

Rampo : 岩石中の空隙を散歩する話

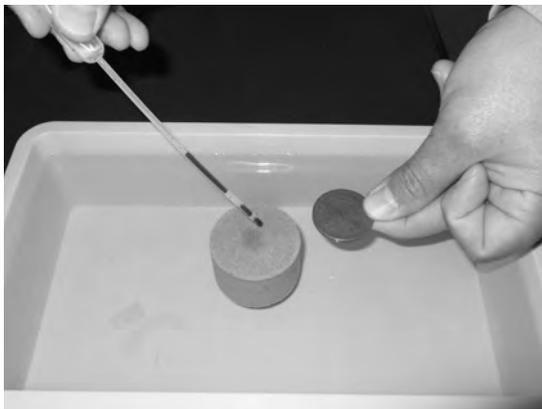
中島 善人¹⁾・中野 司²⁾

1. はじめに

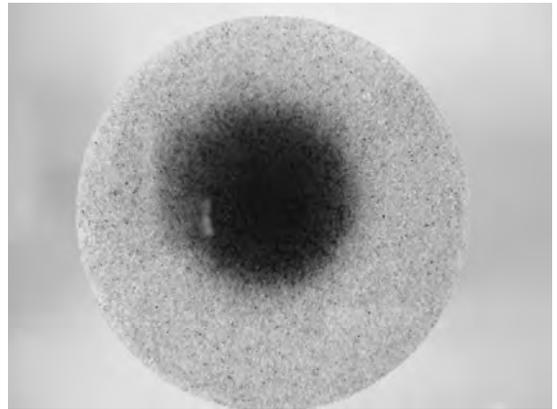
今回の地質ニュースの岩石物性特集号では、さまざまな岩石物性の研究がレポートされています。岩石の重要な物性の一つに空隙をつたう輸送物性があります。多孔質な岩石に内在する微小な空隙ネットワークに沿った物質の輸送現象は、地下水の流れ、石油の生産、汚染物質の地層中の移動を考察するとき

必須の岩石物性です。ここでは、輸送現象のなかの一つである拡散現象(および同じ方程式で記述される電気伝導現象)に話をしばってお話をします。

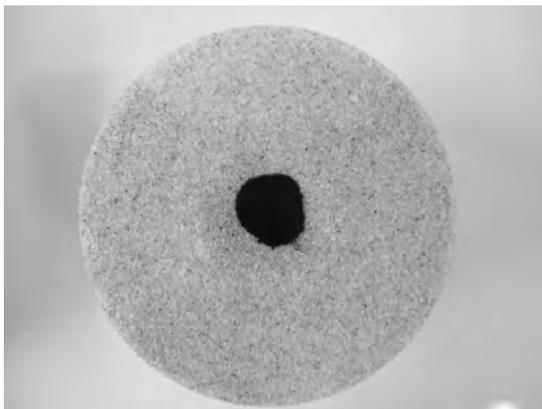
拡散とは、たとえば、地下水に満たされた地層の中を汚染物質が熱運動によってでたらめな方向に自由自在に動き回り(ランダムウォークといいます)、結果的に遠方まで汚染が広がる現象のことです。例を第1図に示しました。水を浸した米国産の砂岩(ペレア



(a)



(c)



(b)

第1図

岩石中の拡散移動の例。(a) 水槽に水を入れ、円柱形をしたペレア砂岩を浸水させます。そこに、黒い水彩絵の具を水に溶かした液滴を円柱の端面にスポイドで静かに落下させます。スケールに使われている硬貨は、直径3.2 cmの二銭銅貨です。落下直後(b)と数時間後(c)を比べると、黒い絵の具の分子が拡散して、広がったことがわかります(黒い液は清浄な水よりやや高密度なので、この密度差による重力流も絵の具の広がりにメカニズムに寄与しているものと思われます。あくまで第1図は、拡散現象の直感的なイメージをデモするための実験と考えてください)。

