

지질매체 공극 구조에 대한 구성 엔트로피와 상자집계 프랙탈 차원의 지구물리학적 의미 및 응용: 무작위 패킹 시뮬레이션 연구

Geophysical Implications for Configurational Entropy and Cube Counting Fractal Dimension of Porous Networks of Geological Medium: Insights from Random Packing Simulations

이 범 한(Bum Han Lee)* · 이 성 근(Sung Keun Lee)

서울대학교 지구환경과학부
(School of Earth and Environmental Sciences, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea)

요약: 지구물질로 이루어진 공극 구조와 이를 채우고 있는 유체의 상호작용에 대한 이해는 지표 및 지구 내부의 다양한 지질학적 현상의 설명에 필수적이다. 본 연구에서는 지구물질과 유체의 상호작용을 보다 잘 이해하기 위해, 비표면적과 공극률이 다공성 매질의 공극 구조를 설명하는 매개변수에 미치는 영향을 살펴보고자 하였다. 이를 위해 입자의 지름과 공극률을 다양하게 하여 동일한 크기의 구형의 입자로 이루어진 다공성 매질에 대한 삼차원 공극 구조를 무작위 패킹 시뮬레이션으로 얻었고, 이에 대해 구성 엔트로피와 삼차원 상자집계 프랙탈 차원 분석을 하였다. 구성 엔트로피 분석 결과, 엔트로피 길이는 비표면적이 2.4에서 8.3 mm²/mm³으로 증가할 때 0.8에서 0.2 mm로 감소하고, 최대 구성 엔트로피는 공극률이 0.33에서 0.46으로 증가할수록 0.94에서 0.99로 증가하는 뚜렷한 경향을 보인다. 구성 엔트로피와 공극률의 관계로부터 구성 엔트로피가 맨틀 용융체의 탄성과 점성도를 설명하는 변수로 사용될 수 있음을 제시한다. 삼차원 상자집계 프랙탈 차원은 비표면적이 같을 때 공극률이 증가함에 따라 증가하고, 비표면적이 2.4에서 8.3 mm²/mm³으로 증가할 때 2.65에서 2.98로 증가한다. 이러한 삼차원 상자집계 프랙탈 차원과 비표면적, 공극률의 관계로부터 삼차원 상자집계 프랙탈 차원이 지진과 감쇠와 맨틀용융체를 포함한 다양한 지질매체의 구조와 무질서도를 설명하는 변수로 사용될 수 있음을 제시한다.

주요어: 무작위 패킹 시뮬레이션, 공극 구조, 구성 엔트로피, 상자집계 프랙탈 차원, 맨틀 용융체, 점성도, 지진과 감쇠

ABSTRACT: Understanding the interactions between earth materials and fluids is essential for studying the diverse geological processes in the Earth's surface and interior. In order to better understand the interactions between earth materials and fluids, we explore the effect of specific surface area and porosity on structural parameters of pore structures. We obtained 3D pore structures, using random packing simulations of porous media composed of single sized spheres with varying the particle size and porosity, and then we analyzed configurational entropy for 2D cross sections of porous media and cube counting fractal dimension for 3D porous networks. The results of the configurational entropy analysis show that the entropy length decreases from 0.8 to 0.2 with increasing specific surface area from 2.4 to 8.3 mm²/mm³, and the maximum configurational entropy increases from 0.94 to 0.99 with increasing porosity

*교신저자: buman@snu.ac.kr

from 0.33 to 0.46. On the basis of the strong correlation between the liquid volume fraction (i.e., porosity) and configurational entropy, we suggest that elastic properties and viscosity of mantle melts can be expressed using configurational entropy. The results of the cube counting fractal dimension analysis show that cube counting fractal dimension increases with increasing porosity at constant specific surface area, and increases from 2.65 to 2.98 with increasing specific surface area from 2.4 to 8.3 mm²/mm³. On the basis of the strong correlation among cube counting fractal dimension, specific surface area, and porosity, we suggest that seismic wave attenuation and structural disorder in fluid-rock-melt composites can be described using cube counting fractal dimension.

Key words : Random packing simulations, pore structure, configurational entropy, cube counting fractal dimension, mantle melts, viscosity, seismic wave attenuation

서 론

지표 및 지구 내부에서 일어나는 다양한 지질학적 현상은 이를 구성하는 지구물질의 거시적 특성으로 설명되며 이는 원자 단위에서 마이크로미터 단위에 이르는 미시적 구조에 의해 결정된다(예: Lee, 2005; Lee and Lee, 2006; Lee *et al.*, 2008; Lee *et al.*, 2010). 따라서 다양한 지질학적 현상을 이해하기 위해서는 지구물질의 미시적 구조를 관찰하고 이해하는 것이 필수적이다. 지구물질과 유체의 상호작용은 지표 및 지구 내부에서 일어나는 가장 중요한 현상 중 하나이다. 이를 이해하는 것은 지표에서 저류암 내 유류 및 탄화수소 기체의 이동 및 추출, 퇴적물 내 오염물의 이동, 이산화탄소 저장 등과 같은 산업적, 환경적으로 중요한 문제들과 더불어 지구 내부에서 암석-부분 용융체-유체의 복합체에 의한 지진과 감쇠 등 지구물리적 현상들을 평가하고 예측하는 데 있어서 필수적이다. 본 연구에서는 지구물질과 유체의 상호작용을 미시적으로 이해하기 위해 무작위 패킹 시뮬레이션을 이용하여 다양한 삼차원 공극 구조의 자료를 체계적으로 얻고, 구성 엔트로피와 삼차원 상자집계 프랙탈 차원을 분석하고, 이러한 매개 변수와 거시적 성질과의 관계에 대한 지구물리적 의미를 살펴보고자 한다.

