значительно меньше наноразмерности структуры песка, за счет чего глины меньше поддаются экспериментам и анализу с атомным разрешением. Более того, кристаллическая структура глинистых минералов часто довольно неоднородная, например, состоит из тонких пластинок, расположенных не параллельно друг другу, с причудливыми границами и порами необычной формы. Кроме того, в глинах часто присутствуют примеси, в частности на внешних поверхностях пластинок, и они смещают другие атомы, замещая их, и изменяют распределение зарядов в

глинистом материале. В целом, такие сложности, обусловленные наноразмером кристаллов, неупорядоченным расположением кристаллов и пластинок, а также сложный состав глинистых минералов крайне усложняют прямое измерение петрофизических свойств глин.

[0008] С недавних пор для определения свойств материала образцов горной породы применяется технология прямого численного моделирования свойств материала на основании цифровых изображений породы. В соответствии с этим подходом для получения объемного цифрового изображения, описывающего образец горной породы, получают рентгеновское томографическое изображение этого образца. Затем над объемным цифровым изображением проводят вычислительный эксперимент для моделирования физических механизмов, на основании которых можно измерить физические свойства горной породы. С помощью метода прямого численного моделирования можно определить такие свойства горной породы, как пористость, абсолютная проницаемость, относительная проницаемость, пластовый коэффициент, модули упругости и т. п.

[0009] В частности, прямое численное моделирование электрических свойств на основании цифровых изображений породы осуществляется посредством аппроксимации или решения соответствующих электрических уравнений, например уравнения Лапласа, с переменными коэффициентами и соответствующими граничными условиями. Однако такой подход предполагает, что электрические свойства составляющих материалов в породе известны. Например, твердые зерна (например, кварц) можно рассматривать в модели как непроводящие, глинистые фракции — как частично проводящие, а поровые жидкости, такие как соленая вода, — как наиболее проводящую фазу. Несмотря на то, что такое распределение проводящих свойств хорошо известно для твердых зерен и поровых жидкостей, физическая основа для такого распределения проводящих свойств среди глин принята не была. Таким образом, использование заданных величин для удельной проводимости глины приводит к появлению неопределенностей в обычном моделировании электрического отклика в глиноносных песках.

[0010] Еще одной предпосылкой можно назвать моделирование методом молекулярной динамики («МД»), под которым подразумевается вычислительный метод описания изменения с течением времени конечной молекулярной или атомной системы, основанный на приближенном выражении (т. е. на силовом поле), определяющем потенциальную энергию каждого атома в системе. Согласно

традиционному моделированию методом МД данные, такие как координаты, скорости и силы, для каждого атома в силовом поле сохраняются через определенные промежутки времени. Затем эти данные используются для вычисления мгновенных и усредненных по времени свойств, таких как траектории атомов и молекул, профили атомной или молекулярной плотности в одном или двух измерениях, межатомная структура (например, радиальная функция распределения), коэффициенты диффузии, колебательная структура и т. п.

Краткое раскрытие настоящего изобретения

[0011] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения предоставляется способ и система точной оценки электрического отклика глинистых минералов и песков, содержащих глинистые минералы.

[0012] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения предоставляется способ и система для измерения методом прямого численного моделирования петрофизических свойств образца подземного пласта, содержащего глинистые минералы.

[0013] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения предоставляется способ и система для применения измерений, например измерений прямым численным моделированием, электрического отклика наноразмерного материала, такого как глинистый минерал или пески, содержащие глинистые минералы, для более масштабного определения характеристик пласта.

[0014] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения предоставляется способ и система для оценки пластового коэффициента составных пластов, содержащих наноразмерные компоненты, такие как глины.

[0015] Другие цели и преимущества вариантов осуществления настоящего изобретения станут понятными специалистам в области техники настоящего изобретения после ознакомления с подробным раскрытием и прилагаемыми фигурами.

[0016] Варианты осуществления настоящего изобретения могут быть реализованы способом моделирования электрического отклика компонента глинистого минерала и системой для осуществления такого моделирования. Модель молекулярной глинистой системы выполнена в виде многослойной структуры, соответствующей глинистому минералу, аналогичному изучаемой глине, в которой поливалентные катионы выбранного вида вставлены в структуру при выбранной плотности заряда, а

несколько водоносных слоев вставлены в межслойное пространство между слоями в структуре в соответствии с выбранной водонасыщенностью. Сконструированной модели глины назначают параметры силового поля, характеризующие межатомные силы и переменные моделирования, соответствующие требуемым условиям моделирования, таким как давление, температура, объем и т. п. Затем для определения коэффициентов диффузии межслойных ионов в системе глины выполняют моделирование методом молекулярной динамики. После чего применяют соотношение Нернста-Эйнштейна, которое позволяет оценить ионную проводимость глины.

[0017] В соответствии с другими вариантами осуществления настоящего изобретения предоставляется способ и соответствующая система для выполнения прямого численного моделирования горной породы, в которой содержатся глинистые фракции. Посредством рентгеновской томографии получают трехмерное (3D) объемное изображение образца горной породы, после чего объемное изображение сегментируют для различения фаз непроводящих фракций горной породы (например, кварца), частично проводящих фракций (например, глины) и порового пространства. Каждой сегментированной фазе присваивают проводящие свойства и выполняют числовое моделирование для оценки электрического отклика объема. Из смоделированного отклика оценивают одно или несколько электрических свойств соответствующего образца глиноносной горной породы.

[0018] В соответствии с другими вариантами осуществления настоящего изобретения строят модель молекулярной жидкостной системы и заполняют ее водой при требуемой плотности, где выбранные противоионы размещены в структуре модели в порядке внедрения с требуемой концентрацией заряда. Для модели назначают коэффициенты силового поля и выполняют моделирование методом молекулярной динамики для определения объемной удельной проводимости жидкости в качестве контрольной модели. Затем на основании отношения объемной удельной проводимости контрольной жидкостной модели к смоделированным ионным проводимостям системы глины вычисляют пластовый коэффициент глиноносного материала.

Краткое описание фигур

[0019] На фиг. 1 схематически показана электрическая схема сетевой компьютерной системы, запрограммированной на выполнение различных процессов создания моделей и моделирования нефтегазовых коллекторов в соответствии с

вариантами осуществления настоящего изобретения.

[0020] На фиг. 2 также показана блок-схема процесса оценки ионной проводимости системы глинистых минералов в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения.

[0021] На фиг. 3 показана блок-схема построения молекулярной модели системы глинистых минералов в соответствии с процессом, показанным на фиг. 2, в соответствии с одним вариантом осуществления настоящего изобретения.

[0022] На фиг. 4a–4g показаны схематические диаграммы молекулярных моделей систем глинистых минералов на различных стадиях процесса согласно фиг. 3.

[0023] На фиг. 5 показана блок-схема процесса оценки пластового коэффициента системы глинистых минералов в соответствии с одним вариантом осуществления настоящего изобретения.

[0024] На фиг. 6a–6b показано рентгеновское микротомографическое изображение и сегментированное представление, соответственно, образца составного пласта, содержащего глинистый компонент, для проведения анализа в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения.

[0025] На фиг. 6c показан график пластового коэффициента для трех разных глиноносных песков, составленный методом прямого численного моделирования в соответствии с одним вариантом осуществления настоящего изобретения.

[0026] На фиг. 7 показана блок-схема процесса выполнения прямого численного моделирования для образца составного пласта такого, как показан на фиг. 6a и 6b, для применения совместно с диаграммами каротажа по методу сопротивления и измерениями в соответствии с одним вариантом осуществления настоящего изобретения.

Подробное раскрытие настоящего изобретения

[0027] Далее настоящее изобретение будет описано со ссылками на варианты его осуществления, а именно способ и систему построения моделей глинистых минералов, в частности, для применения в контексте прямого численного моделирования, поскольку предполагается, что настоящее изобретение будет особенно эффективным в этой области применения. Однако предполагается, что варианты осуществления настоящего изобретения могут обеспечить значительные благоприятные эффекты и преимущества в широком диапазоне областей помимо той,

которая описана в настоящем документе. Соответственно следует понимать, что нижеследующее раскрытие приведено исключительно в качестве примера и не ограничивает истинный объем заявленного изобретения.

[0028] В течение последних лет пласты глины и глинистого сланца заняли весомую часть в разработке и добыче нефти и газа. Было отмечено, что некоторые из таких глин содержат примеси замещения, такие как атомы алюминия, замещающие атомы кремния в кристаллической структуре, или атомы магния или железа, замещающие атомы алюминия в кристаллической структуре. Такие катионные примеси меняют зарядовое равновесие кристаллической структуры глины таким образом, что для сохранения нейтральности зарядов необходимы адсорбированные внеклеточные ионы. Такие адсорбированные внеклеточные ионы присутствуют на внешних поверхностях глины и сами по себе не являются частью глинистой структуры.

[0029] Как было описано выше, диаграммы каротажа по методу сопротивления дают важную информацию о количестве жидкости, объеме жидкости и поровой структуре подземных пластов. Однако присутствие глинистых компонентов в пласте негативно сказывается на отношении между изучаемым удельным сопротивлением и физическими свойствами, поскольку и эмпирические, и физические аппроксимации характеристик глины имеют значительные неопределенности. Таким образом существует необходимость в более точном понимании физических механизмов, задействованных в изменении удельной проводимости глинистых минералов.

[0030] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения предоставляются инструменты и методики получения более точного понимания физических механизмов, от которых зависят свойства глинистых минералов в подземных пластах. Более того, как будет описано ниже, эти инструменты и методики дают возможность проводить более масштабный анализ глиноносных пластов более эффективным и точным способом.

Автоматизированная система

[0031] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения предполагается, что эти инструменты и методики будут реализованы, по меньшей мере частично, автоматизированной системой, которая будет учитывать характер и масштаб требуемых вычислений. На фиг. 1 показан пример реализации одного варианта осуществления настоящего изобретения в форме автоматизированной системы 20, выполняющей операции, описанные в настоящем раскрытии, для эффективного моделирования свойств глинистого минерала, в частности, с целью оценки удельной

проводимости одной или нескольких глин, а в соответствии с некоторыми вариантами осуществления для оценки удельной проводимости и других петрофизических свойств образца горной породы, содержащей глинистый компонент, посредством прямого численного моделирования. В соответствии с этим примером система 20 может быть реализована посредством компьютерной системы, в состав которой входит рабочая станция 21, соединенная с сервером 30 по сети. Безусловно, характерная архитектура и конструкция компьютерной системы, применяемой в контексте настоящего изобретения, может существенно отличаться. Например, система 20 может быть реализована одним физическим компьютером, таким как традиционная рабочая станция или персональный компьютер, или альтернативно компьютерной системой, реализованной посредством распределения по нескольким физическим компьютерам. Соответственно обобщенная архитектура, показанная на фиг. 1, показана исключительно в качестве примера.

[0032] Как показано на фиг. 1, а также как было указано выше, система 20 содержит рабочую станцию 21 и сервер 30. Рабочая станция 21 содержит центральный процессор 25, который подключен к системной шине BUS. Также к системной шине BUS подключен интерфейс 22 ввода-вывода, который относится к тем интерфейсным ресурсам, посредством которых периферийные функциональные элементы ввода-вывода (например, клавиатура, мышь, дисплей и т. д.) взаимодействуют с другими компонентами рабочей станции 21. Центральный процессор 25 может обрабатывать данные для рабочей станции 21 и, таким образом, может быть реализован одним или несколькими ядрами ЦП, схемой совместной обработки и т. п. Специфичная конструкция и возможность центрального процессора 25 выбрана согласно рабочим требованиям рабочей станции 21, которые включают, по меньшей мере, выполнение функций, описанных в настоящем раскрытии, а также других функций, которые могут быть выполнены системой 20. В архитектуре системы 20 согласно этому примеру системная память 24 соединена с системной шиной BUS и предоставляет ресурсы памяти требуемого типа, используемые как память данных для хранения входящих данных и результатов обработки, выполняемой центральным процессором 25, а также как программная память для хранения машинных команд, выполняемых центральным процессором 25 во время выполнения таких функций. Безусловно, такая компоновка памяти приведена только в качестве примера; следует понимать, что системная память 24 может реализовывать такую память данных и программную память в отдельных ресурсах физической памяти или может быть распределена целиком или частично за

пределами рабочей станции 21. Более того, как показано на фиг. 1, также рабочая станция 21 может получать от системы 28 формирования изображений через интерфейс 22 ввода-вывода данные в форме объемного цифрового изображения образца 28 горной породы, полученные от датчиков и преобразователей, развернутых в скважинах на территории месторождения. Такие входные данные измерений могут храниться в ресурсе памяти, к которому рабочая станция 21 может получать доступ либо локально, либо через сетевой интерфейс 26.

[0033] Сетевой интерфейс 26 рабочей станции 21 представляет собой традиционный интерфейс или адаптер, с помощью которого рабочая станция 21 получает доступ к сетевым ресурсам по сети. Как показано на фиг. 1, сетевые ресурсы, к которым рабочая станция 21 получает доступ через сетевой интерфейс 26, включают сервер 30, расположенный в локальной сети или в глобальной сети, такой как интрасеть, виртуальная частная сеть, или в Интернете, и к которому рабочая станция 21 получает доступ через одну из таких сетевых компоновок и соответствующие проводные или беспроводные (или и то и другое) средства связи. В соответствии с этим вариантом осуществления сервер 30 представляет собой компьютерную систему традиционной архитектуры, аналогичной в общем смысле архитектуре рабочей станции 21, и, таким образом, содержит один или несколько центральных процессоров, системных шин, ресурсов памяти, функциональных элементов сетевого интерфейса и т. п. В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения сервер 30 соединен с программной памятью 34, которая представляет собой машиночитаемый носитель, на котором хранятся выполняемые компьютером программные команды, в соответствии с которыми система 20 анализа выполняет операции, описанные в настоящем раскрытии. В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения эти компьютерные программные команды выполняются сервером 30, например, в форме интерактивного приложения после ввода данных, переданных от рабочей станции 21, для создания выходных данных и результатов, передаваемых на рабочую станцию 21 для отображения или вывода посредством периферийных устройств ввода-вывода в форме, удобной для пользователя рабочей станции 21. Более того, сервер 30 (и, возможно, рабочая станция 21 по локальной или глобальной сети) имеет доступ к библиотеке 32, в которой хранится архивная или справочная информация, которая может понадобиться системе 20. Библиотека 32 может находиться в другой локальной сети, или альтернативно к ней можно получать доступ через Интернет или другую глобальную сеть. Предполагается, что доступ к библиотеке

32 также могут получать другие связанные компьютеры в общей сети.

[0034] Безусловно, специфичный ресурс памяти или расположение, в котором физически находятся результаты измерений, библиотека 32 и программная память 34, могут быть реализованы в различных местоположениях, к которым у системы 20 есть доступ. Например, такие данные и программные команды могут храниться в локальных ресурсах памяти на рабочей станции 21, сервере 30 или в доступных по сети для этих функций ресурсах памяти. Более того, как известно в уровне техники, все эти данные и ресурсы программной памяти сами по себе могут быть распределены во множестве местоположений. Предполагается, что специалисты в области техники настоящего изобретения без труда смогут реализовать хранение и извлечение применимых результатов измерений, моделей и другой информации, используемой в контексте этого варианта осуществления настоящего изобретения, подходящим образом для каждого конкретного применения.