1) 地圏資源環境研究部門 物理探査研究グループ
2) 地質調査情報センター 地質情報統合化推進室

キーワード: 拡散, 電気伝導, 岩石物性, 地下水, X線CT, 計算機シミュレーション

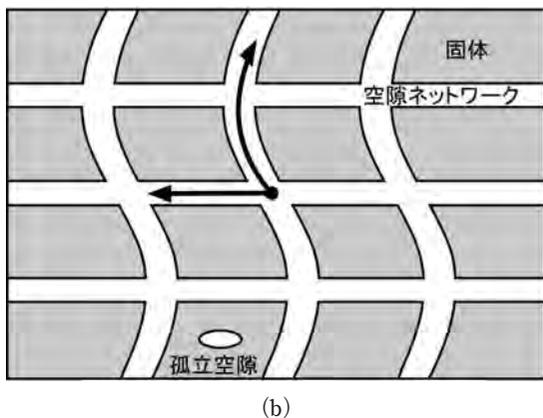
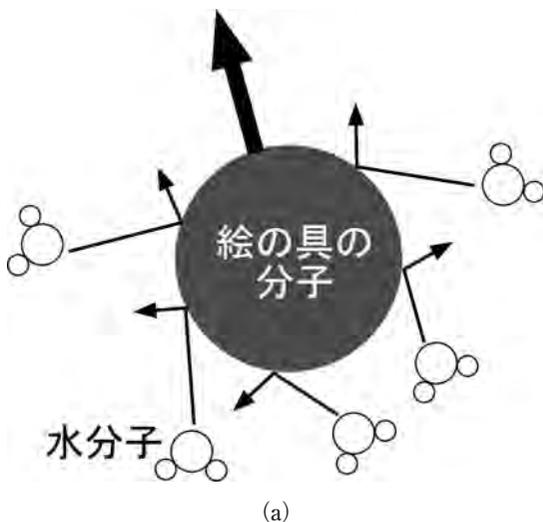
砂岩)に黒い水彩絵の具を溶かした水溶液を滴下してその経過を撮影したものです。汚染物質をイメージした黒い絵の具の分子がランダムウォークによって時間とともに岩石中の微小な空隙を伝って周囲にポヤーンと広がっていく様子が見えます。このケースでは、岩石中における絵の具のランダムウォークのしやすさ(拡散係数といいます)が、岩石物性になります。

第1図の例からわかるように、岩石中の物質拡散は、肉眼では見えないくらいの微小な空隙をつたう移動現象です。したがって、拡散現象をサイエンスとして料理したければ、まず多孔質な岩石中の微細な空隙を計測できる技術の開発が必要です。地質学においては、岩石の微細組織を観察するときに、岩石の厚さ数10ミクロンの薄片をつかって透過型光学顕微鏡で観察するという伝統的な手法があります(口絵1(p.1))。この手法では2次元の空隙形状は観察できますが、空隙の3次元形状は計測できません。空隙は、後に示すように複雑なネットワーク構造をしており、3次元性が本質的なので2次元観察では限界があります。幸いなことに、近年のテクノロジーの発達は、X線コンピューター・トモグラフィー(CT)という手法を用いてミクロな空隙の3次元形状データを取ることを可能にしました。その3次元デジタルデータを用いて、計算機シミュレーションを行えば、地球科学における拡散現象の理解を深めることができます。この小論では、多孔質砂岩に関して私たちが最近行ったランダムウォーク・シミュレーションや電気伝導シミュレーションの結果を簡単にご紹介します。

なお、ランダムウォーク(random walk)は、漢字では「酔歩」とか「乱歩」とか訳されています。「乱歩」と表記すると、推理作家の江戸川乱歩(1894-1965)と混同される恐れがあるせいか、酔歩という表記の方がすこしだけ多数派のようです。しかし、ここでは、著者の一人(Y.N.)が江戸川乱歩と同郷なので(三重県)、あえて乱歩という表記で通すことにします。

2. 多孔質岩石中の乱歩

第1図で例示したように、肉眼では静かにポヤーンと広がっていく拡散現象ですが、そのメカニズムは、分子レベルの実に騒々しい熱運動によるランダムウォーク(乱歩)です(第2図(a))。絶対零度でないかぎり、物質を構成する分子や原子は熱エネルギーに駆



第2図 拡散現象のメカニズムとしての乱歩。

(a) 水分子の激しい衝突の繰り返しによって、絵の具分子がランダムな方向に弾き飛ばされ(この図の瞬間では誌面上方に動いている)、結果として分子が長距離を移動します。

(b) 空隙構造に異方性がある多孔質岩石中の拡散現象の概念図。空隙にある分子は、ストレートに空隙が伸びている方向(誌面では横方向)には拡散しやすく、屈曲している方向(紙面では縦方向)には拡散しづらいです。

動されて激しく運動しています。たとえば室温の水分子は秒速50m程度の高速で激しく動き回っています。黒い絵の具の分子は、周囲に多数存在する水分子の激しい熱運動によってランダムな方向に小突かれて、いつも移動しています(ブラウン運動)。1回の分子衝突で移動できる距離はナノメートル程度の短距離

にしか過ぎませんが、すさまじい頻度の衝突を繰り返すので、結果として絵の具の分子は時間さえかければ巨視的な距離を容易に移動してしまいます(第1図)。

第1図のような水で満たされた多孔質岩石内部の溶存汚染物質の拡散では、石英などの鉱物粒子の緻密な結晶構造の内部を巨大な絵の具分子が移動する速度は無視できるほど小さいので、空隙に沿った拡散ルートだけ考慮すれば十分です。そうすると、汚染物質の拡散は、岩石の空隙構造につよく規制されます。空隙の曲がり具合、数密度などが拡散しやすさを決めてしまいます。したがって、多孔質岩石の拡散研究では、空隙構造の(3次元的な)把握が重要であることが理解いただけると思います。