먼저 본 연구의 목적인 지구물질과 유체의 상호작용에 대한 이해를 위해 최근에 수행된 다양한 길이 단위에서의 연구에 대해 소개한다. 지구물질과 유체의 상호작용은 다양한 길이 단위에서 관찰이 가능하며 각각의 길이 단위에서 중요한 정보들을 얻을 수 있다. 원자 단위에서 일어나는 지구물질과 유체의 상호작용에 대해 양자화학계산을 이용하여 흡착 구조, 물성, 구조-물성 간 관계를 예측할 수 있다(Foresman and Frisch, 1996). 최근에는

비교적 간단한 구조의 유기 분자와 점토광물인 벤질 알코올의 케올리나이트 표면 흡착에 대한 평형 상태의 구조, 결합 에너지, 핵자기공명 화학 차폐 텐서를 계산함으로써 원자 단위의 미시적 구조, 결합에서 예측할 수 있는 물성, 미시적 구조와 물성 간의 관계를 나타내는 변수를 이론적으로 예측하는 연구가 수행되었다(이범한과 이성근, 2007; Lee and Lee, 2009). 지구물질과 유체의 상호작용의 결과로 나타나는 다공성 매질의 공극 구조, 매질 내 유체의 분포 등을 핵자기공명 현미영상을 이용하여 마이크로미터 단위에서 관찰할 수 있다. 최근에는 모델 샌드로 이루어진 삼차원 공극 구조를 상자집계 프랙탈 차원, 라쿠나리티(lacunarity), 구성 엔트로피로 분석하고, 공극 구조와 공극 구조를 나타내는 매개 변수, 그리고 매개 변수와 수리 지질학적 특성 및 다양한 물성과의 관계를 체계적으로 알아보기 위한 핵자기공명 현미영상 연구가 수행되었다(이범한과 이성근, 2009; Lee and Lee, submitted). 핵자기공명 현미영상은 추가적인 화학적 처리 없이 밀도가 비슷한 두 개의 유체상을 구분해서 영상화할 수 있다는 장점을 가지고 있으며(Callaghan, 1991; Blümich, 2000), 이러한 장점을 이용하여 오일로 채워진 다공성 매질 내 물이 통과된 시간에 따라 물의 분포를 고분해능으로 영상화함으로써 물의 분포 구조, 이를 나타내는 매개 변수의 특성 및 매개 변수와 다공성 매질의 고유 성질인 투수율 간의 관계를 밝힌 연구가 수행되었다(Lee and Lee, in preparation). 핵자기공명 현미영상은 서로 다른 유체상을 구분해서 영상을 얻을 수 있다는 장점 외에도 유체의 스핀-격자 이완 시간(spin-lattice relaxation time, T_1) 및 스핀-스핀 이완 시간(spin-spin relaxation time, T_2)의 분포 영상을 얻을 수 있고, 유체의 속도 분포 영상을 얻을 수 있으며, 서로 다른 핵종에 대한 영상을 얻을 수

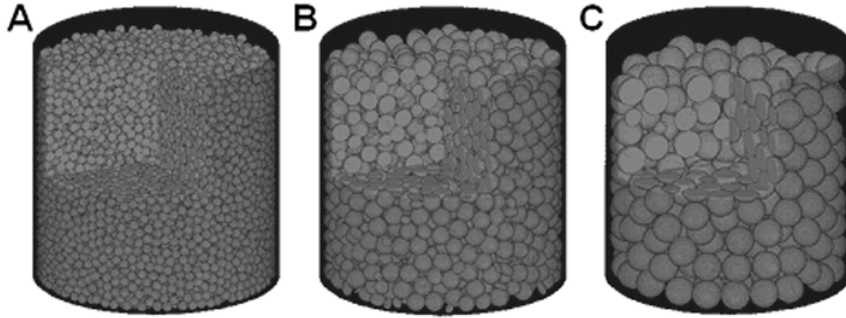


Fig. 1. Porous media obtained by the random packing simulations. Particle diameters in these random porous media are 10 pixels (A), 20 pixels (B), and 30 pixels (C), respectively.

있는 등 다양한 장점을 가지고 있다(Callaghan, 1991; Blümich, 2000). 그러나 다공성 매질에 대해서는 유체의 양이 적고, 스핀-스핀 이완 시간이 빠르다는 단점 때문에 고분해능으로 영상을 얻기에 한계가 있다. 최근에는 고자기장과 고구배의 핵자기공명 현미영상 기기를 이용해 비교적 유체의 양이 많이 포함된 다공성 매질에 대해 약 19 mm 정도의 고분해능 핵자기공명 현미영상을 얻는 연구가 수행되었다(Lee *et al.*, in preparation). 이러한 핵자기공명 현미영상 기법의 발달에 따라 다공성 매질 내 기체, 액체 등 여러 종류의 유체를 다양한 핵종에 대해 고분해능으로 영상화하는 등의 연구가 가능할 것으로 기대되며, 지구물질과 유체의 상호작용을 미시적으로 관찰하고 이해함으로써 거시적 성질을 예측하는데 도움을 줄 수 있을 것으로 보인다.