[0035] В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения в качестве примера в системной памяти 24 и в программной памяти 34 хранятся машинные команды, выполняемые центральным процессором 25 и сервером 30, соответственно, для выполнения функций, описанных в настоящем раскрытии. Эти машинные команды могут быть представлены в форме одной или нескольких выполняемых программ или в форме исходного кода или высокоуровневого кода, из которых получены, собраны, интерпретированы или скомпилированы одна или несколько выполняемых программ. Можно использовать любой из нескольких машинных языков или протоколов в зависимости от того, каким образом должны выполняться требуемые операции. Например, эти машинные команды для создания модели в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения могут быть записаны на традиционном высокоуровневом языке, таком как JAVA, FORTRAN или C++, или как традиционная линейная компьютерная программа, или могут быть предназначены для выполнения объектно-ориентированным методом. Эти команды также могут быть воплощены в высокоуровневом приложении. Более конкретно, предполагается, что моделирование свойств подземного объема может быть частично выполнено средствами компьютерного программного приложения или пакета для моделирования, такого как пакет компьютерных программ молекулярной динамики «Масштабный атомный/молекулярный массивно-параллельный симулятор» (LAMMPS) компании «Сандийские национальные лаборатории», используя для этого обобщенную модель силового поля, подходящую для молекулярного моделирования, примером

которого является модель CLAYFF, описанная в документе под авторством Cygan et al., «Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field», J. Phys. Chem. B, Vol. 108 (2004), стр. 1255–1266, включенном в настоящий документ посредством ссылки. В любом случае предполагается, что специалисты в области техники настоящего изобретения, прочтя настоящее раскрытие, смогут без труда и без ненужных экспериментов реализовать этот вариант осуществления настоящего изобретения должным образом для требуемых установок. Такие выполняемые компьютерные программы для выполнения вариантов осуществления настоящего изобретения могут быть установлены в системе 20 как резидентные, как было описано выше, или альтернативно могут быть выполнены в форме выполняемого веб-приложения, доступного для сервера 30 и клиентских компьютерных систем, таких как рабочая станция 21, для получения входных данных от клиентской системы, выполнения модулей алгоритмов на веб-сервере и предоставления клиентской системе выходных данных в некоторой удобной отображаемой или печатной форме. Альтернативно эти выполняемые компьютером программные команды могут находиться в другом месте локальной или глобальной сети или могут быть скачаны с высокоуровневых серверов или расположений в виде зашифрованной информации на электромагнитном несущем сигнале через некий сетевой интерфейс или устройство ввода-вывода. Выполняемые компьютером программные команды могут быть изначально сохранены на съемном или другом энергонезависимом машиночитаемом носителе данных (например, DVD-диске, флеш-памяти и т. п.) или могут быть скачаны в виде зашифрованной информации на электромагнитном несущем сигнале в форме программного пакета, с которого выполняемые компьютером программные команды были традиционным способом установлены системой 20 для установки программы.

Оценка ионной проводимости глинистого минерала

[0036] На фиг. 2 показан общий принцип работы системы 20 во время моделирования для оценки удельной проводимости модели системы глинистых минералов, как правило, соответствующей компоненту изучаемого подземного пласта, в разведке и добыче нефти и газа в соответствии с одним вариантом осуществления настоящего изобретения. Как было указано выше, предполагается, что различные стадии и функции этого процесса могут быть выполнены одним или несколькими вычислительными ресурсами в системе 20, выполняющей компьютерные программные команды, находящиеся в доступной программной памяти, в соответствии с вводимыми

в соответствующих случаях пользователем данными. Как было указано выше, предполагается, что система 20 будет запрограммирована в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения с помощью компьютерных программ, которые, в случае выполнения вычислительными ресурсами в системе 20, будут выполнять различные процессы, описанные в настоящем раскрытии, для моделирования удельной проводимости систем глинистых минералов в соответствии со значениями и соотношениями различных физических параметров.

[0037] Хотя в приведенном далее раскрытии приводится пример этой операции, выполняемой на рабочей станции 21 в сетевой компоновке системы 20, показанной на фиг. 1, разумеется, следует понимать, что конкретный вычислительный компонент, используемый для выполнения конкретной операции, может существенно отличаться в зависимости от реализации системы. Таким образом, приведенное далее раскрытие не является ограничивающим, в частности, в отношении обозначения компонентов, задействованных в конкретной операции. Следовательно, предполагается, что после прочтения настоящего раскрытия специалистам в области техники настоящего изобретения станет понятен способ, которым эти операции будут выполняться вычислительными ресурсами в различных реализациях и вариантах осуществления. Следовательно предполагается, что упоминания выполнения конкретных операций системой 20 будет достаточно для того, чтобы специалисты в области техники настоящего изобретения могли без труда реализовать его варианты осуществления без ненужных экспериментов.

[0038] Как показано на фиг. 2, начальной стадией оценки удельной проводимости системы глинистых минералов в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения является построение молекулярной модели системы глины в процессе 40. В рамках настоящего раскрытия термин «молекулярный», используемый в контексте моделей систем глины и оценки удельной проводимости, в настоящем раскрытии означает модели и процессы моделирования, в которых представлены отдельные атомы, ионы и молекулы; в таком контексте термин «молекулярный» включает особые виды атомов и ионов, а также молекул.

[0039] На фиг. 3 и 4a–4g подробно показано выполнение процесса 40 построения молекулярной модели системы глинистых минералов, смоделированной в соответствии с одним вариантом осуществления настоящего изобретения. Процесс 40 построения начинается с выполнения стадии 50, согласно которой строят аналогичную безводную глинистую структуру, в этом примере выполненную в соответствии с

моделью элементарной ячейки. Такую аналогичную безводную глинистую структуру строят с целью воссоздания атрибутов моделируемой системы глинистых минералов.

[0040] На фиг. 4а показан пример такой аналогичной безводной глины, на основании которой будет построена модель смектитовой (разбухающей) глины в соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения. Аналогичная глина, показанная на фиг. 4а, основана на мусковите, который представляет собой аналогичную глину для моделируемой смектитовой глины. Мусковит является алюмосиликатом слоистого строения со структурой 2-1, то есть каждый слой 65 глины состоит из двух листов кремниевых тетраэдров по обе стороны листа алюмогидроксильного октаэдра (далее — лист алюминиевого октаэдра). Согласно этому примеру такую структуру мусковита модифицируют, удаляя ионы калия из октаэдрального листа и заменяя атомы алюминия в тетраэдрических листах атомами кремния. Заряд такой структуры остается нейтральным и в ее безводной форме образует структуру пиррофиллитовой глины. На фиг. 4а показана структура пиррофиллитовой глины для участков пары параллельных глинистых слоев 65, каждый из которых содержит два кремниевых листа 60 по обе стороны одного листа 62 алюминиевого октаэдра. На фиг. 4а показана элементарная ячейка 64, которая выполняет функцию основы для модели такой системы глинистых минералов; химическая формула элементарной ячейки 64 в соответствии с этим примером выглядит следующим образом: $\text{Si}_8\text{Al}_4\text{O}_{20}(\text{OH})_4$. Атомы алюминия (Al), кислорода (O), водорода (H) и кремния (Si) в модели пиррофиллитовой глины обозначены на фиг. 4а. Из примера согласно фиг. 4а очевидным образом вытекает, что параллельные слои 65 разделены между собой межслойным пространством 63 (т. е. туннельным пространством между слоями 65 в структуре); как будет описано ниже, гидратация такой глинистой структуры приведет к набуханию объема глины, поскольку в этом межслойном пространстве 63 между указанными параллельными слоями 65 структуры будет находиться один или несколько слоев воды.

[0041] На фиг. 4b показана структура элементарной ячейки другого аналогичного глинистого минерала, а именно каолинита. Каолинит представляет собой глину со структурой 1-1, в которой слой 65' (и, следовательно, элементарная ячейка 64') глины содержит один кремниевый лист 60 и один лист 62 алюминиевого октаэдра. Из уровня техники известно, что каолинит не является смектитовой глиной (т. е. не обладает постоянным отрицательным зарядом структуры), поэтому в случае гидратации не будет разбухать между слоями 65'. Здесь края (т. е. концы)

каолининовых слоев 65' являются реакционноспособными, поэтому представляют собой участки взаимодействия с молекулами масла и воды.

[0042] Предполагается, что такие варианты осуществления настоящего изобретения можно использовать для моделирования удельной проводимости в этих и других глинистых структурах. В рамках настоящего раскрытия глинистая структура, показанная на фиг. 4а, будет описана как пример. Предполагается, что специалисты в области техники настоящего изобретения, изучив настоящий документ, смогут без труда применить способы и системы, описанные здесь, не прибегая к ненужным экспериментам, к каолинитной глине, показанной на фиг. 4b, и к другим интересующим их глинам.

[0043] Как показано на фиг. 3, и согласно этому варианту осуществления, после образования структуры элементарной ячейки в процессе 40, переходят к выполнению стадии 51 для ортогонализации такой элементарной ячейки 64 в регулярную структуру, где каждому атому назначены координаты для определения их положения в координатной системе. Стадия 51 ортогонализации не является обязательной, поскольку последующие стадии моделирования, описанные в настоящем документе, можно применить к системе минерала с исходной симметрией структуры (т. е. которая может быть не ортогональной). Однако предполагается, что последующая обработка будет эффективнее на системах с ортогональной моделью, полученной на стадии 51. После ортогонализации, выполненной в соответствии с этим вариантом осуществления, на стадии 52 элементарную ячейку 64 разворачивают в сверхъячейку. Такая сверхъячейка, созданная на стадии 52, образована из ряда таких элементарных ячеек 64, а ее размер достаточный для выполнения описанных в настоящем документе стадий моделирования. Например, элементарную ячейку 64 согласно фиг. 4а можно развернуть на стадии 52 в сверхъячейку из шестидесяти четырех элементарных ячеек, расположенных в конфигурации $8 \times 4 \times 2$ в направлениях x , y и z (в соответствии с ориентацией фиг. 4а), соответственно. Количество повторений элементарной ячейки в каждом направлении может, конечно же, быть другим в зависимости от требований моделирования. Каждому атому в представлении сверхъячейки будут присвоены координаты, описывающие его положение в координатной системе.

[0044] В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения на стадии 54 ионы выбранного вида подставляют в структуру сверхъячейки в соответствии с требуемой плотностью заряда моделируемой глины. В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения моделируют

монтмориллонитовую смектитовую глину. Таким образом, ионы магния замещают ионы алюминия в октаэдральном листе 62 структуры сверхъячейки, как правило случайным образом. В уровне техники известно, что заряд ионов магния (Mg^{2+}) отличается от заряда замещаемых ионов алюминия (Al^{3+}), в результате чего в местах расположения в сверхъячейке ионов магния образуются участки с отрицательным зарядом. На фиг. 4с и 4d показаны примеры сверхъячеек монтмориллонитовой смектитовой глины, основанные на структуре согласно фиг. 4а, в которых ионы магния замещают в случайном порядке ионы алюминия при двух разных концентрациях заряда; на фиг. 4с и 4d показаны виды в плане относительно сечения вида согласно фиг. 4а, поэтому межслойное пространство 63 между параллельными слоями глины не видно. Несмотря на то, что размещение этих замещенных ионов является случайным, такое расположение лучше контролировать, чтобы предотвратить образование взаимодействия ближайших соседей $Mg-O-Mg$. На фиг. 4с показан пример относительно низкого заряда, причем чистая плотность заряда сверхъячейки после стадии 54 замещения составляет $-0,375e$ на элементарную ячейку, где e — элементарный заряд электрона; участки 66 с отрицательным зарядом показаны на этой фиг. 4с в местах, соответствующих местам расположения замещающих ионов магния. На фиг. 4d показан пример высокого заряда, причем чистая плотность заряда сверхъячейки после стадии 54 замещения составляет $-0,750e$ на элементарную ячейку, что в два раза больше плотности участков 66 с отрицательным зарядом, как и в примере согласно фиг. 4с. Также в рамках стадии 54 ионного замещения модель сверхъячейки дополнительно модифицируют посредством вставки противоионов в область между слоями, чтобы сверхъячейка имела нейтральный заряд. В соответствии с этим примером используют противоионы натрия или противоионы кальция, хотя альтернативно можно использовать противоионы других видов. В примерах согласно фиг. 4с и 4d (т. е. с разной плотностью заряда) химические формулы элементарной ячейки, получаемой на стадии 54 с использованием противоионов натрия, выглядят следующим образом: $Na_{0.375}Si_8Al_{13.625}Mg_{0.375}O_{20}(OH)_4$ и $Na_{0.75}Si_8Al_{13.25}Mg_{0.75}O_{20}(OH)_4$, для заряда низкой и высокой плотности соответственно.

[0045] На стадии 56 структуру модели сверхъячейки глины гидратируют, вводя молекулы воды в межслойное пространство между слоями глины в структуре сверхъячейки. Например, в структуре монтмориллонитовой глины согласно фиг. 4а на стадии 56 гидратация слои глины со структурой 2-1 разделяют посредством вставки

молекул воды в межслойное пространство 63 между слоями 65. В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения в результате ввода молекул воды на стадии 56 эти молекулы воды вставляются в форме целого числа слоев молекул воды в соответствии с требуемой моделируемой концентрацией воды. Например, в межслойное пространство 63 могут быть вставлены один, два или три слоя воды, в результате чего будут получены стехиометрические отношения 3,9, 7,9 и 11,8 молекул воды на элементарную ячейку, соответственно. Согласно одному примеру стадию 56 выполняют, перемещая противоионы (Na^+ , Ca^{+2}), вставленные на стадии 54 в межслойные пространства 63, в места выше или ниже соответствующих участков с отрицательным зарядом 66 в зависимости от обстоятельств, после чего оставшийся объем межслойного пространства 63 заполняют соответствующим количеством молекул воды в требуемой концентрации. Такая вставка молекул воды обеспечивает увеличение разделения между параллельными слоями глинистой структуры 2-1 и, следовательно, соответствует разбуханию глины, характерному для смектитовой глины этого типа.

[0046] На фиг. 4e–4g показана модель сверхъячейки глины согласно фиг. 4a после стадии 56 гидратации с разными количествами водоносных слоев, вставленных между слоями 65. На фиг. 4e показана конфигурация сверхъячейки глины, в которой между параллельными слоями 65 глинистой структуры 2-1 вставлен один слой 67(1) воды. Из фиг. 4e видно, что противоионы натрия (Na^+) удерживаются в водоносных слоях 67(1). Получаемое в результате разделение между смежными параллельными слоями 65 образует шаг слоев $d(1)$ для случая с одним слоем 67(1) воды. Используемый в настоящем документе термин «шаг» означает суммарную толщину одного слоя 65 и смежного межслойного пространства 63; этот шаг слоев глины можно рассматривать как эквивалент базального межплоскостного расстояния, измеренного экспериментальными методами порошковой рентгеновской дифракции. На фиг. 4f показана конфигурация сверхъячейки с двумя водоносными слоями 67(2), вставленными между каждой парой параллельных слоев 65 глины со структурой 2-1; шаг слоев $d(2)$ в этом случае будет больше шага $d(1)$ для конфигурации с одним слоем согласно фиг. 4e. На фиг. 4g показана конфигурация сверхъячейки с тремя водоносными слоями 67(3) между каждой парой смежных параллельных слоев 65, причем шаг слоев $d(3)$ в конфигурации с тремя водоносными слоями будет больше шага $d(2)$ в конфигурации с двумя водоносными слоями.

[0047] Как показано на фиг. 4e–4g и как было указано выше, противоионы

(например, Na^+) удерживаются во вставленных водоносных слоях 67. Количество таких противоионов и их плотность заряда определяется количеством замещений (Mg^{2+} в этом примере) в слоях 65 глины в безводной структуре, образованной на стадии 50, и, таким образом, не меняется в зависимости от количества водоносных слоев 67, вставленных в представление сверхъядчейки. Поскольку противоионы (Na^+ или Ca^{2+} , в зависимости от обстоятельств) находятся в водоносных слоях 67, они будут двигаться под действием соответствующего стимула (хотя считается, что взаимодействия между противоионами и соседними молекулами воды будут приводить к движению обоих). Таким образом, именно в результате такого движения противоионов в ответ на прикладывание потенциала в глине будет возникать электрическая удельная проводимость. Моделирование ионной проводимости такой глинистой структуры в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения позволит определить движение этих противоионов и оценить ионную проводимость системы глинистых минералов.