さて、天然の岩石の空隙構造の特徴として、異方性があります。天然の岩石は、圧密、褶曲などのさまざまな地質学的な変形を過去に経験しており、結果として空隙構造は等方的ではないことがしばしばです(第2図(b))。この空隙構造の異方性は、当然汚染物質の乱歩による移動に影響を及ぼすはずであり、汚染の拡散を評価する場合、そのサイトの岩石の異方性を正しく評価する必要があります。しかし、従来の拡散セルを使う手法(たとえば Ohlsson and Neretnieks, 1995)で異方性を評価する場合は、多数の定方位岩石試料を切り出す必要があり、大変時間のかかるものでした。私たちは、X線CTでデジタル化された空隙データ上で乱歩シミュレーションを行うという新しい手法を提案し、桁違いに所要時間を短縮できました(Nakashima *et al.*, 2008; Nakashima and Kamiya, 2009)。以降は、この手法に関する解説がメインになります。

3. X線CT

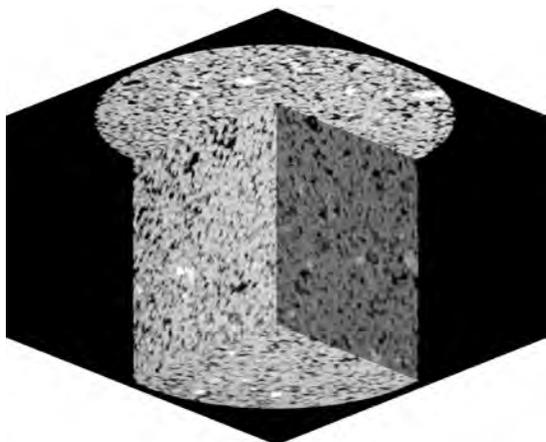
X線CTは、試料にX線をあらゆる方向から照射して、光線の道筋ごとのX線吸収率を生データとして獲得し、逆問題を解くことで試料内部のX線吸収係数の3次元空間分布を再構成する手法です。X線の吸収の程度で内部構造を推定するという点では、健康診断で撮影する肺のレントゲン写真と同じです。しかし、レントゲン写真は1方向から照射しますが、CTは1方向ではなくあらゆる方向から照射する点が本質的に異なります。CTは、人体を対象にした医療用のマ

ーケットシェアが高いですが、地質学的サンプルの3次元的な内部構造を非破壊・高分解能で迅速にデジタル計測できる技術として、地球科学の分野にも着実に導入されつつあります(たとえば中島, 2005; 高橋ほか, 2007; Okumura *et al.*, 2008)。地球科学に特化したCTの総説は、中野ほか(2000)、Ketcham and Carlson (2001)、Carlson (2006)をご覧ください。

口絵2(p.1)のX線CTは、マイクロフォーカス型に分類される装置で、1cm³程度の試料を10ミクロン程度の分解能でイメージングするのに適したシステムです。分厚い金属で遮蔽されたインターロック式の試料室にある回転ステージに試料を設置して、ハードX線を小さな焦点サイズのX線管球から円錐状に照射し(コーンビーム)、試料を通過して若干減衰したX線の強度をイメージ・インテンシファイヤーという平面型検出器でレントゲン写真のような2次元画像として撮影します。数10分かけて回転ステージを360°ゆっくり回転させつつ、イメージ・インテンシファイヤーで時々刻々変化するレントゲン写真のセットを数100枚獲得します。その得られた2次元画像セットを用いての3次元画像の再構成作業は隣接したパソコンで数時間かけて実施します。

口絵2(p.1)のシステムで今回イメージングしたのは、米国オハイオ州に広く分布するベレア砂岩と呼ばれる空隙率20%の砂岩試料です。この砂岩は、口絵1(p.1)のように空隙サイズが100ミクロン程度もあり、口絵2(p.1)のシステムの分解能で十分です。直径6mm、長さ10mmの円筒試料を、円柱軸が層理面に垂直になるようくりぬきました。X線管球にかけた電圧は160kV、流した電流は0.11mAでした。0.6°刻みで試料を360°回転させ、合計600方向からのレントゲン写真(口絵2(p.1)のズーム参照)のセットを獲得しました(360°回転の所要時間は640秒)。