공극 구조를 나타내는 다양한 매개 변수 가운데 구성 엔트로피는 산화물 유리와 용융체를 포함하는 비정질에 대한 이전 연구에서 무질서한 원자 구조를 나타내기 위해 사용되었다(예: Lee and Stebbins, 1999; Lee, 2005; Lee *et al.*, 2010). 규산염 용융체에서 정의되는 구성 엔트로피에 대해 알루미늄 규산염 용융체를 예로 들면 구성 엔트로피는 식 (1)과 같이 표현될 수 있다(Lee and Stebbins, 1999):

$$S^{config} = R \sum X_{i-O-j} \ln X_{i-O-j} \quad (1)$$

여기서 R 은 기체 상수, X_{i-O-j} 는 Si-O-Si, Al-O-Al, Si-O-Al로 연결된 구조의 비를 나타낸다. 화학적으로 더 잘 혼합될수록 구성 엔트로피는 감소하며

이는 Adam-Gibbs 이론에 따라 점성도의 증가를 가져온다(Richet, 1984; Lee, 2005). 본 연구에서 사용한 것과 같이 영상 자료에 대한 구성 엔트로피를 정의하기 위해 픽셀 수 k 의 확률에 대해 식 (2)와 같이 정의한다(Andraud *et al.*, 1994):

$$P_k(b) = \frac{N_k(b)}{N} \quad (2)$$

여기서 $N_k(b)$ 는 영상 자료를 분석하는 정사각형 상자의 모서리 길이가 b 일 때, 이 상자에 포함되는 k 개의 공극에 해당하는 픽셀을 포함하는 상자의 수(픽셀 수 b^2 의 정사각형 상자 내 k 개의 공극에 해당하는 픽셀이 포함되어 있다면 고체 입자에 해당하는 픽셀 수는 $b^2 - k$ 가 된다)를 나타내고 N 은 상자가 이동하면서 가질 수 있는 모든 경우의 수를 나타낸다. 이 때, 영상 자료에 대한 구성 엔트로피 $S(b)$ 와 이를 상자 규모로 정규화시킨 S^{config} 는 식 (3)과 같이 정의된다:

$$\begin{aligned} S^{config} &= \frac{S(b)}{S_M(b)} \\ &= \frac{1}{\log(b^2 + 1)} \sum_{k=0}^{b^2} P_k(b) \log P_k(b) \end{aligned} \quad (3)$$

여기서 $S_M(b) = \log(b^2 + 1)$ 은 구성 엔트로피를 정규화하기 사용되었다. 본 연구에서는 이렇게 정의된 영상 자료에 대해 구성 엔트로피를 계산하고 맨틀 용융체의 거시적 성질과의 관계를 살펴보고자 한다.

프랙탈 차원 분석은 지금까지 주로 암석, 토양 등에 적용되어 수리지질학적 현상을 나타내는데

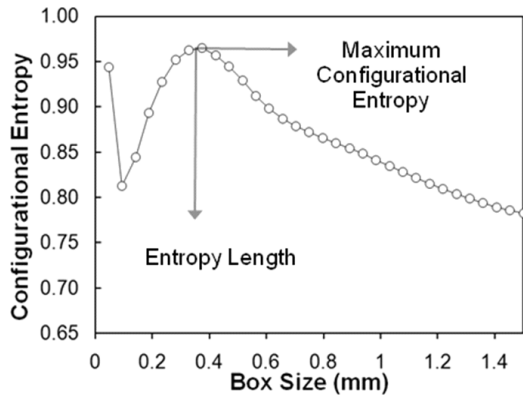


Fig. 2. Relationship between configurational entropy [S^{config}] and box size. Definition of maximum configurational entropy and entropy length are also shown.

사용되었다(이범한과 이성근, 2009 및 이 논문의 참고문헌 참조). 최근에는 다양한 지질학 분야에서 프랙탈 차원 분석이 이용되고 있다. 예를 들어 자기 유사성이 매우 작게 나타나는 화산재의 입자 모양을 나타내는데 적용되어 입자의 기원, 이동, 퇴적 등을 나타내는데 사용될 수 있음이 제시되었고(Maria and Carey, 2002), 파쇄계 네트워크(fracture network)에 적용되어 파쇄대 연결도, 화학물질의 이동과의 관계가 제시되었다(Bonnet *et al.*, 2001; Roy *et al.*, 2007). 또한 프랙탈 차원은 맨틀 용융체의 구조를 나타내기 위해 사용되어 지진과 감쇠 특성을 나타내는데 사용되기도 하였다(Pride and Masson, 2006; Müller *et al.*, 2008). 본 연구에서는 삼차원 공극 구조에 대해 향상된 방법으로 상자집계 프랙탈 차원을 계산하고, 유체를 포함하고 있는 지구내부에서의 지진과 감쇠에의 적용에 대해 살펴보고자 한다.

연구 방법

무작위 패킹 시뮬레이션

무작위 패킹 시뮬레이션은 DigiPac 소프트웨어(Structure Vision Ltd.)를 사용하여 수행하였다(Jia and Williams, 2001). 본 연구에서는 입자들이 원통형의 컨테이너에 중력에 의해 쌓이도록 모사하였다. 컨테이너의 지름은 252 픽셀이 되도록 하였고, 단일 지름의 구형 입자를 쌓을 때 지름이 8에서 20, 25에서 30까지 연속적인 정수 값을 갖도록

하였으며, 같은 지름의 구에서도 한정된 부피 내에 쌓이는 입자의 수를 다르게 함으로써 공극률이 서로 다른 다공성 매질을 얻도록 하였다. 그림 1은 지름 10, 20, 30 픽셀의 구로 모사하여 얻은 다공성 매질의 모습이다.