[0048] Координаты атомов в структуре сверхъядчейки после стадии 56 гидратации расширяют для разделения между смежными слоями 65, включая координаты противоионов, а затем их сохраняют как представление построенной молекулярной модели в подходящем формате в памяти системы 20. Затем на стадии 40 строят моделируемую молекулярную модель системы глины. Несмотря на то, что сверхъядчейки на фиг. 4e–4g представляют модели конечного размера, на практике для эффективного представления бесконечного числа повторяющихся сверхъядчеек в направлениях x , y и z используют периодические граничные условия. Таким образом, электростатические взаимодействия дальнего действия будут включены в последующие моделирования методом МД, как будет писано ниже.

[0049] На фиг. 2 показано, что молекулярную модель, построенную на стадии 40, переводят на стадию 42. На стадии 42 составляющим (атомам, молекулам) построенной модели и их взаимодействиям друг с другом назначают параметры силового поля. В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения модель силового поля для глины, известная под названием CLAYFF, описанная в документе под авторством Cygan et al., включенном в настоящий документ выше посредством ссылки, предоставляет значительно больше гибкости при описании параметров взаимодействия между атомами и молекулами в модели сверхъядчейки гидратированной монтмориллонитовой глины, построенной в процессе 40. В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения назначение

этих параметров на стадии 42 должно выполняться системой 20 в программной среде моделирования, такой как пакет компьютерных программ молекулярной динамики LAMMPS, описанный выше.

[0050] Значения параметров силового поля и переменных моделирования назначают составляющим построенной на стадии 42 модели. Как описано в статье Cygan et al., параметры силового поля включают:

- представления атомов в модели как точечных зарядов в точках в пределах координатной системы с поступательной степенью подвижности внутри структуры модели;
- энергии каждого взаимодействия атом-атом в системе, включая энергии для электростатического взаимодействия дальнего действия (закон Кулона) и взаимодействия ближнего действия (силы Ван-дер-Вальса), а также их граничные расстояния; и
- углы связи, длины связи и т. д. для гидроксильных групп и молекул воды.

Более того, на стадии 42 также могут назначать значения конкретным переменным моделирования в соответствии с требуемыми условиями моделирования, например, включая:

- граничные условия, описывающие давление, температуру и объем;
- группу термодинамических параметров и
- другие коэффициенты, имеющие отношение к моделированию методом молекулярной динамики, которые будут понятны специалистам в области техники настоящего изобретения после изучения настоящего раскрытия.

После назначения при необходимости традиционными методами может быть выполнена оптимизация параметров в модели силового поля, как описано в статье Cygan et al., включенной в настоящий документ посредством ссылки. Такая оптимизация может быть проведена, например, для получения структуры с минимизированной структурой, как описано в статье. Использование этих коэффициентов силового поля на стадии 42 может привести к изменениям положений координат разных составляющих модели сверхъядейки; например, было замечено, что шаги слоев $d(1)$, $d(2)$, $d(3)$ несколько зависят от температуры.

[0051] После назначения коэффициентов силового поля на стадии 42 система 20 выполняет программные команды для выполнения стадии 44 моделирования методом молекулярной динамики (МД). Как было описано выше, в уровне техники известны

пакеты программ для моделирования методом МД, которые можно использовать на стадии 44. Примером такого подходящего программного пакета МД является программный пакет LAMMPS компании «Сандийские национальные лаборатории», как было раскрыто выше.

[0052] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения на стадии 44 моделирования методом МД оценивают динамические свойства составляющих молекулярной модели сверхъядейки, построенной на стадии 40, по значениям параметров силового поля и переменным моделирования, назначенным на стадии 42. Применимым подходом для моделирования методом МД на стадии 44 является оценка взаимодействий ближнего действия и дальнего действия (т. е. применимых и соответствующих уравнений движения) по составляющим модели несколькими заходами в течение выбранного периода времени для получения координат положения, скорости и силы этих составляющих за этот период.

[0053] В одном примере в соответствии с одним вариантом осуществления настоящего изобретения взаимодействия ближнего действия (силы Ван-дер-Ваальса) оценивали за короткие промежутки времени (например, 0,5 фс), где к силам ближнего действия применяли граничную длину (например, 10,0 Å), за пределами которой эти взаимодействия в моделировании не учитывались. В этих моделированиях использовали периодические граничные условия и оценивали электростатические взаимодействия дальнего действия за более продолжительные периоды времени (например, 1,0 фс), используя алгоритм моделирования частица–частица частица–ячейка (PPPM), описанный в документе под авторством Plimpton et al. «Particle-mesh Ewald and rRESPA for parallel molecular dynamics simulations», Proceedings of the Eighth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (1997), включенном в настоящий документ посредством ссылки. В соответствии с этим примером системы модели термически уравнивали с помощью начального моделирования с интервалом 50 пс в микроканоническом ансамбле (т. е. количество, объем и потенциальную энергию частиц) посредством нормализации скорости до требуемой температуры, после чего проводили дополнительное моделирование с интервалом 50 пс в каноническом ансамбле (т. е. количество, объем и температуры по термостату Нозе-Гувера частиц). После этих начальных моделирований выполняли производственное моделирование за более длительный период времени (например, 2500 пс) в изобарически-изотермическом ансамбле (т. е. количество, объем и температуры частиц, где давление по баростату Нозе-Гувера равно нулю). В

соответствии с этим моделированием объем сверхъядейки меняли только в направлении z (т. е. перпендикулярно слоям глины на фиг. 4e–4g).

[0054] Затем результаты стадии 44 моделирования используют на стадии 46, где система 20 вычисляет коэффициенты самодиффузии D выбранных молекул и атомов. В основе стадии 46 этого варианта осуществления настоящего изобретения лежит движение выбранных атомов и молекул за выбранный период времени в течение моделирования. Во время моделирования смектитовой глины, описанном выше, коэффициенты диффузии D противоионов натрия (Na^+) или кальция (Ca^{+2}), в зависимости от того, какие из них присутствуют, и молекулы воды во вставленных водоносных слоях 67 основываются на координатах положения атомов и молекул за несколько периодов оценки в течение выбранного интервала времени на стадии 44 моделирования методом МД. В качестве примера производственного моделирования с интервалом 2500 пс в изобарически-изотермическом ансамбле, описанном выше, выполнение стадии 46 может быть основано на координатах атомов и молекул, сохраняемых в памяти системы 20 каждые 2,0 фс за последние 2000 пс из всех 2500 пс процесса моделирования.

[0055] На основании этих сохраненных координат положения рассматриваемых ионов и молекул на стадии 46 из среднеквадратичного смещения этих ионов и молекул воды в плоскости x – y , параллельной базальной поверхности, вычисляют коэффициенты самодиффузии D :

$$\langle \Delta x(t)^2 + \Delta y(t)^2 \rangle = 4Dt$$

где скобки $\langle \rangle$ обозначают среднее по ансамблю значение смещения в направлении x и y иона или молекулы в конкретный момент времени t . В этом примере смещение в направлении z устанавливают равным нулю, поскольку диффузией в этом направлении можно пренебречь (т. е. на стадии 44 моделирования в направлении z происходит только случайное движение вследствие кинетической энергии). Среднее по ансамблю значение смещения за период времени вычисляют для каждого из выбранных противоионов и молекул воды в водоносных слоях 67 в межслойном пространстве 63 моделируемой структуры, например, только за подинтервал времени, за который было выполнено моделирование. В описанном выше примере смещение ионов и молекул оценивали за подинтервал в точках от 200 пс до 800 пс из интервала, равного 2000 пс, координаты которых были сохранены, для предотвращения возникновения эффектов нелинейного движения ближнего действия (т. е., вращательного). На основании этих результатов можно провести регрессионный анализ

(например, методом наименьших квадратов) с целью восстановления наклона графика зависимости смещения от времени моделирования и, следовательно, коэффициента самодиффузии D для каждого вида.

[0056] Альтернативно коэффициенты диффузии для видов рассматриваемых ионов и молекул в моделировании с объемными жидкостями или с одной жидкостью можно вычислить на стадии 46, например, посредством прямого вычисления коэффициента диффузии D из трехмерной траектории ионов и молекул:

$$D = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \sum_i \langle [r_i(t) - r_i(t_0)]^2 \rangle$$

где скобками $\langle \rangle$ обозначено среднее по ансамблю значение смещения ионов или молекул за интервал времени от начального момента времени t_0 до момента времени t . Таким образом, это выражение предназначено для вычисления коэффициента диффузии на основании среднеквадратичного смещения ионов и молекул, определенного на стадии 44 посредством моделирования методом МД.

[0057] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения после определения на стадии 46 коэффициентов самодиффузии D рассматриваемых видов на стадии 48, например, с помощью системы 20 вычисляют ионную проводимость видов в смоделированной системе глины, используя соотношение Нернста-Эйнштейна. Описание соотношения Нернста-Эйнштейна можно найти в документе под авторством Bockris et al., *Modern Electrochemistry 1: Ionics*, 2nd ed. (Plenum Press, New York, 1998), pp. 456–458, включенном в настоящий документ посредством ссылки. Более конкретно, в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения ионная проводимость видов противоионов с показателем i (касательно одного из Na^+ или Ca^{2+} , включенных в модель согласно описанному выше примеру), заключенных в водоносные слои 67, может быть вычислена на основании их коэффициентов самодиффузии D_i следующим образом:

$$\sigma_i = \frac{z_i^2 c_i F^2 D_i}{RT}$$

где z_i — ионная валентность противоиона i , c_i — ионная концентрация противоиона i , F — постоянная Фарадея, R — универсальная газовая постоянная, и T — температура. Аналогично можно вычислить молярную ионную проводимость λ_i :

$$\lambda_i = \frac{\sigma_i}{c_i} = \frac{z_i^2 F^2 D_i}{RT}$$

[0058] В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения

ионную проводимость в смоделированной системе глинистых минералов можно вычислить на основании молекулярной модели этой системы глины. Этот процесс моделирования можно без труда повторить для другого вида противоионов, изменив уровни гидратации (*т. е.* использовать разные количества водоносных слоев 67 между слоями 65 глины), изменив физические свойства (*например*, температуру, давление и т. д.) и измерив плотность заряда и т. п. Проведя анализ результатов полученных ансамблей, можно понять механизмы удельной проводимости, а также повысить эффективность экспериментального подтверждения результатов моделирования. Более того, возможность этого инструмента моделирования оценивать удельную проводимость для широкого ряда условий позволяет получить эмпирические отношения, необходимые для понимания петрофизических свойств подземных пластов.

Оценка пластового коэффициента системы глинистых минералов

[0059] Как было указано выше, петрофизическое свойство, представляющее особый интерес при проведении анализа диаграмм каротажа по методу сопротивления, обычно получаемых во время разработки нефтегазовых коллекторов и добычи из них, называется «пластовым коэффициентом». В общем, пластовый коэффициент представляет собой отношение удельного сопротивления пласта породы к удельному сопротивлению самой жидкости.

[0060] На фиг. 5 показана блок-схема процесса оценки пластового коэффициента конкретной системы глинистых минералов. Как показано на фиг. 5, ионную проводимость этой системы глинистых минералов определяют на стадии 100 с помощью системы 20 в соответствии с процессом, описанным выше со ссылкой на фиг. 2. Однако для того чтобы получить пластовый коэффициент, также нужно знать объемную удельную проводимость жидкости. В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения объемную удельную проводимость вычисляют так же, как и ионную проводимость системы глины, начиная со стадии 70.

[0061] На стадии 70 строят молекулярную модель объемного (т. е. с нейтральным зарядом) раствора требуемой жидкости. Например, стадию 100, описанную выше, выполняют для модели, в которой катионы Na^+ или Ca^{2+} находятся во введенных водоносных слоях 67 наряду с анионами Cl^- и сохраняют нейтральность зарядов. В этом примере молекулярная модель объемного раствора содержит 4096 молекул воды, четыре катиона натрия (Na^+) или кальция (Ca^{2+}) и четыре или восемь анионов Cl^- (в зависимости от обстоятельств), в кубе приблизительно 50 Å на каждой стороне. Молярная концентрация катионов в этом смоделированном объемном

растворе составляет приблизительно 0,05.

[0062] Альтернативно если соответствующий объемный раствор, смоделированный на стадии 70, не содержит анионы и, следовательно, имеет чистый положительный заряд, для сохранения нейтральности заряда в модель может быть введен зарядово-компенсирующий фон.

[0063] Затем с молекулярной моделью объемного раствора, построенной на стадии 70, выполняют стадии 72–76 так же, как и стадии 42–46, описанные выше, для системы глинистых минералов. Говоря кратко, параметры силового поля, назначенные молекулам и катионам в модели объемного раствора на стадии 72, уточняют такие параметры, как расположение атомов в пределах координатной системы и энергия молекул и атомов, и параметры моделирования включают граничные условия для давления, температуры и объема, термодинамический ансамбль параметров и т. п. На стадии 74 система 20 выполняет для этой молекулярной модели моделирование методом молекулярной динамики (МД) на основе уточненных коэффициентов силового поля для определения положений молекул воды и катионов за период времени моделирования, например, сохраняя положение каждой молекулы и каждого катиона на выборочной частоте 2 пс за интервал моделирования, равный 10 нс, при постоянном давлении и постоянной температуре моделирования. На стадии 76 вычисляют коэффициенты самодиффузии катионов и молекул воды в смоделированном объемном растворе на основании сохраненных на стадии 74 моделирования методом МД положений за выбранное время. На стадии 76 коэффициенты самодиффузии могут быть вычислены так же, как и на стадии 46, описанной выше, на основании среднеквадратичного смещения в плоскости x – y или на основании среднего по ансамблю значения траектории ионов в трех направлениях.

[0064] Примеры значений коэффициента диффузии, вычисленных для модели молекулярного объемного раствора в соответствии с подходом на стадиях 70–76, соответствуют полученным результатам для коэффициентов диффузии растворов натрия и кальция при бесконечном разбавлении.

[0065] На стадии 78 коэффициент самодиффузии катиона в модели объемного раствора при температуре, которая на стадии 72 использовалась как граничное значение, используют в соотношении Нернста-Эйнштейна для определения удельной проводимости раствора, как было описано выше. Эта удельная проводимость, вычисленная на стадии 78, является объемной, и на ее основании можно выполнить оценку объемной удельной проводимости жидкости в системе глинистых минералов,

из которой на стадии 80 традиционным способом можно определить пластовый коэффициент F системы глинистых минералов, определенной на стадии 100:

$$F = \frac{\sigma_b}{\sigma_i}$$

где σ_i — ионная проводимость противоиона в смоделированной системе глины, определенная на стадии 100, и σ_b — объемная удельная проводимость объемного раствора, вычисленная на стадии 78. Как известно из уровня техники, и как было описано выше, пластовый коэффициент F представляет собой эффективную меру пористости структуры пласта, на основании которой можно определить другие важные петрофизические свойства, такие как проницаемость.

[0066] Следовательно, этот вариант осуществления настоящего изобретения дает возможность оценить значение пластового коэффициента системы глинистых минералов посредством составления модели и моделирования актуальных механизмов на молекулярном уровне. Такой анализ на молекулярном уровне дает возможность провести точный анализ наноразмерных компонентов пласта, превосходящий возможности традиционных подходов, таких как формула Арчи и т. п.

Прямое численное моделирование пластов, содержащих глинистый компонент

[0067] Возможность согласно вариантам осуществления настоящего изобретения точно оценить удельную проводимость глинистых минералов, как было описано выше, может пригодиться в целом ряде различных методов анализа петрофизических свойств, в частности, учитывая нынешнее значение пластов породы, содержащих углеводороды, в которых присутствуют глиноносные пески. Более того, также предполагается, что понимание физических механизмов, действующих на молекулярном уровне, в таких наноразмерных материалах будет особенно полезно для проектирования и анализа технологий добычи. Методы оценки удельной проводимости в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения также позволяют усовершенствовать другие аналитические инструменты и методики.