再構成されたベレア砂岩の画像を第3図に示します。X線の吸収が強い部分は明るく、弱い部分は暗く表示されています。砂岩を構成している固体の鉱物粒子は明るく(石英は灰色、酸化鉄は白)、一方、空気はX線の吸収はほとんどないので黒く写っています。岩石は乾燥状態なので、岩石内部の空隙は空気で充填されており、したがって第3図では暗く写っています。直径6mmにしかすぎない小さな岩石試料の内部構造が、手に取るように3次元表示されていることにご注目ください。第3図は、835×835×572≈



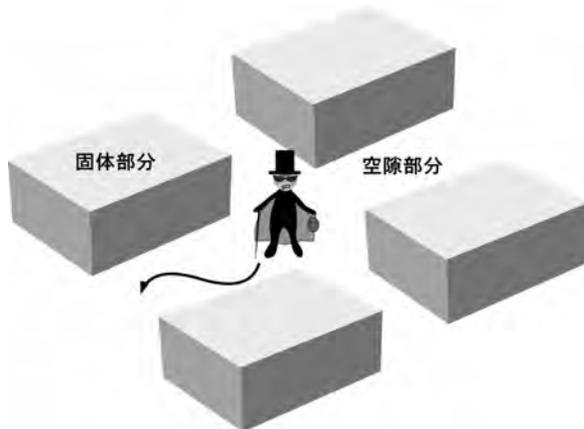
第3図 口絵2 (p.1)の装置でイメージングしたベレア砂岩 (直径6mmの円柱)のマイクロフォーカスX線CT画像。835×835×572画素(1画素は7.4ミクロンの立方体)。内部構造を見せるために円柱試料の一部を仮想的に切り取って表示してあります。

4.0×10⁸個の立方体画素から構成されています。このデータ量がどれくらいすごいかというと、各画素をワンルームマンションの1室にたとえるなら、人類の約6% (4億人)を収容できます。また、1画素が16ビット (65,536階調の無次元化された整数値のX線の線吸収係数)の深みをもっているので、データサイズは約800メガバイトにもなり、32ビットOSの計算機のメモリ管理システムでは対応困難な値にだんだん近づきつつあります。これだけの膨大な画像データが、回転ステージにおいて試料計測をスタートさせれば、数時間後に自動的にはきだされてくる・・・というのが、X線CTのパワフルな威力です。

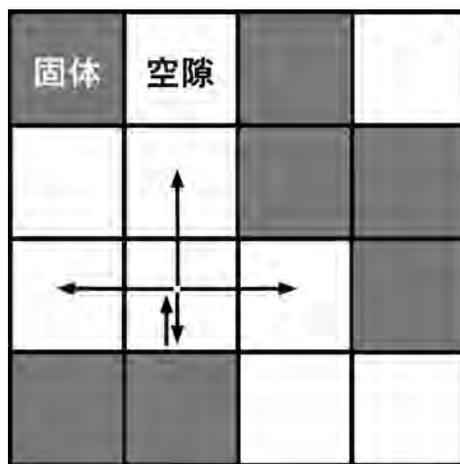
4. 計算機シミュレーション

4.1 乱歩シミュレーション

第3図のデジタルデータを用いて、乱歩のシミュレーションを行いましょ。砂岩の空隙が完全に水で満たされていると想定し、水に溶けている汚染物質が空隙にそって第2図 (b)のように拡散していく様子をノートPCを用いてシミュレートします。第2図 (a)のように、拡散現象は、ミクロに見れば多数の分子の激しい乱歩現象です。汚染物質の分子は、ある瞬間右に進んでいたかと思えば次の瞬間は左に進むというでたらめな散歩をします。たとえば、ひどく酔っ払っ



(a)



(b)

第4図 多孔質岩石中の乱歩シミュレーションの説明 (2次元平面での場合)。 (a) 障害物 (岩石の固体部分) を避けて、路地裏をでたらめな方向に歩く酔っ払った怪人。 (b) デジタルなX線CT画像上での乱歩アルゴリズム。 (a)を上空から観察している視線。

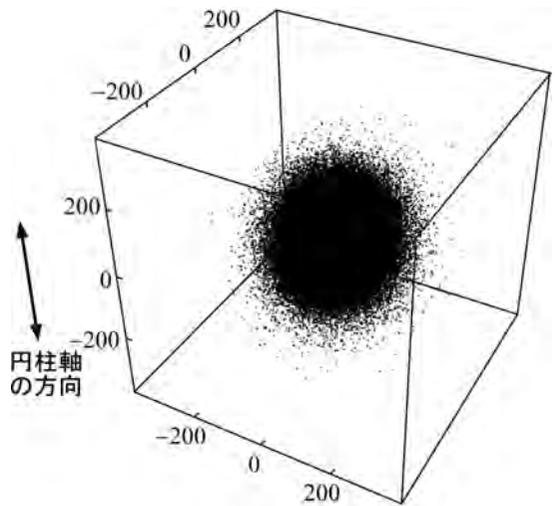
て歩く方向がでたらめな酔漢が岩石内部を徘徊していくようなものです。あるいは、乱歩の小説によく出てくる八幡の藪知らず (迷路)を手探りで散歩するイメージでしょうか。2次元平面でさまよう酔漢のイメージを第4図 (a)に示しました。