자료 처리

얻어진 삼차원 공극 구조 자료는 공극에 해당하는 픽셀이 1, 고체 입자에 해당하는 픽셀이 0의 값을 갖는 이치 화상(binary image) 자료로 저장하여 MATLAB 7.1 (The MathWorks Inc.)에서 자료 처리에 사용하였다. 이치 화상으로 변환된 256픽셀 × 256픽셀 × 256픽셀의 삼차원 자료에서 바깥 부분을 제외시키고 내부의 160픽셀 × 160픽셀 × 160픽셀의 자료만 남도록 하였다. 공극률(effective porosity)은 (데이터의 합)/(160 × 160 × 160)으로 계산하였다. 비표면적은 삼차원 상에서 서로 연결되어 있는 부분을 하나의 클러스터로 정의하고 모든 클러스터 표면적의 합으로 물체의 표면적을 계산하는 방법으로 계산하였다. 비표면적은 1픽셀을 47 μm 로 가정하여 단위 부피당 면적(mm^2/mm^3)으로 변환하여 표시하였다. 이는 핵자기공명 현미영상을 이용한 이전 연구에서 12 mm × 12 mm × 12 mm 크기의 시역(field of view)에 대해 256픽셀 × 256픽셀 × 256픽셀 크기의 삼차원 공극 구조 영상으로 얻은 자료와 비교하기 위함이다(이범한과 이성근, 2009).

구성 엔트로피와 삼차원 상자집계 프랙탈 차원은 MATLAB 7.1 (The MathWorks Inc.)에서 계산하였다. 구성 엔트로피는 미끄러짐 상자(gliding box) 알고리즘을 이용하여, 분석하는 상자 크기를 1에서 32까지, 이차원 단면에 대해 계산하였다. 160 × 160 × 160 데이터에서 z방향에 수직인 다섯 개의 단면(위에서부터 30, 60, 90, 120, 150번째 단면)을 고르고 이에 대해 구성 엔트로피의 평균값을 계산하였다. 그림 2는 구성 엔트로피 분석에서 얻을 수 있는 최대 구성 엔트로피와 그 때의 엔트로피 길이를 보여준다. 엔트로피 길이는 구성 물질을 대표하는 길이로 나타낼 수 있음이 제시된 바 있다(Andraud *et al.*, 1997).

상자집계 프랙탈 차원 분석은 정수 크기의 상자보다 더 세밀하게 세기 위해 원 데이터를 네 배 확장하였고, 특정 크기의 상자가 겹치지 않고 모든 데이터를 통과하면서 공극 유체의 데이터가 포함된 상자의 개수를 집계하였다. 상자의 크기는 640

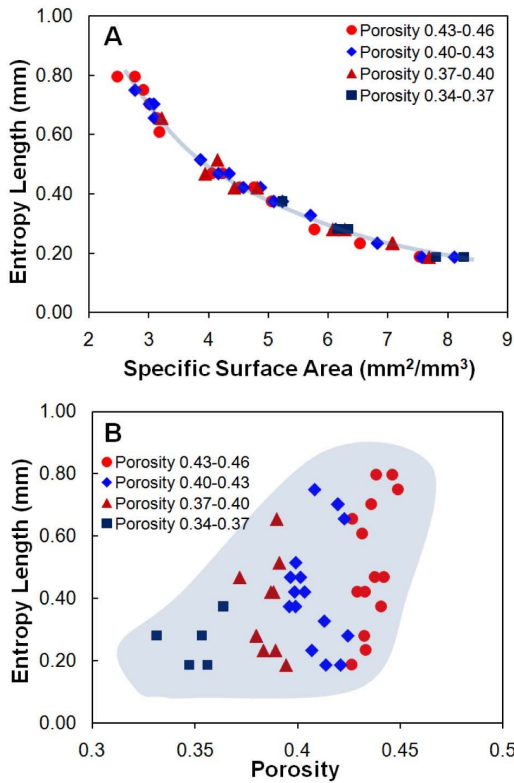


Fig. 3. (A) Relationship between entropy length and specific surface area. (B) Relationship between entropy length and porosity.

$\times 640 \times 640$ 데이터로 확장된 상태에서 640의 약수 (1, 2, 4, 5, 8, 10, 16, 20, 32, 40, 80, 160, 320, 640)를 분석하는 상자 크기로 사용하여 계산하였다. 이때, 로그(데이터가 포함된 상자수)-로그(상자 크기) 그래프에서 프랙탈 차원 분석이 유의미한 구간을 정하여 분석하였다(자세한 분석 방법은 다음 논문 참조 Lee and Lee, submitted).

결과 및 토의

그림 3은 엔트로피 길이와 비표면적 간의 관계 및 엔트로피 길이와 공극률의 관계를 보여준다. 그림 3a에서 엔트로피 길이는 비표면적이 2.4에서 $8.3 \text{ mm}^2/\text{mm}^3$ 으로 증가할 때 0.8에서 0.2 mm로 감소하며 매우 뚜렷한 경향성을 보인다. 시뮬레이션에 사용되는 구의 최대 지름이 1.41 mm에 해당하고, 가장 작은 지름이 0.38 mm에 해당하므로 공극

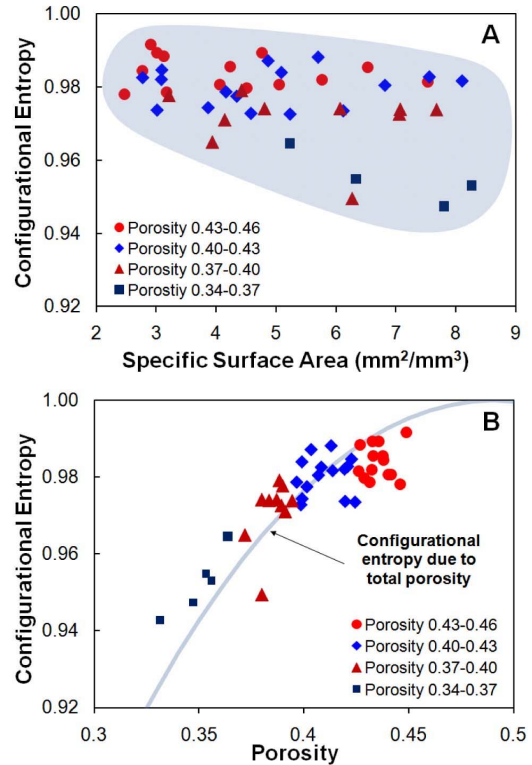


Fig. 4. (A) Relationship between configurational entropy and specific surface area. (B) Relationship between configurational entropy and porosity. Thick line indicates the effect of porosity on configurational entropy due to total porosity (see text).