[0068] Одним из таких аналитических инструментов и методик, которые можно усовершенствовать за счет точной оценки удельной проводимости систем глинистых минералов, является прямое численное моделирование, в частности, применяемое для подземных пластов, содержащих как фазу породы, например кварц, как в песчанике, так и фазу глинистого минерала. В уровне техники известно, что глинистые компоненты в пластах такого типа, как правило, образованы рядом параллельных пластинок; например, глинистый минерал каолинит имеет, как правило, форму

«книжки» между твердых зерен кварца и поровым пространством. Как было описано в разделе «Предпосылки к созданию настоящего изобретения», традиционные диаграммы каротажа по методу сопротивления, интерпретируемые по формуле Арчи, основаны на том, что твердые зерна характеризуются нулевой удельной проводимостью, а жидкость в поровом пространстве характеризуется высокой удельной проводимостью. В пластах, для которых это предположение справедливо, измеренное удельное сопротивление будет эффективно описывать пористость пласта. Однако в уровне техники известно, что глинистые компоненты в пласте также будут характеризоваться удельной проводимостью, но в меньшей степени, чем поровая жидкость, но значительно в большей степени, чем зерна твердого кварца. Традиционный анализ удельного сопротивления пласта, содержащего глинистые компоненты, предоставляет неоднозначные результаты, поскольку в этом случае удельное сопротивление будет зависеть не только от пористости, создаваемой поровой жидкостью, но и от количества присутствующих глинистых компонентов и их удельной проводимости.

[0069] В соответствии с одним вариантом осуществления настоящего изобретения точную оценку удельной проводимости глинистых компонентов в составном пласте можно использовать при определении электрического отклика методом прямого численного моделирования объемного изображения горной породы. На фиг. 7 показан общий процесс оценки свойств материала с помощью цифрового числового моделирования в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения.

[0070] Оценка начинается со стадии 200 подготовки образца, на которой получают пробу изучаемого пласта и образец пробы готовят для анализа. Пробу пласта можно получить любым из традиционных способов. В нефтегазовой промышленности пробу, как правило, получают во время бурения разведочных и добывающих скважин, а также они могут быть получены из цельного керна, кернов, отбираемых из стенок ствола скважины, обнаженных пород и обломков выбуренной породы, альтернативно пробы могут быть получены в лаборатории из синтезированных образцов горной породы, таких как песчаные пробки и цементированные пробки. В соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения порода, из которой взята проба, не всегда может быть высоко консолидированной, поскольку будет содержать комбинацию породы (например, песчаник) вместе с глиной и другими зернистыми или осадочными материалами. Таким образом стадию 200 подготовки следует выполнять

таким образом, чтобы существенно не повлиять на структуру пласта, из которого будет браться образец.

[0071] На стадии 202 система 28 формирования изображений (фиг. 1) получает двухмерные (2D) или трехмерные (3D) изображения или другие подходящие представления изображений образца горной породы, подготовленного на стадии 200. Эти изображения и представления, полученные на стадии 202, содержат детальную информацию о внутренней структуре образцов. Примером устройства обработки изображений, используемого на стадии 202, является рентгеновский компьютерный томограф (КТ), тип, конструкция и другие атрибуты которого соответствуют любому рентгеновскому устройству, с помощью которого можно получить изображение внутренней структуры образца с требуемой разрешающей способностью. Например, может быть получено множество двухмерных (2D) томографических изображений образца, которые будут отправлены в компьютерную систему 20, которая затем строит трехмерное (3D) объемное цифровое изображение соответствующего образца. Как было описано выше, система 20 может быть выполнена любым способом, например, как настольный компьютер или рабочая станция, ноутбук, серверный компьютер, планшетный компьютер или т. п. с достаточной вычислительной мощностью для выполнения требуемой операции.

[0072] Конкретные традиционные методы получения и обработки 3D объемных цифровых изображений образца на стадии 202 предусматривают, кроме прочего, рентгеновскую томографию, рентгеновскую микротомографию, рентгеновскую нанотомографию, сканирующую электронную микроскопию сфокусированным ионным пучком, ядерный магнитный резонанс или нейтронную томографию.

[0073] Объемное изображение, полученное на стадии 202, как правило, образуется трехмерными регулярными элементами, называемыми элементами объема или «вокселями», каждый из которых характеризуется связанным числовым значением или амплитудой, которое описывает относительные свойства материала изображенного образца в точках представляемой среды. На стадии 210 вычислительное устройство выполняет сегментацию или другую методику улучшения объемного цифрового изображения образца для выделения и маркирования разных компонентов в объемном изображении. Например, на стадии 210 сегментации могут быть идентифицированы показательные компоненты упругости, включая поровое пространство и минералогические компоненты (например, глины и кварц), которые могут влиять на характеристики образца.

[0074] В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения затем система 20 выполняет стадию 210 сегментации для идентификации показательных фаз материала образца, представленных в объемном изображении, например, представляющих такие составляющие материала, как поровое пространство, глинистые фракции и отдельные зерна и минералы. Конкретный алгоритм сегментации, применяемый в вычислительном устройстве на стадии 210, может зависеть от того, какой требуется провести анализ, и от сложности горной породы. Самой простой формой сегментации является «пороговая обработка», согласно которой воксели с одинаковыми амплитудами собирают в группы. Традиционный способ обработки изображений для улучшения объемного изображения, ослабления шума и т. д. может быть включен на стадии 210.

[0075] В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения на стадии 210 сегментации идентифицируют и выделяют по меньшей мере три показательные фазы материала, а именно поровое пространство, зерна породы и глинистые минералы. На фиг. 6a и 6b показан пример выполнения стадии 210 сегментации. На фиг. 6a показан пример рентгеновского микротомографического изображения песчаника, содержащего компоненты глинистого минерала, такие как каолинит, а также с твердыми зернами кварца. На изображении согласно фиг. 6a поровое пространство показано темными областями, а зерна кварца и глинистые компоненты показаны различными промежуточными оттенками серого (светло-серым цветом обозначены зерна кварца). Как правило, пространственное разрешение рентгеновского микротомографического изображения, как на фиг. 6a, составляет от 1 до 5 микрон, что означает, что текстура, конфигурация и строение глинистых минералов не видны в этом масштабе. Более того, яркость на изображении согласно фиг. 6a меняется в некоторой степени непрерывно, что усложняет и затрудняет числовой анализ. На стадии 210 сегментации различают поровое пространство, твердые зерна и глинистые компоненты. На фиг. 6b показан пример применения результатов стадии 210 сегментации на рентгеновском микротомографическом изображении согласно фиг. 6a, где три фазы представлены следующим образом: черным цветом показано поровое пространство 90, белым цветом показан кварц или другой твердый зернистый материал 92, а промежуточным серым — глинистые компоненты 94. В целом, как было указано выше, для стадии 210 сегментации используется трехмерное объемное изображение, полученное на стадии 202.

[0076] В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения

оценку удельной проводимости глинистых компонентов 94 выполняют на стадии 100. Как было описано выше, предполагается, что на стадии 100, описанной со ссылкой на фиг. 5, выполняют эффективную оценку удельной проводимости глинистого компонента 94 в образце, подготовленном и изображенном на стадиях 200 и 202. Однако также предполагается, что в этом варианте осуществления настоящего изобретения альтернативно могут использоваться другие подходы для измерения и оценки удельной проводимости в глинистом компоненте 94; однако ожидается, что традиционные подходы оценки удельной проводимости систем глинистых минералов менее строгие, поэтому они предоставляют в целом менее точные результаты оценки удельной проводимости, чем было описано выше со ссылкой на варианты осуществления настоящего изобретения.

[0077] На основании оценки удельной проводимости, выполненной на стадии 100, выполняют стадию 215 для назначения относительного значения удельной проводимости w глинистым компонентам 94 в сегментированном объемном изображении. Как было описано выше, при проведении традиционного анализа удельного сопротивления кристаллы 92 кварца (или другого твердого материала) характеризуются нулевой удельной проводимостью, тогда как жидкость в поровом пространстве 90 характеризуется высокой удельной проводимостью; согласно оценке, выполненной на стадии 100, глинистые компоненты 94, как правило, являются проводящими, но в меньшей степени, чем жидкость в поровом пространстве 90. В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения значение относительной удельной проводимости w , назначенное глинистым компонентам 94 на стадии 215, отражает оцененную удельную проводимость глины в сравнении с удельной проводимостью жидкости. Пластовый коэффициент F , вычисленный согласно приведенному выше описанию, может быть основой, например, этого значения относительной удельной проводимости w . Затем на стадии 210 это значение относительной удельной проводимости w назначают каждому из вокселей, представляющих глинистые компоненты 94 в сегментированном объемном цифровом изображении. Безусловно, если глинистые компоненты 94 в объемном изображении представляют более чем один вид глины, на стадии 100 оценка удельной проводимости может проводиться отдельно для разных фаз глины, а на стадии 215 может применяться в виде разных значений относительной удельной проводимости w .

[0078] На стадии 220 вычислительная система 20 выполняет прямое численное моделирование для анализа одного или нескольких физических свойств образца, как

правило, посредством числового анализа сегментированного объемного цифрового изображения. Свойства, определяемые на стадии 220, включают изучаемые петрофизические свойства, которые напрямую или косвенно связаны с удельной проводимостью глинистых компонентов 94, такие как пористость, пластовый коэффициент, показатель цементации, показатель удельного сопротивления, коэффициент удлинения пробега, показатель насыщения и т. п. Эти петрофизические свойства можно оценить с помощью соответствующей дискретизации всего сегментированного объемного цифрового изображения или сетки изменяющегося порового пространства и глинистых компонентов, в сочетании с соответствующим числовым моделированием, например прямым численным моделированием электрической удельной проводимости для определения электрических свойств горной породы. Для определения некоторых из этих петрофизических свойств на стадии 220 также может потребоваться выполнить числовое моделирование методами конечных элементов, методами конечных разностей, методами конечных объемов, методом решеточных уравнений Больцмана или любых других числовых подходов. Например, на фиг. 6с показано вычисление пластового коэффициента для трех разных глиноносных песков методом прямого численного моделирования, где у глинистых компонентов 94 есть назначенные удельные проводимости.

[0079] В соответствии с этим вариантом осуществления настоящего изобретения предполагается, что традиционные диаграммы каротажа по методу сопротивления могут использоваться для более сложных структур пластов, включая пласты с компонентами глинистого минерала, и могут предоставлять точные результаты по важным петрофизическим свойствам, таким как пористость, водонасыщенность, глинистая фракция и т. п., в частности, если удельная проводимость оценивается в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения, описанными выше. Также предусматривается анализ воздействия вторичных процессов восстановления на пласты, для которых получены диаграммы каротажа по методу сопротивления.

Заключение

[0080] Как было описано выше, в соответствии с вариантами осуществления настоящего изобретения предоставляется способ и система точной оценки электрического отклика глинистых минералов и песков, содержащих глинистые минералы, на основе физических механизмов, происходящих на молекулярном уровне. Предполагается, что возможность проведения этим способом анализа наноразмерных материалов, таких как глинистые минералы, будет использоваться для широкого ряда

глинистых структур, помимо описанных выше примеров пиррофиллитовой, монтмориллонитовой и каолинитной, поскольку один и тот же подход подходит для широкого ряда молекулярных моделей глинистых минералов. Благодаря такой возможности можно будет лучше понять принцип действия других аналитических инструментов, таких как измерения прямым численным моделированием петрофизических свойств образца подземного пласта, который содержит глинистые минералы, и разработка и анализ пластового коэффициента составных пластов, содержащих наноразмерные компоненты, такие как глины.

[0081] Хотя настоящее изобретение было описано со ссылкой на конкретные варианты его осуществления, следует понимать, что эти варианты осуществления могут быть модифицированы или могут иметь альтернативные варианты, и такие модификации и альтернативные варианты, обеспечивающие преимущества и благоприятные эффекты, будут очевидны специалистам в области техники настоящего изобретения после ознакомления с его раскрытием и фигурами. Предполагается, что такие модификации и альтернативные варианты входят в объем настоящего изобретения, определенный прилагаемой формулой изобретения.

ФОРМУЛА ИЗОБРЕТЕНИЯ

1. Способ анализа образца горной породы, содержащего глинистый компонент, предусматривающий:

оценку удельной проводимости глинистого компонента в образце горной породы;
сегментирование объемного цифрового изображения, соответствующего одному или нескольким топографическим изображениям образца горной породы, для связывания вокселей объемного цифрового изображения с поровым пространством, твердым материалом или глинистым компонентом;

назначение значения относительной удельной проводимости вокселям, соответствующим глинистому компоненту, относительно удельной проводимости жидкости, находящейся в поровом пространстве образца;

затем численный анализ представления объемного цифрового изображения для определения свойства материала образца горной породы.

2. Способ по п. 1, в котором стадия оценки удельной проводимости глинистого компонента предусматривает:

построение молекулярного представления глинистого минерала, состоящего из:

безводной структуры атомов, расположенных во множестве параллельных слоев, причем безводная структура содержит участки, замещающие атомы металла в структуре в концентрации, соответствующей выбранной плотности заряда;

противоионов по меньшей мере одного вида, расположенных в межслойном пространстве между слоями безводной структуры, в концентрации, соответствующей выбранной плотности заряда, и

множества молекул воды, расположенных в межслойном пространстве;

назначение параметров силового поля молекулярному представлению в сочетании с граничными условиями, соответствующими выбранному давлению и температуре глинистого минерала;

затем применение компьютерной системы для выполнения моделирования методом молекулярной динамики уравнений движения за интервал времени моделирования для определения координат положения противоионов в представлении во множестве моментов времени за интервал времени моделирования;

вычисление на основании координат положения во множестве моментов времени коэффициентов самодиффузии для одного или нескольких видов противоионов и

затем вычисление ионной проводимости для вида противоионов из

коэффициентов самодиффузии.

3. Способ по п. 2, в котором стадия построения молекулярного представления предусматривает:

образование элементарной ячейки представления, содержащей атомы, соответствующие части по меньшей мере одного слоя, и содержащей часть межслойного пространства, и

размещение множества элементарных ячеек в представлении сверхъячейки глинистого минерала.

4. Способ по п. 1, дополнительно предусматривающий:

получение объемного цифрового изображения образца горной породы посредством одного из следующего: рентгеновской томографии, рентгеновской микротомографии, рентгеновской нанотомографии, сканирующей электронной микроскопии сфокусированным ионным пучком, ядерного магнитного резонанса или нейтронной томографии.

5. Способ по п. 4, в котором образец горной породы представляет собой одно из следующего: цельный керн, керны, отбираемые из стенки ствола скважины, обнаженные породы, обломки выбуренной породы, созданные в лаборатории синтезированные образцы горной породы, песчаные пробки и цементированные пробки.

6. Система для анализа образцов материала, причем система содержит:

систему формирования изображений, выполненную с возможностью создания объемного цифрового изображения образца материала;

компьютерную систему, соединенную с устройством обработки изображений и содержащую:

один или несколько процессоров и

одно или несколько запоминающих устройств, соединенных с одним или несколькими процессорами, хранящих программные команды, в результате выполнения которых одним или несколькими процессорами один или несколько процессоров анализируют образец горной породы, содержащий глинистый компонент, за счет выполнения множества операций, предусматривающих:

сегментирование объемного цифрового изображения, соответствующего одному или нескольким топографическим изображениям образца горной породы, для связывания вокселей объемного цифрового изображения с поровым пространством, твердым материалом или глинистым компонентом с оцененной удельной проводимостью;

назначение значения относительной удельной проводимости вокселям, соответствующим глинистому компоненту, относительно удельной проводимости жидкости, находящейся в поровом пространстве образца;

затем численный анализ представления объемного цифрового изображения для определения свойства материала образца горной породы.