第4図 (a)をデジタルな (離散的な) X線CT画像上の乱歩シミュレーションに焼きなおすと、第4図 (b)になります。空隙の画素に酔漢 (汚染物質)を配置しま

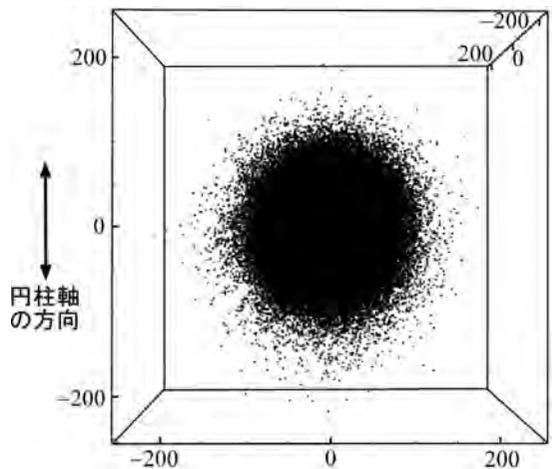
す。計算機で擬似乱数を発生させて東西南北の4方向のうち1方向を選び酔漢を1画素だけ移動させ、無次元時間を1ステップ進めます(実際は、3次元シミュレーションなので上下方向を加えて計6方向から進路を選びます)。固体の結晶内部には酔漢は侵入できないので、もしも、第4図(b)の位置で、「次は誌面の下方向に進め」という乱数が出たら、酔漢は固体壁にぶつかって跳ね返されてもとの位置に戻ってきます。つまり、時刻は1ステップ進みますが、実質的には移動せずに静止しています。この固体壁の障害物効果のせいで、多孔質媒体中では、自由空間にくらべて拡散しづらくなります。統計力学的には、拡散のしやすさの指標である拡散係数は、「平均自乗変位」という時刻ゼロのスタート位置からの距離の自乗を多数の酔漢で平均した量を時間微分して算出します。そのため、シミュレーションでは数10万人もの多数の酔漢を空隙の画素に放出して乱歩を開始させます。また、全球方向の異方性を評価したいので、仮想的に緯度・経度を1°刻みにスキャンして、その方角に沿って平均自乗変位を計算して拡散係数の方角依存性を求めました。

若干補足的なことを記載します。空隙構造の幾何学的な異方性を評価するのが目的なので、今回の乱歩シミュレーションでは、分子が固体表面に吸着する現象はアルゴリズムには盛り込みませんでした(吸着すると大抵の場合、拡散係数は低下します)。また、拡散係数の絶対値をシミュレートするのに常用される分子動力学法は、計算機の性能上、今回のような1mm程度もの長距離拡散を扱えません。したがって、今回のシミュレーションで得られた拡散係数は無次元です(固体の無い、自由空間での拡散係数で規格化したもの)。それでも、岩石の空隙構造(屈曲度)の異方性を評価するには十分なアプローチです。

乱歩シミュレーションの前に、重要な前処理があります。それは、空隙画素の連結性を調べることです。私たちは、空隙ネットワークに沿った汚染物質の長距離移動をシミュレートしたいので、孤立した小さな空隙内部に閉じ込められた物質の拡散には興味がありません。したがって、第2図(b)にあるような孤立空隙は排除する必要があります。クラスターラベリング作業というこの前処理を第3図に施した結果が、口絵3(p.2)です。こうして抽出された、3次元的に連結した空隙ネットワークの上で前述の乱歩シミュレーションを



(a)