구조의 엔트로피 길이는 다공성 매질을 구성하는 입자의 지름보다 약간 작은 값으로 얻어지는 것을 알 수 있다. 그림 3b에서 엔트로피 길이는 공극률이 증가할수록 증가하는 경향성을 보이지만 그 경향성이 뚜렷하지는 않다. 따라서 엔트로피 길이는 공극률보다 비표면적과 더 밀접한 관련을 갖는 매개 변수임을 알 수 있다.

그림 4는 최대 구성 엔트로피와 비표면적 및 최대 구성 엔트로피와 공극률의 관계를 보여준다. 그림 4a에서 최대 구성 엔트로피는 비표면적이 증가할수록 감소하는 경향성을 보이지만 그 경향성이 뚜렷하지는 않다. 반면 그림 4b에서 최대 구성 엔트로피는 공극률이 0.33에서 0.46으로 증가할수록 0.94에서 0.99로 증가하는 뚜렷한 경향을 보인다. 따라서 최대 구성 엔트로피는 비표면적보다 공극률에 더 밀접한 관련을 갖는 매개 변수임을 알 수

있다. 그림 4b에 표시한 것과 같이 전체 공극률(f)에 의한 구성 엔트로피를 식 (4)와 같이 정의할 수 있다(Lee and Lee, submitted):

$$S_{tp}^{config} = \frac{-R[\phi \ln \phi + (1-\phi) \ln(1-\phi)]}{5.76} \quad (4)$$

여기서 R 은 기체 상수이며, 이 식은 일반적인 구성 엔트로피(식 1)와 유사한 형태를 갖는 것을 볼 수 있다. 그림 4b에서 전체 공극률에 의한 구성 엔트로피는 최대 구성 엔트로피를 잘 설명하는 것으로 보인다.

전술한 바와 같은 구성 엔트로피와 공극률의 관계는 암석-부분 용융체-유체의 복합체의 특성을 설명하는데 도움을 줄 수 있다. 예를 들어 구형 입자로 이루어진 복합체의 체적탄성률(bulk modulus), 전단탄성률(shear modulus), 전단 점성도(shear viscosity)와 같은 거시적 성질은 입자 경계의 인접도(contiguity, φ)라는 미시적 구조의 함수로 설명될 수 있다(Takei, 1998). 인접도는 이웃하는 입자와 접촉하는 입자 표면의 비로 정의되며 0과 1 사이의 값을 가진다(Takei, 1998). 고체-유체 복합체의 거시적 성질을 설명하기 위해 인접도를 습도(wetness, $\psi = 1 - \varphi$)로 바꾸어 사용하며 이는 유체 계면의 미시적 구조를 나타내는 변수이다(Takei, 1998). 습도는 유체의 부피비(ϕ)가 증가함에 따라 증가하며, 미시적인 유체의 이면각(dihedral angle, θ_d)이 작아질수록 습도의 증가 속도가 빠르다(von Barge and Waff, 1986). 따라서 습도를 유체의 부피비(ϕ)와 이면각(θ_d)의 함수로 나타낼 수 있으며, 이를 구형 입자로 이루어진 복합체의 거시적 성질에 대한 식에 대입하면, 부분적으로 용융된 다공성 매질의 성질을 유체의 부피비(ϕ)와 이면각(θ_d)의 함수로 표현할 수 있다(Takei, 1998). 예를 들어 부분적으로 용융된 다공성 매질에서의 전단파 속도(β)는 유체의 부피비가 증가할수록 감소하며, 이면각의 크기가 작아질수록 속도의 감소 정도가 커지며, 습도가 커질수록 속도의 절대값이 작아지는 경향을 보인다(Takei, 1998). 이는 식 (5)와 같이 표현된다(Biot, 1956):