7. Система по п. 6, в которой множество операций дополнительно предусматривают операцию оценки удельной проводимости глинистого компонента посредством выполнения множества операций, предусматривающих:

построение молекулярного представления глинистого минерала, состоящего из:

безводной структуры атомов, расположенных во множестве параллельных слоев, причем безводная структура содержит участки, замещающие атомы металла в структуре в концентрации, соответствующей выбранной плотности заряда;

противоионов по меньшей мере одного вида, расположенных в межслойном пространстве между слоями безводной структуры, в концентрации, соответствующей выбранной плотности заряда, и

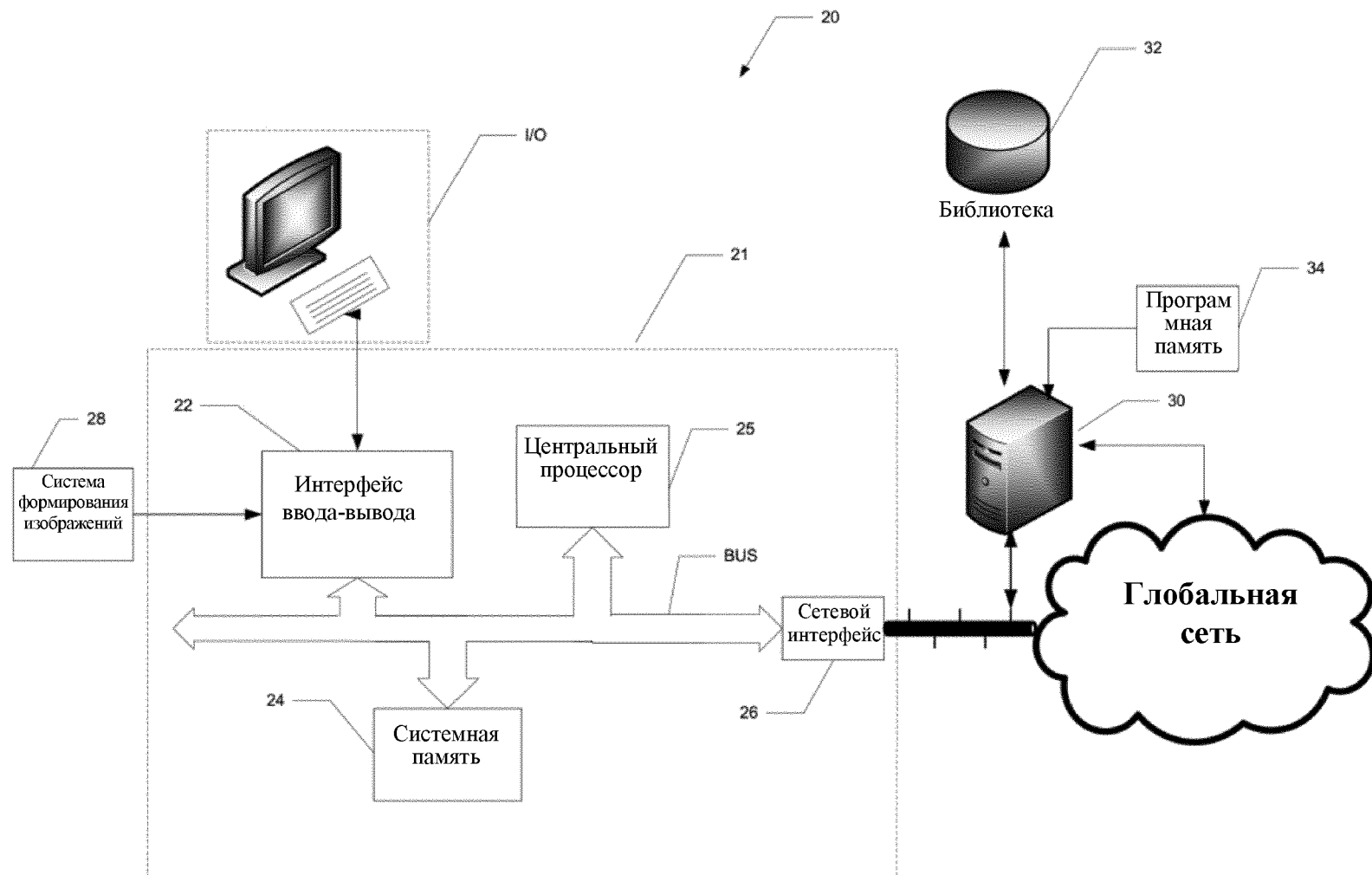
множества молекул воды, расположенных в межслойном пространстве;

назначение параметров силового поля молекулярному представлению в сочетании с граничными условиями, соответствующими выбранному давлению и температуре глинистого минерала;

выполнение моделирования методом молекулярной динамики уравнений движения за интервал времени моделирования для определения координат положения противоионов в представлении во множестве моментов времени за интервал времени моделирования;

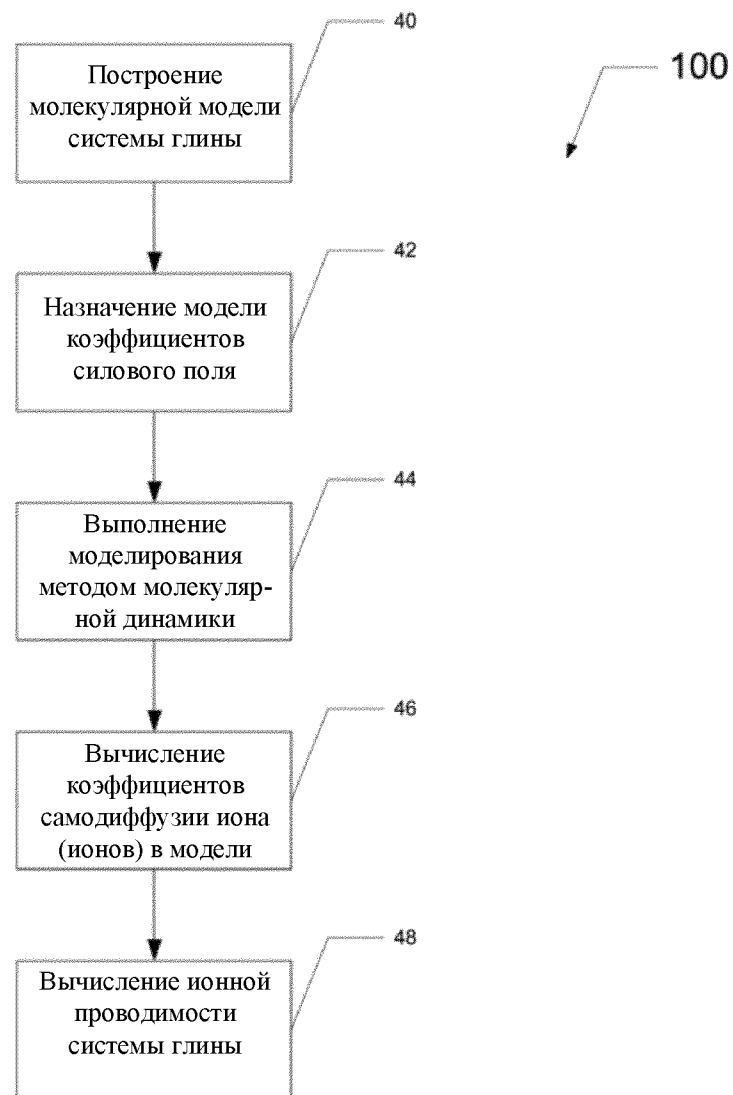
вычисление на основании координат положения во множестве моментов времени коэффициентов самодиффузии для одного или нескольких видов противоионов и

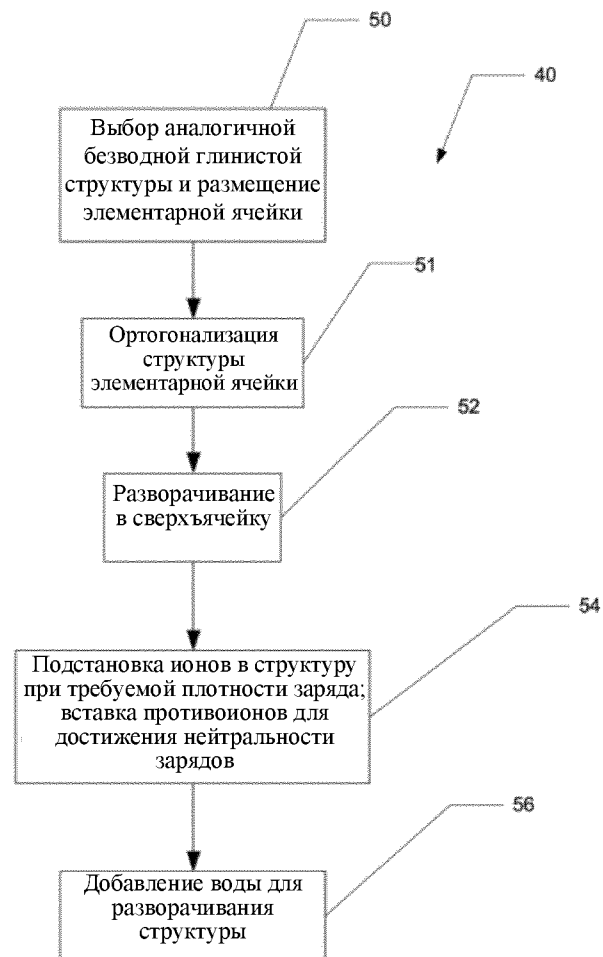
затем вычисление ионной проводимости для вида противоионов из коэффициентов самодиффузии.



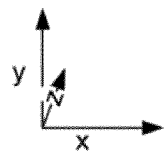
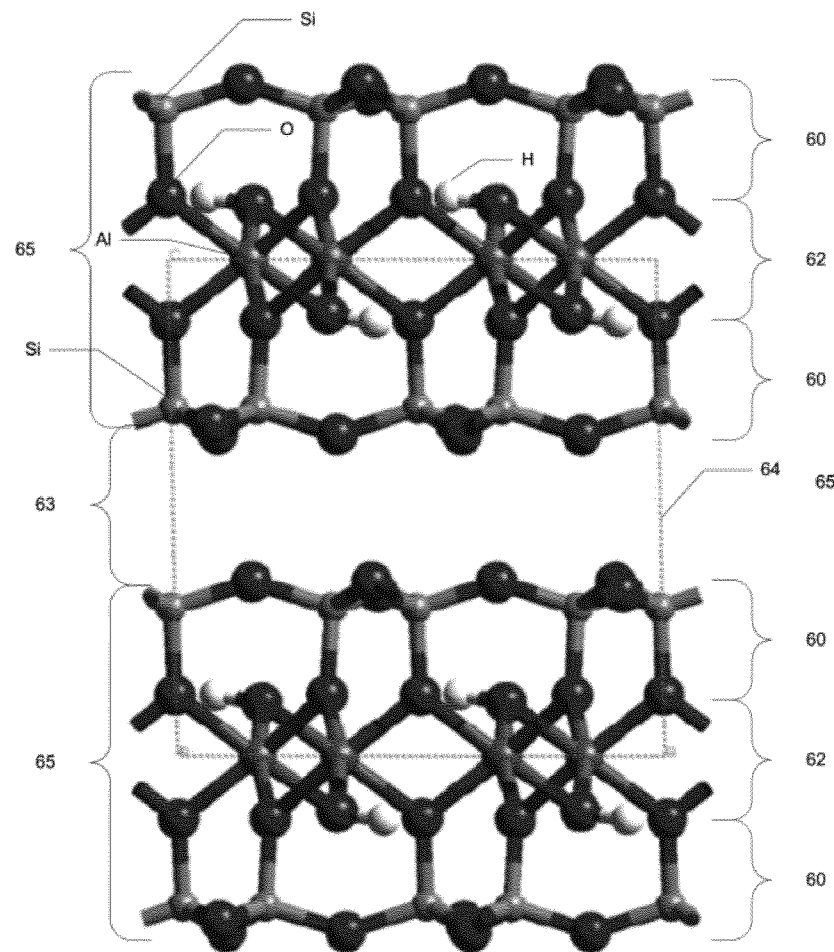
Фиг. 1