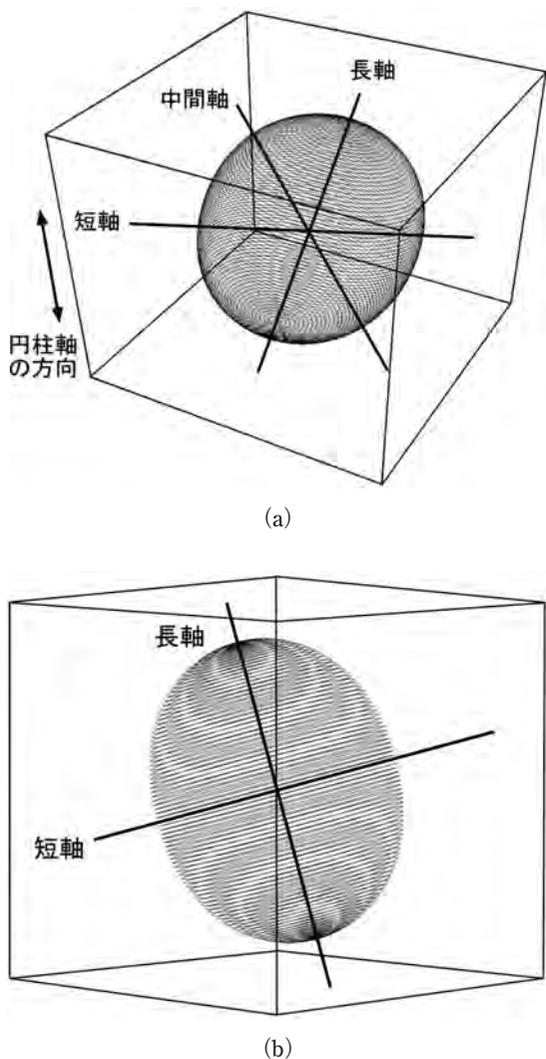


(b)

第5図 ベレア砂岩のCT画像上での乱歩シミュレーション結果。口絵3(p.2)の画像中心部の赤い画素(空隙ネットワークに対応する画素)で30万人ものマイクロな酔漢を放出し、4万時間ステップ経過後の3次元位置のスナップショット(いわゆる拡散フロント)。座標軸の長さの単位は、1画素(7.4ミクロン)。斜め上方から見下ろした鳥瞰図(a)と円柱軸に平行に投影した図(b)を示しました。

行いました。

シミュレーション結果を第5-6図に示します。Intel Pentium Mプロセッサ(1.6GHz)を用いたWindows XPノートPCで89分かかりました。第5図では、30万人の酔漢の4万時間ステップ後の位置を表示してい



第6図 拡散係数の方向依存性を3次的にシェル状(球殻状)に表示したもの(ワイヤーフレームレンダリングで表示)。楕円体フィッティングしたときの3つの主軸(長軸, 短軸, 中間軸)も表示。鳥瞰図(a)と中間軸に垂直に投影した図(b)。長軸と試料の円柱軸とのなす角度は15°, 短軸と長軸の長さの比は1:1.3, つまり長軸方向は短軸方向より約30%だけ拡散速度が高いということになります。

ます。第5図(b)をよく見ると、黒い酔漢の分布は決して球形ではなく(等方的ではなく)、砂岩試料の円柱軸方向に少しだけ伸長していることがわかります。これは、円柱軸方向に拡散しやすいという異方性の存在を示唆しています。第6図は、平均自乗変位から計

算した拡散係数の方向依存性をシェル状(球殻状)に表示したもので、原点から球殻上までの距離がその方向の(規格化された)拡散係数です。第6図では、シェルを楕円体と近似して、その3つの主軸を描き足しています(拡散係数テンソルの主値と主軸方向を計算したことになります)。第6図で明らかのように、ベレア砂岩試料はラグビーボールのようにある方向に拡散係数が突出しており、その突出方向は、円柱に整形した試料の軸(層理面に垂直方向)にほぼ平行です(厳密に言えば、円柱軸と15°の低角度で斜交しています)。これは、第5図と整合的な結果です。ここでは詳細は論じませんが、空隙の幾何学的な伸長方向を3次元自己相関関数を計算することで推定することが可能で、それによると、空隙の伸長方向はやはり層理面にほぼ垂直、つまり、拡散係数が突出している方向とほぼ一致していることがわかりました(Nakashima et al., 2008)。結論として、岩石中の拡散については、空隙が伸びている方向に拡散しやすいということがわかりました。空隙の変形の原因は特定できていませんが、堆積盆での続成作用やその後の隆起時などで生じた空隙の異方性が、そのまま、岩石中の拡散の異方性に反映されているというわけです。

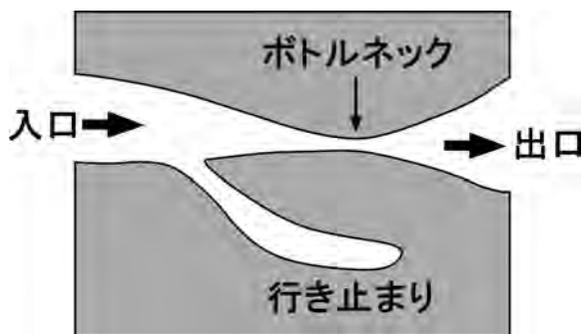
第6図は、拡散係数の方向依存性を緯度と経度を1°刻みで四方八方に計算したものです。その方角の数は総じて、32,401方向です。これと同じ量のデータを従来の拡散セル法で出すのは大変です。セルに装填する定方位試料を32,401個切り出す必要があるうえに、1個の試料の拡散実験に数日から数週間もかかるからです。X線CTを用いたデジタル画像上での乱歩シミュレーションがわずか89分で済んだことは、岩石の新しい異方性拡散試験法としてのCTの将来性を示唆するものです。