$$\beta = \sqrt{(1-\phi)\mu_{sk}/\bar{\rho}} \quad (5)$$

이 식에서 μ_{sk} 는 고체 입자의 전단탄성률을 나타내고, $\bar{\rho}$ 는 복합체의 평균 밀도를 나타낸다. 유체

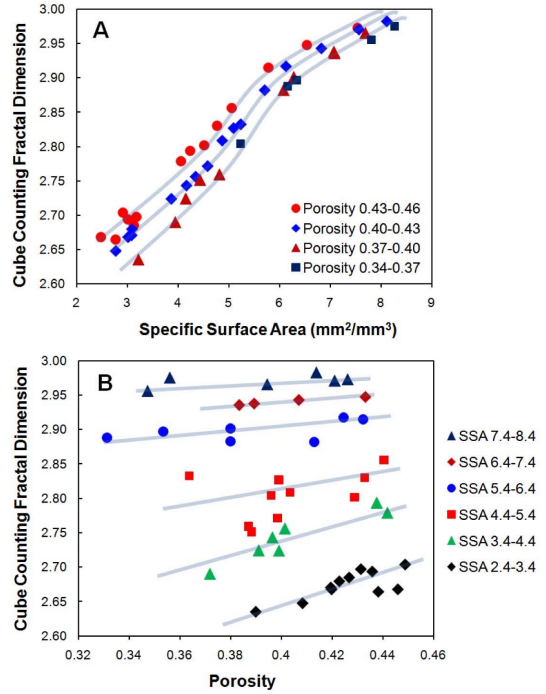


Fig. 5. (A) Relationship between cube counting fractal dimension of pore and specific surface area. Red circles, blue diamonds, brown triangles, and black squares correspond to each group of simulation data for porosities 0.43~0.46, 0.40~0.43, 0.37~0.40, and 0.34~0.37, respectively. (B) Relationship between cube counting fractal dimension of pore and porosity. Dark blue triangles, brown diamonds, blue circles, red squares, green triangles, and black diamonds correspond to each group of simulation data for specific surface area 7.4~8.4, 6.4~7.4, 5.4~6.4, 4.4~5.4, 3.4~4.4, 2.4~3.4 mm²/mm³, respectively.

의 부피비가 증가함에 따라 구성 엔트로피가 증가하는 경향을 가지므로, 전단파 속도를 구성 엔트로피에 의한 식 (6)으로 표현할 수 있다:

$$\beta \propto \sqrt{(1-S^{config})\mu_{sk}/\bar{\rho}} \quad (6)$$

또한 부분적으로 용융된 복합체의 점성도(η)는 유체의 부피비(ϕ)에 대해 식 (7)과 같은 관계식을 갖는다(Takei, 1998; Takei and Holtzman, 2009):

$$\eta^{-1} \propto \exp(16\phi) \quad (7)$$

구성 엔트로피와 공극률의 관계로부터 점성도를 식 (8)과 같이 표현할 수 있다:

$$\eta^{-1} \propto \exp(S^{config}) \quad (8)$$

위 식은 부분적으로 용융된 암석 내 유체의 구성 엔트로피가 증가할수록 점성도가 작아지는 것을 의미한다. 고체-유체 복합체의 탄성 및 점성도에 대한 최근의 연구에 따르면 정규화된 체적탄성률, 전단탄성률, 체적점성도, 전단점성도 모두 인접도가 증가함에 따라 지수적으로 증가하며 탄성의 변화에 비해 점성도의 변화가 더 크다는 것이 제시되었다(Takei and Holtzman, 2009). 따라서 본 연구에서는 유체의 구성 엔트로피가 길이 단위에 관계없이 다공성 매질 내 탄성 및 점성도를 설명할 수 있는 매개 변수로 응용될 수 있다는 것을 제시한다.

그림 5는 삼차원 상자집계 프랙탈 차원과 비표면적과의 관계 및 삼차원 상자집계 프랙탈 차원과 공극률과의 관계를 보여준다. 그림 5a에서 삼차원 상자집계 프랙탈 차원은 공극률이 0.43~0.46인 경우 비표면적이 2.4에서 7.6 mm²/mm³으로 증가할 때 2.65에서 2.98로 증가하고, 공극률이 0.40~0.43인 경우 비표면적이 2.8에서 8.2 mm²/mm³으로 증가할 때 2.64에서 2.98로 증가하고, 공극률이 0.37~0.40인 경우 비표면적이 3.2에서 7.8 mm²/mm³으로 증가할 때 2.63에서 2.96으로 증가하고, 공극률이 0.34~0.37인 경우 비표면적이 5.2에서 8.3 mm²/mm³으로 증가할 때 2.8에서 2.98로 증가한다. 이는 삼차원 상자집계 프랙탈 차원이 같은 공극률에서 비표면적이 증가함에 따라 증가하는 경향을 보이고, 같은 비표면적에서 공극률이 증가할수록 증가하는 경향을 갖는 것을 의미한다. 이러한 경향은 글래스 비드와 실리카젤로 이루어진 다공성 매질에 대한 핵자기공명 현미영상을 이용한 이전 연구에서 제시되었고(이범환과 이성근, 2009), 본 연구에서 무작위 패킹 시뮬레이션을 이용하여 보다 체계적으로 조사하였다. 그림 5b에서 비슷한 비표면적끼리 비교하였을 때, 공극률이 증가함에 따라 삼차원 상자집계 프랙탈 차원이 0.05에서 0.1 정도로 증가하는 경향을 보인다. 프랙탈 차원이 공극률의 증가에 따라 증가한다는 것이 제시된 바 있지만(Perret *et al.*, 2003; Yu and Liu, 2004; Tang and Maragoni, 2008), 일정한 비표면적에서 공극률이 체계적으로 증가하는 경향은 본 연구에서 처음으

로 제시한다.

이러한 삼차원 상자집계 프랙탈 차원은 다양한 지질학 분야에 응용될 수 있다. 본 연구에서 삼차원 상자집계 프랙탈 차원은 비표면적, 공극률과 밀접하게 관련되므로, 다공성 매질의 비표면적과 공극률로 투수율을 설명하는 Kozeny-Carman 식에 의해 투수율을 설명하는 매개변수로 제시될 수 있다(Bear, 1972). 최근에 보고된 화산 쇄설물의 공극 구조에 대해 공극률, 투수율, 전기적 성질 등을 측정된 실험 연구에서 투수율은 전기적 비틀림도 (electrical tortuosity)로 표현이 가능하다는 것이 제시되었다(Wright *et al.*, 2009). 따라서 본 연구에서 제시된 결과와 결합하여 투수율, 전기적 비틀림도, 삼차원 상자집계 프랙탈 차원에 대한 새로운 관계를 정립하는 연구가 가능할 것으로 기대된다.