Фиг. 2

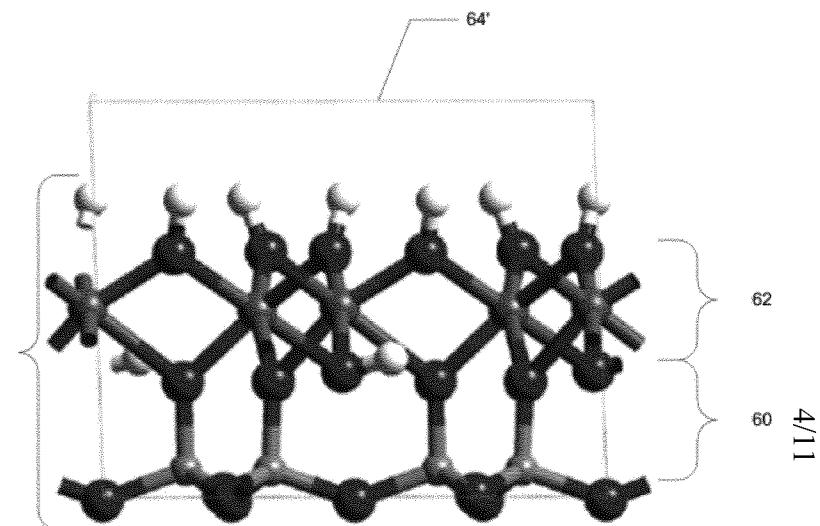




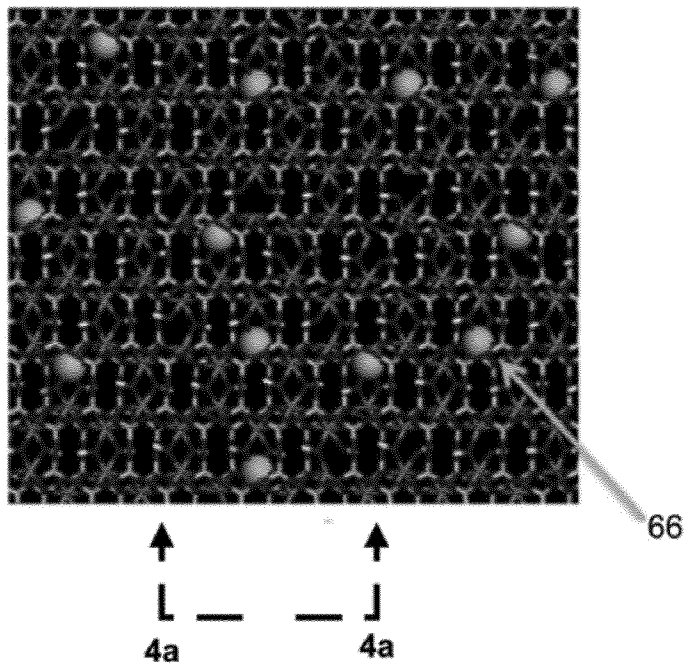
Фиг. 3



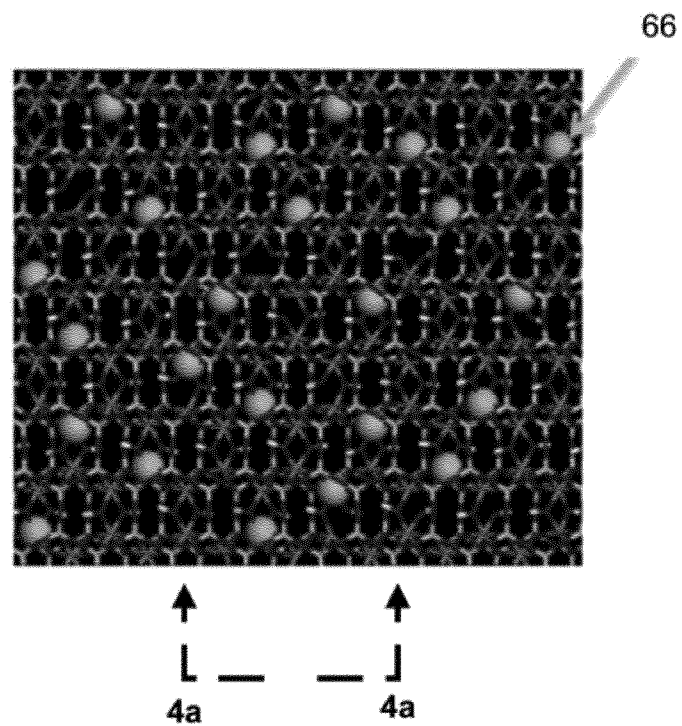
Фиг. 4а



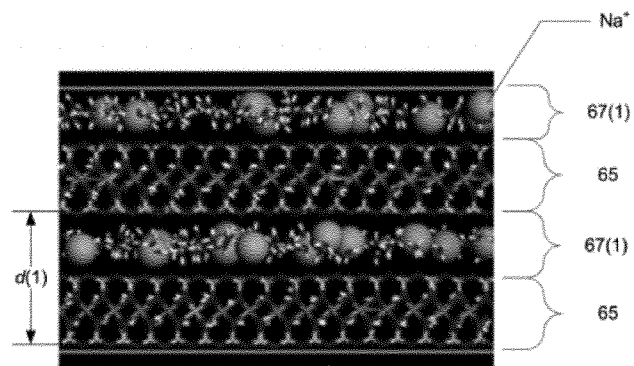
Фиг. 4б



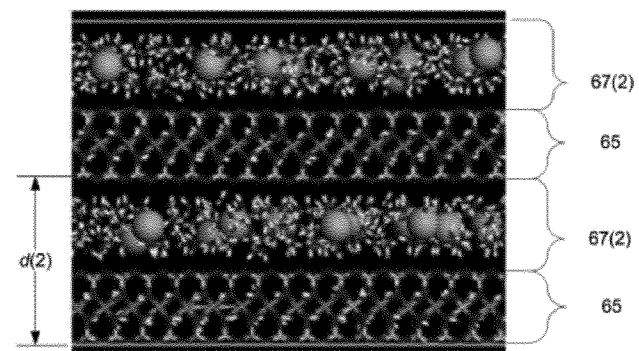
Фиг. 4с



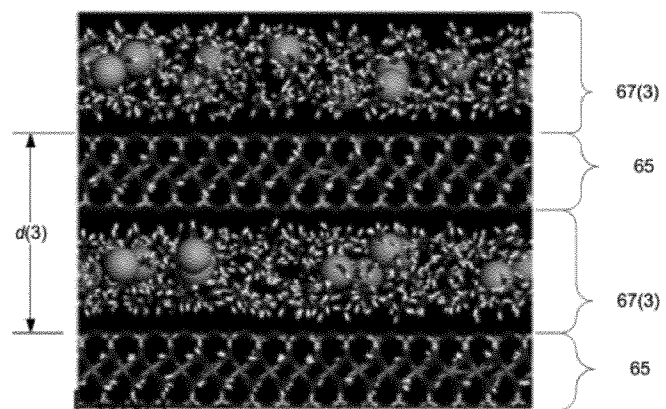
Фиг. 4d



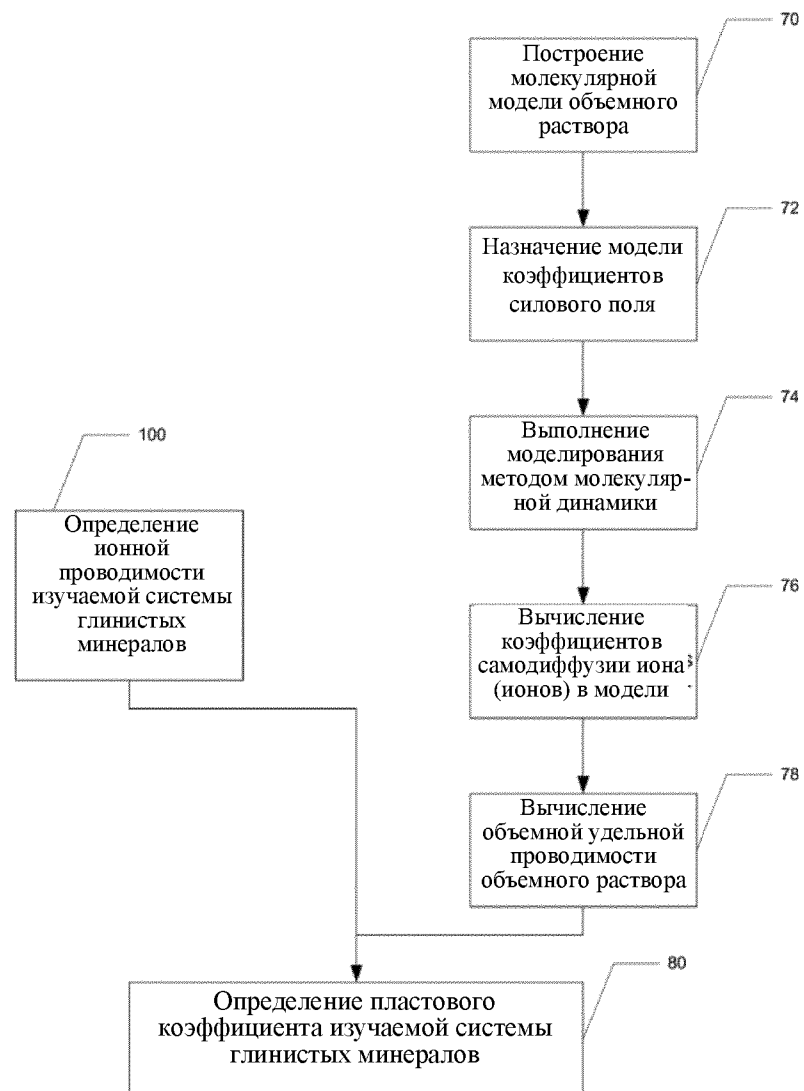
Фиг. 4е



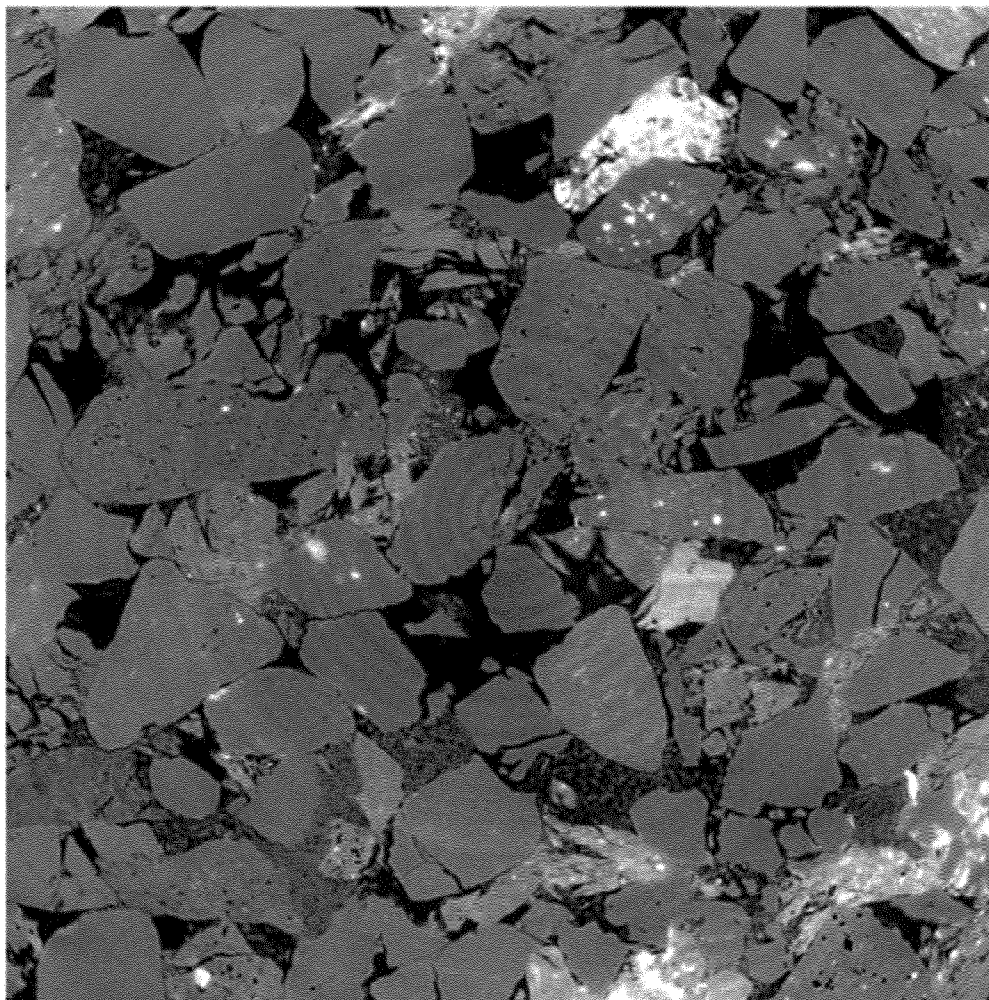
Фиг. 4f



Фиг. 4g

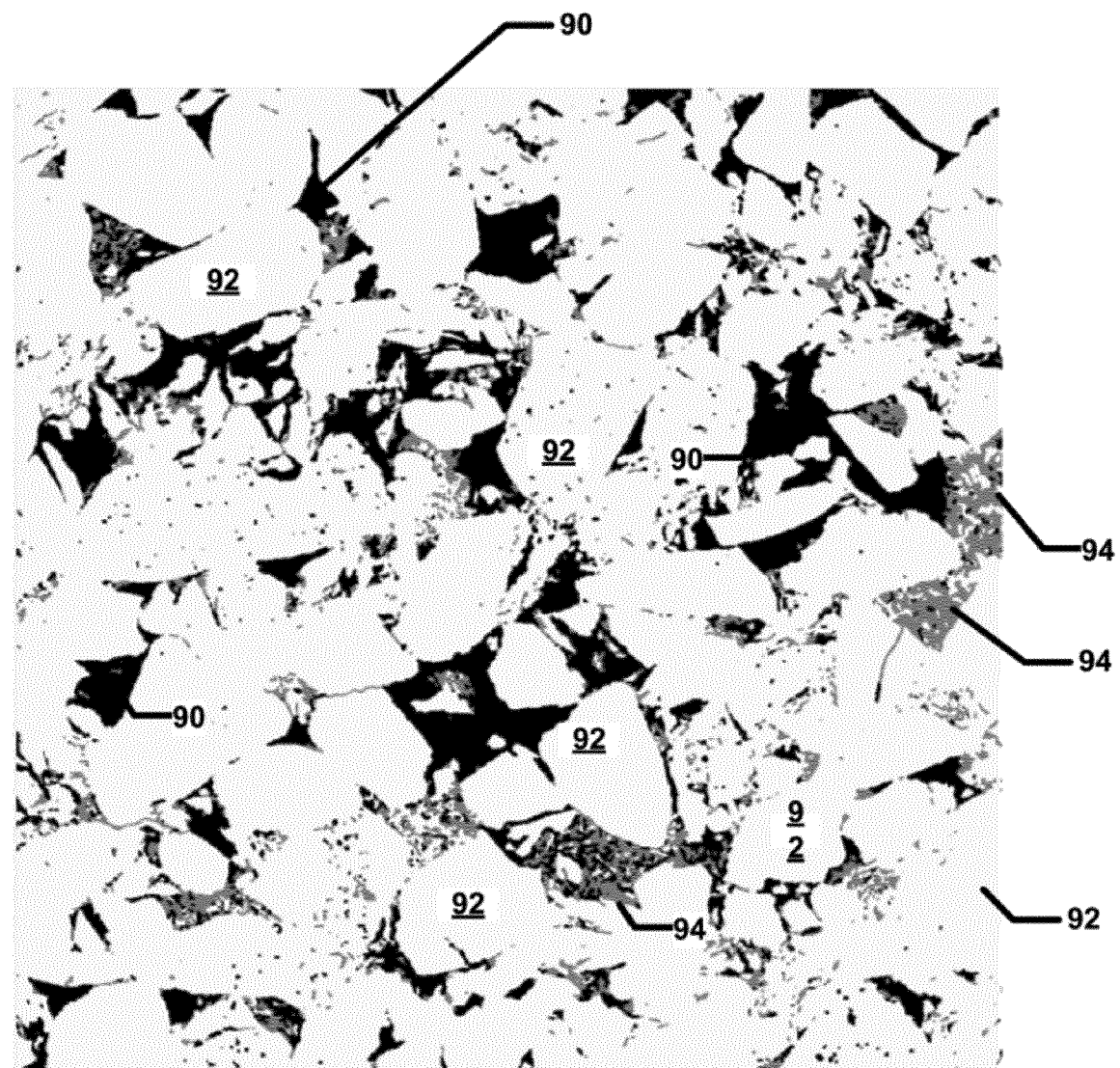


Фиг. 5

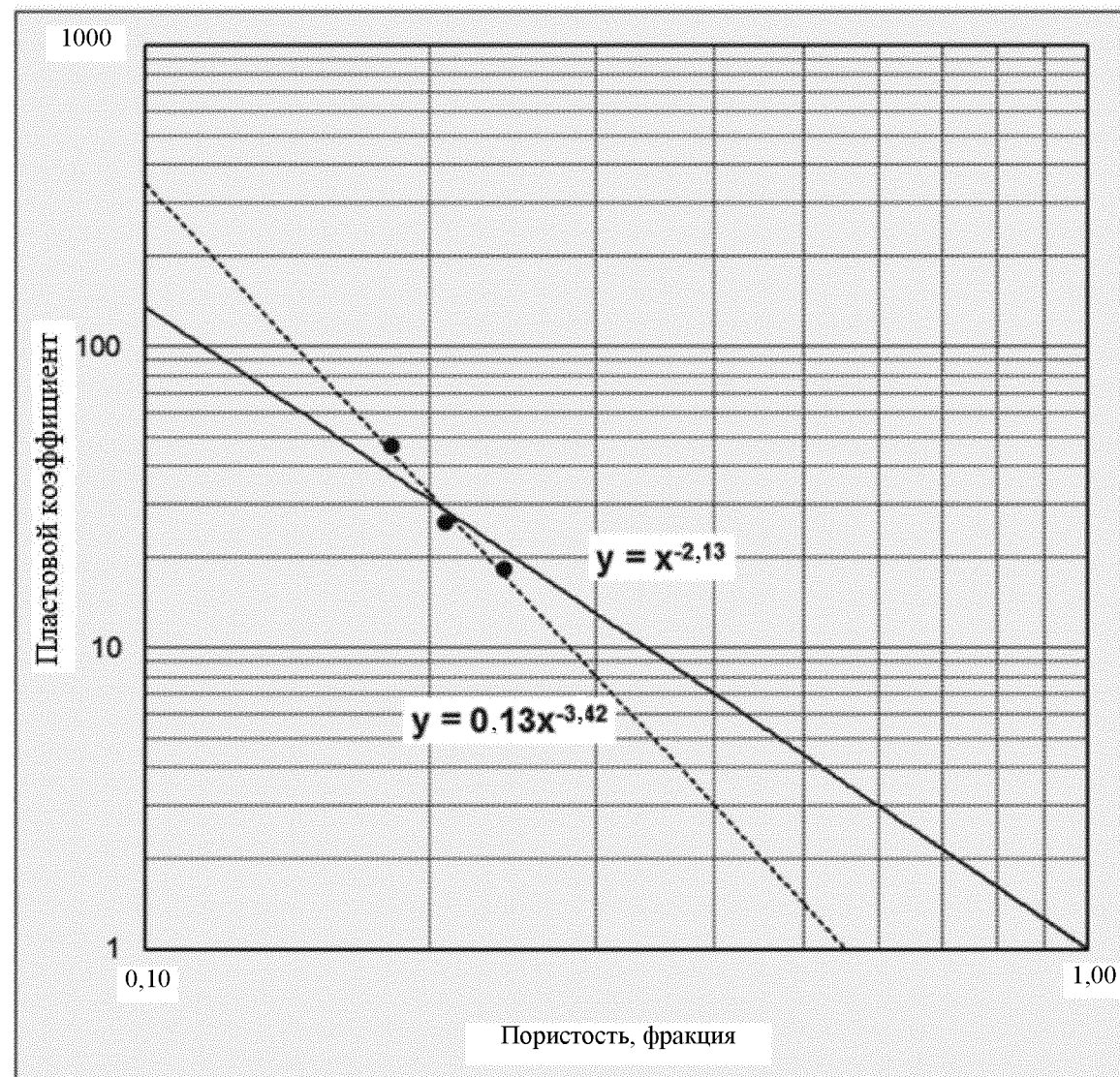


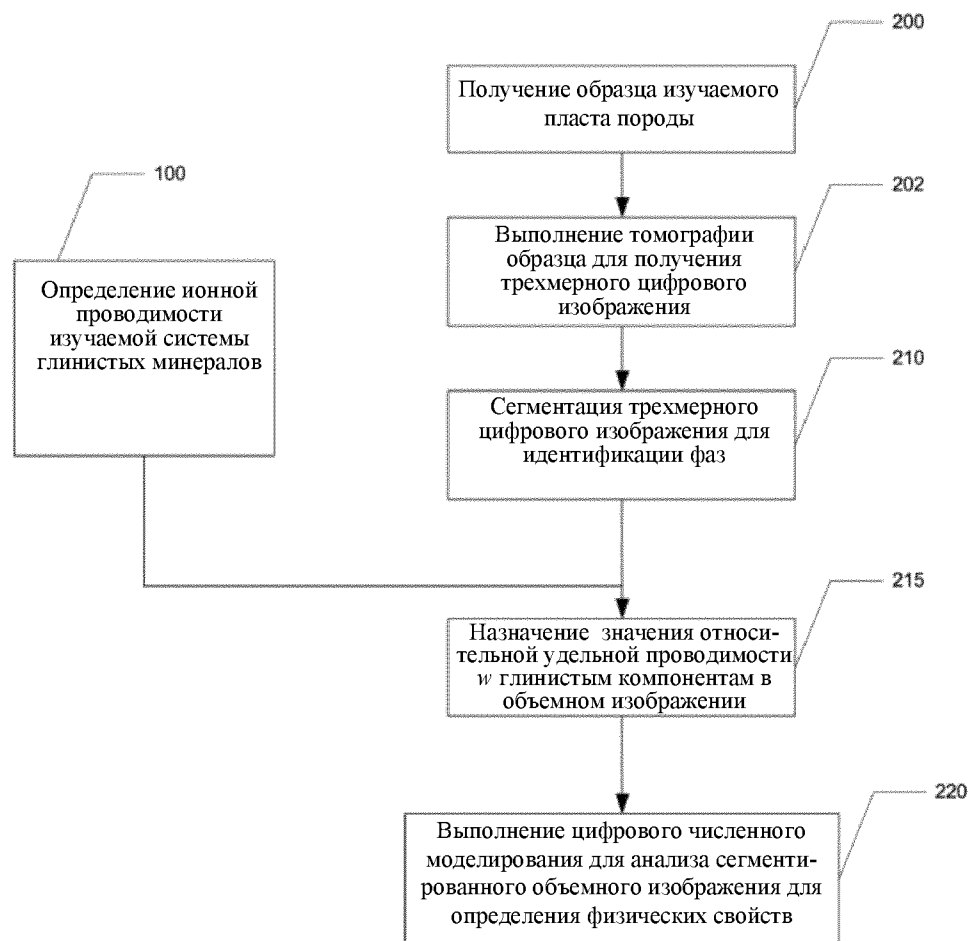
Фиг. 6а

Фиг. 6b



Фиг. 6с





Фиг. 7

PATENT COOPERATION TREATY

From the
INTERNATIONAL SEARCHING AUTHORITY

PCT

To:

see form PCT/ISA/220

WRITTEN OPINION OF THE INTERNATIONAL SEARCHING AUTHORITY (PCT Rule 43bis.1)

Date of mailing
(day/month/year) see form PCT/ISA/210 (second sheet)

Applicant's or agent's file reference
see form PCT/ISA/220

FOR FURTHER ACTION
See paragraph 2 below

International application No.
PCT/US2015/063576

International filing date (day/month/year)
03.12.2015

Priority date (day/month/year)
10.12.2014

International Patent Classification (IPC) or both national classification and IPC
INV. G06F19/00 ADD. G01N33/24

Applicant
BP CORPORATION NORTH AMERICA INC.

1. This opinion contains indications relating to the following items:

- ☒ Box No. I Basis of the opinion
- ☐ Box No. II Priority
- ☐ Box No. III Non-establishment of opinion with regard to novelty, inventive step and industrial applicability
- ☒ Box No. IV Lack of unity of invention
- ☒ Box No. V Reasoned statement under Rule 43bis.1(a)(i) with regard to novelty, inventive step and industrial applicability; citations and explanations supporting such statement
- ☐ Box No. VI Certain documents cited
- ☐ Box No. VII Certain defects in the international application
- ☒ Box No. VIII Certain observations on the international application

2. FURTHER ACTION

If a demand for international preliminary examination is made, this opinion will usually be considered to be a written opinion of the International Preliminary Examining Authority ("IPEA") except that this does not apply where the applicant chooses an Authority other than this one to be the IPEA and the chosen IPEA has notified the International Bureau under Rule 66.1bis(b) that written opinions of this International Searching Authority will not be so considered.

If this opinion is, as provided above, considered to be a written opinion of the IPEA, the applicant is invited to submit to the IPEA a written reply together, where appropriate, with amendments, before the expiration of 3 months from the date of mailing of Form PCT/ISA/220 or before the expiration of 22 months from the priority date, whichever expires later.

For further options, see Form PCT/ISA/220.

Name and mailing address of the ISA:



European Patent Office
P.B. 5818 Patentlaan 2
NL-2280 HV Rijswijk - Pays Bas
Tel. +31 70 340 - 2040
Fax: +31 70 340 - 3016

Date of completion of
this opinion

see form
PCT/ISA/210

Authorized Officer

Godzina, Przemyslaw

Telephone No. +31 70 340-0



Box No. I Basis of the opinion

1. With regard to the **language**, this opinion has been established on the basis of:
 - ☒ the international application in the language in which it was filed.
 - ☐ a translation of the international application into , which is the language of a translation furnished for the purposes of international search (Rules 12.3(a) and 23.1 (b)).
2. ☐ This opinion has been established taking into account the **rectification of an obvious mistake** authorized by or notified to this Authority under Rule 91 (Rule 43bis.1(a))
3. ☐ With regard to any **nucleotide and/or amino acid sequence** disclosed in the international application, this opinion has been established on the basis of a sequence listing:
 - a. ☐ forming part of the international application as filed:
 - ☐ in the form of an Annex C/ST.25 text file.
 - ☐ on paper or in the form of an image file.
 - b. ☐ furnished together with the international application under PCT Rule 13ter.1(a) for the purposes of international search only in the form of an Annex C/ST.25 text file.
 - c. ☐ furnished subsequent to the international filing date for the purposes of international search only:
 - ☐ in the form of an Annex C/ST.25 text file (Rule 13ter.1(a)).
 - ☐ on paper or in the form of an image file (Rule 13ter.1(b) and Administrative Instructions, Section 713).
4. ☐ In addition, in the case that more than one version or copy of a sequence listing has been filed or furnished, the required statements that the information in the subsequent or additional copies is identical to that forming part of the application as filed or does not go beyond the application as filed, as appropriate, were furnished.
5. Additional comments:

Box No. IV Lack of unity of invention

1. ☒ In response to the invitation (Form PCT/ISA/206) to pay additional fees, the applicant has, within the applicable time limit:
- ☒ paid additional fees
 - ☐ paid additional fees under protest and, where applicable, the protest fee
 - ☐ paid additional fees under protest but the applicable protest fee was not paid
 - ☐ not paid additional fees
2. ☐ This Authority found that the requirement of unity of invention is not complied with and chose not to invite the applicant to pay additional fees.
3. This Authority considers that the requirement of unity of invention in accordance with Rule 13.1, 13.2 and 13.3 is
- ☐ complied with
 - ☒ not complied with for the following reasons:
see separate sheet
4. Consequently, this report has been established in respect of the following parts of the international application:
- ☒ all parts.
 - ☐ the parts relating to claims Nos.

Box No. V Reasoned statement under Rule 43bis.1(a)(i) with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement

1. Statement

Novelty (N)	Yes: Claims	<u>1-11, 13, 14, 16-18, 20-22</u>
	No: Claims	<u>12, 15, 19</u>
Inventive step (IS)	Yes: Claims	<u>17, 18, 21, 22</u>
	No: Claims	<u>1-16, 19, 20</u>
Industrial applicability (IA)	Yes: Claims	<u>1-22</u>
	No: Claims	

2. Citations and explanations

see separate sheet

**WRITTEN OPINION OF THE
INTERNATIONAL SEARCHING AUTHORITY**

International application No.
PCT/US2015/063576

Box No. VIII Certain observations on the international application

The following observations on the clarity of the claims, description, and drawings or on the question whether the claims are fully supported by the description, are made:

see separate sheet

Reference is made to the following documents:

- D1: Greenwell H. C. *et al.* (2005) "On the application of computer simulation techniques to anionic and cationic clays: A materials chemistry perspective", JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY, vol. 16, no. 8, pages 708-723, (XP055268102)
- D2: Boulet P. *et al.* (2006) "Recent advances in understanding the structure and reactivity of clays using electronic structure calculations", JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE (THEOCHEM), vol. 762, no. 1-3, pages 33-48, (XP027892867)
- D3: Cygan R. T. *et al.* (2004) "Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field", JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY PART B: CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL, vol. 108, no. 4, pages 1255-1266, (XP055267808)