4.2 電気を流すシミュレーション

ここでは、乱歩シミュレーション以外のシミュレーションの予察的結果を紹介します。第3図や口絵3(p.2)に示したように、天然の岩石の空隙構造は複雑で、決して第2図(b)のような一様な直径のパイプのネットワークではありません。当然、第7図のようなボトルネックや行き止まり構造があるはずで、前者は、文字通りボトルネックとなってシステム全体の拡散物質移動を律速する可能性があります。後者は、流入してきた拡散物質をトラップする可能性があります。ともに、

系全体の拡散輸送性能を低下させる要因になります。両者がどれくらいの数存在して、全体の拡散輸送を定量的にどれだけ阻害しているか、を分析する研究を遂行中です。

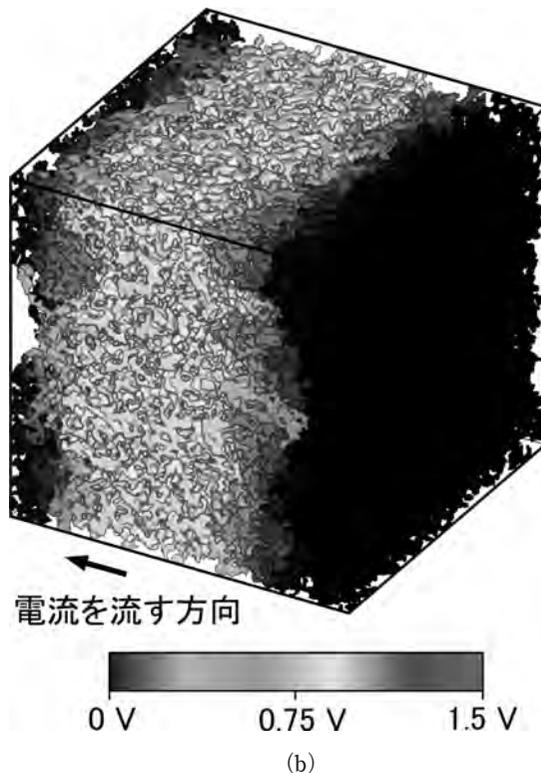
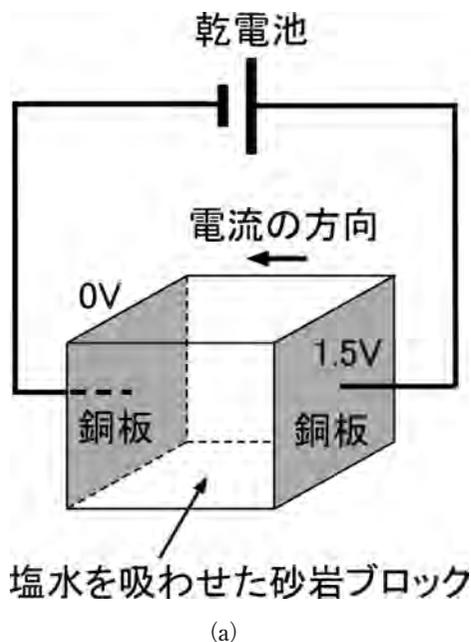
ところが、第5-6図のような自己拡散の乱歩シミュレーションでは、ボトルネックや行き止まりの検出は困



第7図 ボトルネック(くびれ)とデッドエンド(行き止まり)の構造をもつ多孔質岩石の空隙構造の概念図。左から物質が流入し、右から流出すると想定しています。

難です。それらを検出するには、第7図のように入り口と出口の物質濃度を指定して、その境界条件の下で場の方程式を解く必要があります(乱歩シミュレーションより桁違いに時間がかかります)。物質拡散と電気伝導は、同じ方程式(3次元ラプラス方程式)にしたがい、電気伝導現象の方がイメージがわかりやすいので、以降は、物質を拡散させる代わりに、岩石に電気を流すシミュレーションという想定で記述します。電気探査という物理探査においては、現実に地面に電極を打ち込んで電気を地下に流して地層や地盤の2-3次元イメージングを行います。したがって、ラプラス・シミュレーションは、汚染物質の拡散評価だけでなく、物理探査データ解釈にも貢献できる岩石物性シミュレーションといえます。

第8図(a)のように、多孔質岩石ブロックを切り出し、その空隙を電気伝導度の高い液体(たとえば塩



第8図 岩石に電気を流すシミュレーション。(a) 塩水を浸み込ませた立方体の砂岩ブロックに電気を流す概念図。立方体の向かい合う2面に銅板の電極を貼り付け、乾電池に接続して1.5Vの電位差を与えます。(b) ベレア砂岩に関する電流シミュレーション結果。岩石の空隙を埋めている塩水の電位をグレースケールで表示、画像サイズは、420³画素=4.1³mm³。内部構造を見せるため、銅板の電極は省略し、固体と孤立した空隙の画素も透明にしてあります。(b)のカラー版を口絵4(p.2)に表示してあります。