다음으로 삼차원 상자집계 프랙탈 차원은 지구물리 분야에서 유체를 포함하는 암석 내 P파의 지진파 감쇠와 속도를 나타내는데 사용될 수 있다. 저류암에서 유류, 기체, 물의 혼합 유체로 포화된 구간의 존재는 유류 추출 속도를 감소시키므로, 이러한 유체 패치의 분포와 지진파의 특성(탄성률, 속도, 감쇠 등) 간의 관계를 파악하는 것은 지진파 자료로부터 석유 생산량을 감시하는데 있어서 중요한 문제이다(Toms *et al.*, 2007). 지진파의 감쇠와 속도는 공극에 분포하는 유체에 민감하다. 이는 지진파가 서로 다른 탄성 성질을 갖는 유체 사이에 국부적인 압력 구배를 유도하고, 이는 국부적인 유체의 흐름에서 내부 마찰을 수반함으로써 체적 탄성률을 변화시키기 때문이다(Pride and Masson, 2006; Müller *et al.*, 2008). 지진파의 속도와 감쇠를 설명하기 위해 사용되는 변수인 P파 계수는 식 (9)와 같이 표현된다:

$$\tilde{H}(\omega; S) = H^w(1 + \delta[\tau\xi^2 + (\tau - 1)\xi]) \quad (9)$$

이 때, ω 는 주파수, S 는 포화도, τ 는 계수, H^w 는 Wood의 P파 계수이다(Müller *et al.*, 2008). 이 식에서 주파수의 함수인 ξ 는 식 (10)과 같이 표현된다:

$$\xi(\omega; S) = 2\nu(ka)^2 {}_2F_1\left(\left[1, \nu + 1\right], \frac{1}{2}, -k^2a^2\right) + i\sqrt{2}\pi^2k^3\Phi(k) \quad (10)$$

이 식에서 ν 는 Hurst 지수를 나타내는데 이는 (3-

유체 패치의 프랙탈 차원으로 표현될 수 있으며, a 는 상관 길이, k 는 투수율, $\Phi(k)$ 는 von Kármán 스펙트럼 함수이다(Müller *et al.*, 2008). P파의 감쇠와 속도는 이렇게 나타낸 P파 계수로 표현되는데, 예를 들어 P파 감쇠(Q^{-1}), 주파수, 투수율(k)은 식 (11), (12)와 같이 표현된다(Pride and Masson, 2006; Müller *et al.*, 2008):

$$Q^{-1} \propto \omega^{-\nu} \quad (11)$$

$$Q^{-1} \propto k^{\nu} \quad (12)$$

이와 같이 P파 계수와 감쇠를 설명하는 변수로 유체 패치의 프랙탈 차원이 사용되고 있음을 알 수 있으며, P파 속도와 감쇠를 결정하는 세 가지 물리량은 유체 패치의 크기, 주파수, 유체 클러스터의 프랙탈 차원이다(Müller *et al.*, 2008). 실제 지구 내부에서 유체 패치는 삼차원으로 분포하고 있으므로, 이에 대한 삼차원 분포 영상을 얻고 본 연구에서와 같이 향상된 방법으로 삼차원 상자집계 프랙탈 차원 값을 얻음으로써, 복잡한 유체의 분포를 보다 잘 나타낼 뿐만 아니라 지진파의 감쇠 및 속도를 더 잘 예측할 수 있을 것으로 기대된다.

본 연구에서는 무작위 패킹 시뮬레이션을 이용하여 체계적으로 다양한 다공성 매질을 만들어서 지구물질과 유체의 상호작용에 대한 연구에 적용할 뿐만 아니라 수리지질학, 지구물리학 연구에 다양하게 적용할 수 있음을 제시한다. 이러한 다공성 매질을 나타내는 매개변수인 구성 엔트로피는 공극률과 밀접한 관련을 가지는 것을 밝혔고 이는 다양한 길이 단위에서 구성 엔트로피의 적용이 가능하며 암석-부분 용융체-유체의 복합계의 S파 속도와 점성도를 설명하는 변수로 사용될 수 있음을 제시한다. 맨틀 용융체의 구조를 나타내기 위해 사용되었던 프랙탈 차원은 비표면적, 공극률과 밀접한 관련을 갖는 것을 밝혔고 보다 삼차원 상자집계 프랙탈 차원을 이용하여 암석의 부분 용융체에서 P파의 지진파 감쇠 및 속도를 보다 잘 예측할 수 있음을 제시한다.

사 사

이 연구는 기상청 기상지진기술개발사업(CATER 2009-5114)의 지원으로 수행되었습니다. 김영호 교수님과 장

찬동 교수님의 사독에 감사드립니다.