- D4: Okamoto M. *et al.* (2001) "Dispersed structure and ionic conductivity of smectic clay/polymer nanocomposites", POLYMER, vol. 42, no. 6, pages 2685-2688, (XP004223293)
- D5: Chou Chang F-R. *et al.* (1998) "Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations of Electrical Double-Layer Structure in Potassium-Montmorillonite Hydrates", LANGMUIR, vol. 14, no. 5, pages 1201-1207, (XP055268203)
- D6: Arns C. H. *et al.* (2001) "Accurate estimation of transport properties from microtomographic images", Geophysical Research Letters, vol. 28, no. 1, pages 3361-3364, (XP055304653)
- D7: Arns J-Y. *et al.* (2003) "Relative permeability from tomographic images; effect of correlated heterogeneity", Journal of Petroleum Science and Engineering, vol. 39, no. 3-4, pages 247-259, (XP055292196)
- D8: Keller T. *et al.* (2012) "An interdisciplinary approach towards improved understanding of soil deformation during compaction", Soil and Tillage Research, vol. 128, pages 61-80, (XP028969883)
- D9: Churakov S. V. *et al.* (2011) "Up-Scaling of Molecular Diffusion Coefficients in Clays: A Two-Step Approach", Journal of Physical Chemistry C, vol. 115, no. 14, pages 6703-6714, (XP055307190)

Re Item IV

Lack of unity of invention

- 1 This Authority considers that the application does not meet the requirements of unity of invention and that there are three inventions covered by the claims indicated as follows:

Invention I (claims 1-11):

A method of operating a computer system to calculate electrical conductivity in a clay mineral.

Invention II (claims 12-16, 19, 20):

A method of analyzing a rock sample comprising a clay component and a system for doing the same.

Invention III (claims 17, 18, 21, 22):

A method of operating a computer to calculate a formation factor for a rock system comprising a clay mineral and a system for doing the same.

- 1.1 The reasons for which the inventions are not so linked as to form a single general inventive concept, as required by Rule 13.1 PCT, are as follows:

The prior art has been identified as D4 and discloses (abstract):
a conductivity in a clay.

It is reminded that an international patent application shall relate to one invention only or to a group of inventions so linked as to form a single general inventive concept (R. 13.1 PCT). However, it appears that the common concept linking claims 1-22, namely a conductivity in a clay, is known from the prior art. Therefore, it is considered that the above-mentioned inventions are not so linked as to form a single inventive concept (R. 13.1 PCT) and lack of unity arises.

Re Item V

Reasoned statement with regard to novelty, inventive step or industrial applicability; citations and explanations supporting such statement

Invention I (claims 1-11)

- 2 The present application does not meet the criteria of Article 33(3) PCT, because the subject-matter of claim(s) 1-11 does not involve an inventive step.

- 2.1 D1 is regarded as being the prior art closest to the subject-matter of claim 1, and discloses (abstract, paragraphs 4.2.2., 5.-5.1.1., Fig. 5, 6):

A method of operating a computer system to calculate a property of electrical conductivity in a clay mineral, comprising the steps of:

constructing a molecular representation of a clay mineral, comprised of:

an anhydrous structure of atoms arranged in a plurality of parallel layers, the anhydrous structure including substitution sites in place of metal atoms in the structure at a concentration corresponding to a selected charge density;

counterions of at least one species disposed in an interlayer space between layers of the anhydrous structure, at a concentration corresponding to the selected charge density; and

a plurality of water molecules disposed in the interlayer space;

assigning force field parameters to the molecular representation in combination with boundary conditions corresponding to a selected pressure and temperature condition of the clay mineral;

then operating the computer system to perform a molecular dynamics simulation of equations of motion over a simulation time interval, to determine positional coordinates of counterions in the representation at a plurality of times during the simulation time interval;

~~from the positional coordinates at the plurality of times, calculating self-diffusion coefficients for one or more of the species of counterions; and~~

~~then calculating a property of the clay mineral ion conductivities for a species of counterions from the self-diffusion coefficients.~~

- 2.2 The subject-matter of claim 1 therefore differs from this known from D1 in that in particular a property of electrical conductivity in a clay mineral is calculated.

- 2.3 However, the feature of calculating electrical conductivity as an exemplary property is merely one of several straightforward possibilities from which the skilled person would select, in accordance with circumstances, without the exercise of inventive skill.

Indeed, the concept of examining the correlation between internal structure and electrical conductivity in a clay mineral is well known in the prior art (see, e.g., D2 - paragraph 2.2. and D4 - abstract).

Therefore, the subject-matter of claim 1 of the present application cannot be considered as involving an inventive step (Art. 33(3) PCT).

- 2.4 Dependent claims 2-11 do not contain any features which, in combination with the features of any claim to which they refer, meet the requirements of the PCT in respect of inventive step (see D1-D5 in their entirety, Art. 33(3) PCT).

Invention II (claims 12-16, 19, 20)

- 3 The present application does not meet the criteria of Article 33(1) PCT, because the subject-matter of claims 12-16, 19 and 20 is not new and/or not inventive (Art. 33(2) and/or 33(3) PCT).

- 3.1 D6 discloses (abstract, p. 3361, right-hand col., l. 35 - p. 3363, left-hand col., l. 20 beginning with "*A microstructure defined by a digital ...*", Fig. 1):

A method of analyzing a rock sample comprising a clay component, comprising:

estimating the conductivity of a clay component in the rock sample;

segmenting a digital image volume corresponding to one or more tomographic images of the rock sample, to associate voxels in the digital image volume with pore space, solid material, or the clay component; and

assigning a relative conductivity value to voxels corresponding to the clay component relative to the conductivity of a fluid occupying the pore space of the sample; and

then numerically analyzing a representation of the digital image volume to characterize a material property of the rock sample.

Therefore, the subject-matter of claim 12 is not new (Art. 33(2) PCT).

- 3.2 As the subject-matter of independent system claim 19 corresponds to the subject-matter of independent method claim 12, it also lacks novelty (Art. 33(2) PCT) for the same reasons as mentioned in paragraph 3.1 above.

- 3.3 Dependent claims 13-16 and 20 do not contain any features which, in combination with the features of any claim to which they refer, meet the requirements of the PCT in respect of novelty and/or inventive step (see D6-D8, passages cited in the search report, Art. 33(2) and/or 33(3) PCT).