水)で満たして、向かい合う2面に電位差を与えて、岩石内部に電気を流すシミュレーションを行いました。固体部分は、絶縁体とみなしました。空隙の画素の電位を未知数として、3次元の調和方程式(ラプラス方程式)をSuccessive Over-Relaxationという伝統的な手法で数値的に解きました。岩石ブロックとして、口絵2(p.1)とは別のCTシステムで撮影したベレア砂岩試料のCT画像データ(Nakashima *et al.*, 2008)を採用しました。その結果が、第8図(b)(カラー版は口絵4:p.2)です。空隙の電位は、巨視的に電圧を印加した方向に向かっておおむね直線的に1.5Vから0Vに低下していくのが図からわかります。しかし、図をよく見ると、局所的な空隙構造の乱れが原因で、直線的でない電圧低下スポット(急勾配のボトルネックやゼロ勾配の行き止まり)がありそうです。図の電位分布を隣り合う画素間で差分を計算すれば、電流の空間分布に変換でき、ボトルネックや行き止まり部分が抽出できるので、現在、その作業を実施中です。両者がどれくらいの数で存在して、システム全体の電気伝導あるいは拡散輸送を定量的にどれだけ阻害しているか、についての解答がいずれ得られると思われる。

5. おわりに

この小論で、X線CTの威力をわかっていただけたと思います。X線CTは、乱歩のシミュレーションだけでなく、岩石の弾性変形(Arns *et al.*, 2002)や岩石内部の地下水の流れのシミュレーション(Arns *et al.*, 2004)にも使えます。今回使用したCTは、空間分解能が約10ミクロンしかないので、空隙サイズが1ミクロン以下であるところの多孔質粘土を含む岩石試料の空隙構造のイメージングには適しません。しかし、CTの空間分解能は日進月歩で、最新の装置は分解能50 nm程度のスペックを誇ります。また、3次元CT画像

処理用のソフトウェアの整備も着実に進んでいます(たとえばSlice, <http://www-bl20.spring8.or.jp/slice/>で公開中)。近い将来、CTは多孔質岩石物性のシミュレーションになくてはならないツールになることと想います。

文献リスト

- Arns, C.H., Knackstedt, M.A., Pinczewski, W.V. and Garboczi, E.J. (2002) : Computation of linear elastic properties from microtomographic images: Methodology and agreement between theory and experiment. *Geophysics*, 67, 1396-1405.
- Arns, C.H., Knackstedt, M.A., Pinczewski, W.V. and Martys, N.S. (2004) : Virtual permeametry on microtomographic images. *J. Petrol. Sci. Eng.*, 45, 41-46.
- Carlson, W.D. (2006) : Three-dimensional imaging of earth and planetary materials. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 249, 133-147.
- Ketcham, R.A. and Carlson, W.D. (2001) : Acquisition, optimization and interpretation of X-ray computed tomographic imagery: applications to the geosciences. *Comp. Geosci.*, 27, 381-400.
- 中野 司・中島善人・中村光一・池田 進(2000) : X線CTによる岩石内部構造の観察・解析法. *地質学雑誌*, 106, 363-378.
- 中島善人(2005) : X線CTで岩石中の空隙をイメージングする. *地学雑誌*, 114, 1032-1043.
- Nakashima, Y. and Kamiya, S. (2009) : Anisotropic diffusion in fibrous porous media. *J. Porous Media* (in press).
- Nakashima, Y., Kamiya, S. and Nakano, T. (2008) : Diffusion ellipsoids of anisotropic porous rocks calculated by X-ray computed tomography-based random walk simulations. *Water Resour. Res.*, 44, W12435.
- Ohlsson, Y. and Neretnieks, I. (1995) : Literature survey of matrix diffusion theory and of experiments and data including natural analogues, SKB Tech. Rep. TR 95-12, Swed. Nucl. Fuel and Waste Manage. Co., 1-89.
- Okumura, S., Nakamura, M., Tsuchiyama, A., Nakano, T. and Uesugi, K. (2008) : Evolution of bubble microstructure in sheared rhyolite: Formation of a channel-like bubble network. *J. Geophys. Res.*, 113, B07208.
- 高橋 学・藤野 翔・竹村貴人・道口陽子(2007) : マイクロフォーカスX線CTを用いた拘束圧および間隙水圧変化による岩石の変形挙動観察について. *応用地質*, 48, 253-257.

NAKASHIMA Yoshito and NAKANO Tsukasa (2009) : Ramp: Random walk simulation for porous rocks.

<受付:2009年1月9日>