참고문헌

- 이범한, 이성근 (2007) 캐올리나이트 규산염 층과 벤질 알코올의 반응에 대한 양자화학계산에서 결정학적 위상이 밀리켄 전하와 자기 차폐 텐서에 미치는 영향. 한국광물학회지, 20, 313-325.
- 이범한, 이성근 (2009) 지구물질의 마이크로미터 단위의 삼차원 공극 구조 규명: 핵자기공명 현미영상 연구. 한국광물학회지, 22, 313-324.
- Andraud, C., Beghdadi, A., Haslund, E., Hilfer, R., Lafait, J., and Virgin, B. (1997) Local entropy characterization of correlated random microstructures. *Physica A*, 235, 307-318.
- Andraud, C., Beghdadi, A., and Lafait, J. (1994) Entropic analysis of random morphologies. *Physica A*, 207, 208-212.
- Bear, J. (1972) *Dynamics of Fluids in Porous Media*. New York, American Elsevier, 764p.
- Biot, M.A. (1956) Theory of propagation of elastic waves in a fluid-saturated porous solid, 1. Low-frequency range. *J. Acoust. Soc. Am.*, 28, 168- 178.
- Blümich, B. (2000) *NMR Imaging of Materials*. Oxford, Clarendon Press, 541p.
- Bonnet, E., Bour, O., Odling, N.E., Davy, P., Main, I., Cowie, P., and Berkowitz, B. (2001) Scaling of fracture systems in geological media. *Rev. Geophys.*, 39, 347-383.
- Callaghan, P.T. (1991) *Principles of Nuclear Magnetic Resonance Microscopy*. Oxford, Clarendon Press, 492p.
- Foresman, J.B. and Frisch, A.E. (1996) *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*. Pittsburgh, PA, Gaussian, Inc., 302p.
- Jia, X. and Williams, R.A. (2001) A packing algorithm for particles of arbitrary shapes. *Powder Technol.*, 120, 175-186.
- Lee, B.H. and Lee, S.K. (2009) Effect of lattice topology on the adsorption of benzyl alcohol on kaolinite surfaces: Quantum chemical calculations of geometry optimization, binding energy, and NMR chemical shielding. *Am. Mineral.*, 94, 1392-1404.
- Lee, B.H. and Lee, S.K. (in preparation) Probing of water distribution in porous model sands with immiscible fluids: Nuclear magnetic resonance micro-imaging study.
- Lee, B.H., Cho, J.H., and Lee, S.K. (in preparation) High resolution NMR micro-imaging of fluids in porous media.
- Lee, B.H. and Lee, S.K. (submitted) Effect of specific surface area and porosity on cube counting fractal di-

- mension, lacunarity, and configurational entropy of pore structure of model sands: random packing simulations and NMR micro-imaging. *J. Geophys. Res.*
- Lee, S.K. (2005) Microscopic origins of macroscopic properties of silicate melts and glasses at ambient and high pressure: Implications for melt generation and dynamics. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 69, 3695-3710.
- Lee, S.K., Kim, H.N., Lee, B.H., Kim, H.I., and Kim, E. J. (2010) Nature of chemical and topological disorder in borogermanate glasses: insights from B-11 and O-17 solid-state NMR and quantum chemical calculations. *J. Phys. Chem. B*, 114, 412-420.
- Lee, S.K. and Lee, B.H. (2006) Atomistic origin of germanate anomaly in GeO_2 and Na-germanate glasses: Insights from two-dimensional ^{17}O NMR and quantum chemical calculations. *J. Phys. Chem. B*, 110, 16408-16412.
- Lee, S.K. Lin, J.F., Cai, Y.Q., Hiraoka, N., Eng, P.J., Okuchi, T., Mao, H.K., Meng, Y., Hu, M.Y., Chow, P., Shu, J.F., Li, B.S., Fukui, H., Lee, B.H., Kim, H.N., and Yoo, C.S. (2008) X-ray Raman scattering study of MgSiO_3 glass at high pressure: Implication for triclustered MgSiO_3 melt in Earth's mantle. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 105, 7925-7929.
- Lee, S.K. and Stebbins, J.F. (1999) The degree of aluminum avoidance in aluminosilicate glasses. *Am. Mineral.*, 84, 937-945.
- Müller, T.M., Toms-Stewart, J., and Wenzlau, F. (2008) Velocity-saturation relation for partially saturated rocks with fractal pore fluid distribution. *Geophys. Res. Lett.*, 35, L09306.
- Maria, A. and Carey, S. (2002) Using fractal analysis to quantitatively characterize the shapes of volcanic particles. *J. Geophys. Res.*, 107, 2283.
- Perret, J.S., Prasher, S.O., and Kacimov, A.R. (2003) Mass fractal dimension of soil macropores using computed tomography: from the box-counting to the cube-counting algorithm. *Eur. J. Soil Sci.*, 54, 569- 579.
- Pride, S.R. and Masson, Y.J. (2006) Acoustic attenuation in self-affine porous structures. *Phys. Rev. Lett.*, 97, 184301.
- Richet, P. (1984) Viscosity and configurational entropy of silicate melts. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 48, 471-483.
- Roy, A., Perfect, E., Dunne, W.M., and McKay, L.D. (2007) Fractal characterization of fracture networks: An improved box-counting technique. *J. Geophys. Res.*, 112, B12201.
- Takei, Y. (1998) Constitutive mechanical relations of solid-liquid composites in terms of grain-boundary contiguity. *J. Geophys. Res.*, 103(B8), 18183-18203.
- Takei, Y. and Holtzman, B.K. (2009) Viscous constitutive relations of solid-liquid composites in terms of grain boundary contiguity: 1. Grain boundary diffusion control model. *J. Geophys. Res.*, 114, B06205.
- Tang, D. and Maragoni, A.G. (2008) Fractal dimensions of simulated and real fat crystal networks in 3D space. *J. Am. Oil Chem. Soc.*, 85, 495-499.
- Toms, J., Muller, T.M., and Gurevich, B. (2007) Seismic attenuation in porous rocks with random patchy saturation. *Geophys. Prospect.*, 55, 671-678.
- van Barge, N. and Waff, H.S. (1986) Permeabilities, interfacial areas and curvatures of partially molten systems: Results of computations of equilibrium microstructures. *J. Geophys. Res.*, 91, 9261-9276.
- Wright, H.M.N., Cashman, K.V., Gottesfeld, E.H., and Roberts, J.J. (2009) Pore structure of volcanic clasts: Measurements of permeability and electrical conductivity. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 280, 93-104.
- Yu, B. and Liu, W. (2004) Fractal analysis of permeabilities for porous media. *AIChE J.*, 50, 46-57.
-
- 접수일(2010년 12월 1일), 수정일(1차 : 2010년 12월 20일), 게재확정일(2010년 12월 21일)