Invention III (claims 17, 18, 21, 22)

- 4 The present application, as far as can be understood in light of clarity objections set forth in Re Item VIII below (see paragraphs 5.5 and 5.6), meets the criteria of Article 33(1) PCT, because the subject-matter of claims 17, 18, 21 and 22 is new and inventive in the sense of Article 33(2) PCT and 33(3) PCT, respectively.

- 4.1 D9 is regarded as being the prior art closest to the subject-matter of claim 17, and discloses (the references in parentheses applying to this document):

A method of operating a computer to calculate a formation factor for a rock system comprising a clay mineral (p. 6703, left-hand col., l. 2-9; Table 4; p. 6710, left-hand col., l. 33-37), comprising the steps of:

constructing a model representation of a molecular fluid system (Figure 1), comprising:

a plurality of unit cells of the molecular fluid populating a selected volume (Figure 1); and

interstitial ions located disposed in the volume ~~at a concentration corresponding to a selected charge density~~ (p. 6704, right-hand col., l. 11-15);

assigning force field parameters to the model representation (implicit);

then operating the computer system to perform a molecular dynamics simulation of the equations of motion over a selected time duration, to determine positional coordinates of a plurality of species in the model representation at a plurality of times in the time duration (p. 6705, left-hand col., l. 26-43);

from the positional coordinates at the plurality of times, calculating ~~self-~~diffusion coefficients for one or more of the species (abstract; p. 6704, left-hand col., l. 60 - right-hand col., l. 15);

~~then calculating bulk conductivity of the molecular fluid system from the self-diffusion coefficients;~~

~~determining an ion conductivity for the clay mineral; and~~

then calculating the formation factor ~~as a ratio of the bulk conductivity of the molecular fluid system to the ion conductivity for the clay mineral~~ (p. 6710, left-hand col., l. 33-37).

Therefore, the subject-matter of claim 17 is new (Art. 33(2) PCT).

The subject-matter of claim 17 differs from this known from D9 in the following features:

- (i) interstitial ions, being a part of the constructed computational model, are at a concentration corresponding to a selected charge density;
- (ii) self-diffusion coefficients for one or more of the species of the model are calculated;
- (iii) bulk conductivity of the molecular fluid system from the self-diffusion coefficients are calculated;
- (iv) the ion conductivity for the clay mineral is determined;
- (v) the formation factor is calculated as a ratio of the bulk conductivity of the molecular fluid system to the ion conductivity for the clay mineral.

The problem to be solved by the present invention may be regarded as how to alternatively calculate, applying the molecular dynamics approach, a formation factor for a rock system comprising a clay mineral.

The problem is solved by (i) disposing interstitial ions located in the volume of the model of a molecular fluid system at a concentration corresponding to a selected charge density; (ii) calculating self-diffusion coefficients for one or more of the species of the model; (iii) calculating bulk conductivity of the molecular fluid system from the self-diffusion coefficients; (iv) determining the ion conductivity for the clay mineral; and (v) calculating the formation factor as a ratio of the bulk conductivity of the molecular fluid system to the ion conductivity for the clay mineral.

None of the prior art documents discloses, nor even suggests such a solution to the problem set forth in the paragraph above.

As a consequence, claim 17 meets the requirements of the PCT with respect to novelty (Art. 33(2) PCT) and inventive step (Art. 33(3) PCT).

- 4.2 The subject-matter of independent system claim 21 partially corresponds to the subject-matter of independent method claim 17. The characterising feature of claim 21, which is not reflected in claim 17 is an imaging system configured to produce a digital image of a material sample.

In this case D9 is also regarded as being the closest prior art and following the reasoning set forth in paragraph 4.1 above, with a slight modification due to considering the additional feature of the imaging system, it is stated that the subject-matter of claim 21 appears to be novel and inventive (Art. 33(2) and 33(3) PCT).

- 4.3 Claims 18 and 22 are dependent on claim 17 and 21, respectively and as such also meet the requirements of the PCT with respect to novelty and inventive step.

Re Item VIII

Certain observations on the international application

- 5 The application does not meet the requirements of Article 6 PCT, because at least claims 1, 12, 17 and 21 are not clear.

Invention I

- 5.1 The formulation "*from the positional coordinates at the plurality of times*" used in at least in claim 1 is unclear since an object/objects described by the positional coordinates remains/remains vague.

Invention II

- 5.2 It is clear from the description in paragraphs [0031]-[0035] that the following features are essential to the definition of the invention:

a computer-implemented method.

Since independent claim 12 does not contain this feature it does not meet the requirement following from Article 6 PCT taken in combination with Rule 6.3(b) PCT that any independent claim must contain all the technical features essential to the definition of the invention.

- 5.3 The terms "*conductivity*" and "*relative conductivity*" used in at least claim 12 are vague and unclear and leave the reader in doubt as to the meaning of the technical features to which they refer, thereby rendering the definition of the subject-matter of said claims unclear. Indeed, the technical difference between these two terms is unclear.

- 5.4 Claim 12 does not meet the requirements of Article 6 PCT because the matter for which protection is sought is not clearly defined. The claim attempts partially to define the subject-matter in terms of the result to be achieved, which merely amounts to a statement of the underlying problem, without providing the technical features necessary for achieving this result.

Indeed, it is not clear how exactly a representation of the digital image volume is analysed.

Invention III

- 5.5 The terms "*fluid*" and "*species*" used in at least claim 17 have very broad meanings and, therefore, are vague and unclear and leave the reader in doubt as to the meaning of the technical features to which they refer, thereby rendering the definition of the subject-matter of said claim unclear.
- 5.6 The characterising features of claim 21 do not correspond to the characterising features of claim 17 and, therefore, the scope of protection of claim 21 is not clear.

PATENT COOPERATION TREATY

PCT

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

(PCT Article 18 and Rules 43 and 44)

Applicant's or agent's file reference 500572 PCT	FOR FURTHER ACTION see Form PCT/ISA/220 as well as, where applicable, item 5 below.	
International application No. PCT/US2015/063576	International filing date (<i>day/month/year</i>) 3 December 2015 (03-12-2015)	(Earliest) Priority Date (<i>day/month/year</i>) 10 December 2014 (10-12-2014)
Applicant BP CORPORATION NORTH AMERICA INC.		

This international search report has been prepared by this International Searching Authority and is transmitted to the applicant according to Article 18. A copy is being transmitted to the International Bureau.

This international search report consists of a total of 8 sheets.

☒ It is also accompanied by a copy of each prior art document cited in this report.

1. Basis of the report

a. With regard to the **language**, the international search was carried out on the basis of:

- ☒ the international application in the language in which it was filed
- ☐ a translation of the international application into _____, which is the language of a translation furnished for the purposes of international search (Rules 12.3(a) and 23.1(b))

b. ☐ This international search report has been established taking into account the **rectification of an obvious mistake** authorized by or notified to this Authority under Rule 91 (Rule 43.6**bis**(a)).

c. ☐ With regard to any **nucleotide and/or amino acid sequence** disclosed in the international application, see Box No. I.

2. ☐ **Certain claims were found unsearchable** (See Box No. II)

3. ☒ **Unity of invention is lacking** (see Box No III)

4. With regard to the **title**,

- ☒ the text is approved as submitted by the applicant
- ☐ the text has been established by this Authority to read as follows:

5. With regard to the **abstract**,

- ☒ the text is approved as submitted by the applicant
- ☐ the text has been established, according to Rule 38.2, by this Authority as it appears in Box No. IV. The applicant may, within one month from the date of mailing of this international search report, submit comments to this Authority

6. With regard to the **drawings**,

- a. the figure of the **drawings** to be published with the abstract is Figure No. 1
- ☒ as suggested by the applicant
- ☐ as selected by this Authority, because the applicant failed to suggest a figure
- ☐ as selected by this Authority, because this figure better characterizes the invention
- b. ☐ none of the figures is to be published with the abstract

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/US2015/063576

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:
2. ☐ Claims Nos.:
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:
3. ☐ Claims Nos.:
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

see additional sheet

1. ☒ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:
4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
- ☒ No protest accompanied the payment of additional search fees.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/US2015/063576

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. G06F19/00
ADD. G01N33/24

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
G06F

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

EPO-Internal, INSPEC, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	GREENWELL H. C. ET AL: "On the application of computer simulation techniques to anionic and cationic clays: A materials chemistry perspective", JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY, vol. 16, no. 8, 14 October 2005 (2005-10-14), pages 708-723, XP055268102, GB ISSN: 0959-9428, DOI: 10.1039/B506932G the whole document ----- -/-	1-11



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents :

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

12 October 2016

Date of mailing of the international search report

21/10/2016

Name and mailing address of the ISA/

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Godzina, Przemysław

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/US2015/063576

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	BOULET P. ET AL: "Recent advances in understanding the structure and reactivity of clays using electronic structure calculations", JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE (THEOCHEM), ELSEVIER SCIENCE PUBLISHERS B.V., AMSTERDAM, NL, vol. 762, no. 1-3, 2 April 2006 (2006-04-02), pages 33-48, XP027892867, ISSN: 0166-1280 [retrieved on 2006-04-02] the whole document	1-11
A	----- CYGAN R. T. ET AL: "Molecular Models of Hydroxide, Oxyhydroxide, and Clay Phases and the Development of a General Force Field", JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY PART B: CONDENSED MATTER, MATERIALS, SURFACES, INTERFACES & BIOPHYSICAL, vol. 108, no. 4, 1 January 2004 (2004-01-01), pages 1255-1266, XP055267808, US ISSN: 1520-6106, DOI: 10.1021/jp0363287 the whole document	1-11
A	----- OKAMOTO M. ET AL: "Dispersed structure and ionic conductivity of smectic clay/polymer nanocomposites", POLYMER, ELSEVIER SCIENCE PUBLISHERS B.V, GB, vol. 42, no. 6, 1 March 2001 (2001-03-01), pages 2685-2688, XP004223293, ISSN: 0032-3861, DOI: 10.1016/S0032-3861(00)00642-X the whole document	1
A	----- CHOU CHANG F-R. ET AL: "Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations of Electrical Double-Layer Structure in Potassium-Montmorillonite Hydrates", LANGMUIR, vol. 14, no. 5, 10 February 1998 (1998-02-10), pages 1201-1207, XP055268203, US ISSN: 0743-7463, DOI: 10.1021/la9704720 the whole document ----- -/--	1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/US2015/063576

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	CLÉROUIN J. ET AL: "Electrical conductivity and equation-of-state study of warm dense copper: Measurements and quantum molecular dynamics calculations", PHYSICAL REVIEW. B, CONDENSED MATTER AND MATERIALS PHYSICS, vol. 71, no. 6, 1 February 2005 (2005-02-01), XP055267830, US ISSN: 1098-0121, DOI: 10.1103/PhysRevB.71.064203 the whole document	1-11
X	----- ARNS C. H. ET AL: "Accurate estimation of transport properties from microtomographic images", GEOPHYSICAL RESEARCH LETTERS, vol. 28, no. 1, 1 September 2001 (2001-09-01), pages 3361-3364, XP055304653, abstract page 3361, right-hand column, line 35 - page 3363, left-hand column, line 20	12-16, 19,20
X	----- ARNS J-Y. ET AL: "Relative permeability from tomographic images; effect of correlated heterogeneity", JOURNAL OF PETROLEUM SCIENCE AND ENGINEERING, vol. 39, no. 3-4, 1 September 2003 (2003-09-01), pages 247-259, XP055292196, NL ISSN: 0920-4105, DOI: 10.1016/S0920-4105(03)00066-4 the whole document	12-16, 19,20
X	----- KELLER T. ET AL: "An interdisciplinary approach towards improved understanding of soil deformation during compaction", SOIL AND TILLAGE RESEARCH, ELSEVIER, AMSTERDAM, NL, vol. 128, 7 December 2012 (2012-12-07), pages 61-80, XP028969883, ISSN: 0167-1987, DOI: 10.1016/J.STILL.2012.10.004 paragraph [2.3.1.] paragraph [3.3.] paragraph [4.1.] ----- -/--	12-16, 19,20

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/US2015/063576

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	CHURAKOV S. V. ET AL: "Up-Scaling of Molecular Diffusion Coefficients in Clays: A Two-Step Approach", JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, vol. 115, no. 14, 10 March 2011 (2011-03-10), pages 6703-6714, XP055307190, US ISSN: 1932-7447, DOI: 10.1021/jp112325n the whole document	17,18, 21,22
A	----- REVIL A. ET AL: "Constitutive equations for ionic transport in porous shales", JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH AMERICAN GEOPHYS. UNION USA, vol. 109, no. B3, 10 March 2004 (2004-03-10), page 19 pp., XP002760372, ISSN: 0148-0227 the whole document	17,18, 21,22
A	----- HORT R. D. ET AL: "Analysis of sources of bulk conductivity change in saturated silica sand after unbuffered TCE oxidation by permanganate", CONTAMINANT HYDROLOGY, ELSEVIER, AMSTERDAM, NL, vol. 165, 15 July 2014 (2014-07-15), pages 11-23, XP029046201, ISSN: 0169-7722, DOI: 10.1016/J.JCONHYD.2014.07.003 page 12, right-hand column, line 41 - page 13, left-hand column, line 3 figures 3,4 table 3	17,18, 21,22
A	----- SEN P. N. ET AL: "Formation factor of carbonate rocks with microporosity: model calculations", JOURNAL OF PETROLEUM SCIENCE AND ENGINEERING, vol. 17, no. 3-4, 1 May 1997 (1997-05-01), pages 345-352, XP055306410, NL ISSN: 0920-4105, DOI: 10.1016/S0920-4105(96)00005-8 the whole document	17,18, 21,22
	----- -/--	

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	DUFEY J. E. ET AL: "Selfdiffusion of anions in clay gels", ANALYTICAL SCIENCES, THE JAPAN SOCIETY FOR ANALYTICAL CHEMISTRY, US, vol. 51, no. 2, 1 May 1975 (1975-05-01), pages 278-282, XP024187356, ISSN: 0021-9797, DOI: 10.1016/0021-9797(75)90114-9 [retrieved on 1975-05-01] page 278, left-hand column, line 26- - right-hand column, line 6 -----	17,18, 21,22
A	BENNING J. L. ET AL: "The effects of scale and spatial heterogeneities on diffusion in volcanic breccias and basalts: Amchitka Island, Alaska", CONTAMINANT HYDROLOGY, ELSEVIER, AMSTERDAM, NL, vol. 106, no. 3-4, 12 May 2009 (2009-05-12), pages 150-165, XP026018658, ISSN: 0169-7722, DOI: 10.1016/J.JCONHYD.2009.02.005 [retrieved on 2009-02-21] the whole document -----	17,18, 21,22
A	LÖFGREN M. ET AL: "Formation factor logging by electrical methods. Comparison of formation factor logs obtained in situ and in the laboratory", CONTAMINANT HYDROLOGY, vol. 61, no. 1-4, 1 March 2003 (2003-03-01), pages 107-115, XP055309213, NL ISSN: 0169-7722 the whole document -----	17,18, 21,22
A	MARRY V. ET AL: "Structure and dynamics of water at a clay surface from molecular dynamics simulation", PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS., vol. 10, no. 32, 1 January 2008 (2008-01-01), page 4802, XP055309895, GB ISSN: 1463-9076, DOI: 10.1039/b807288d abstract page 4803, left-hand column, line 29 - page 4805, left-hand column, line 25 figure 1 -----	21,22

FURTHER INFORMATION CONTINUED FROM PCT/ISA/ 210

This International Searching Authority found multiple (groups of) inventions in this international application, as follows:

1. claims: 1-11

A method of operating a computer system to calculate electrical conductivity in a clay mineral.

2. claims: 12-16, 19, 20

A method of analyzing a rock sample comprising a clay component and a system for doing the same.

3. claims: 17, 18, 21, 22

A method of operating a computer to calculate a formation factor for a rock system comprising a clay mineral and a system for doing the same.
