

二酸化炭素地中貯留の大規模シミュレーション技術の開発

プロジェクト責任者

山本 肇 大成建設株式会社 技術センター

著者

山本 肇^{*1}、七井 慎一^{*1}、Keni Zhang^{*2}、西川 憲明^{*3}、廣川 雄一^{*3}、緒方 隆盛^{*4}、
中島 研吾^{*5}

- * 1 大成建設株式会社 技術センター
- * 2 同済大学, ローレンスバークレー国立研究所
- * 3 独立行政法人 海洋研究開発機構
- * 4 日本電気株式会社 HPC 事業部
- * 5 東京大学 情報基盤センター

利用施設：独立行政法人海洋研究開発機構 地球シミュレータ

利用期間：平成 25 年 4 月 1 日～平成 26 年 3 月 31 日

アブストラクト

地球温暖化対策の一つとして、火力発電所などの排ガスから二酸化炭素を分離・回収し、地下深部約 1km の地層中に圧入する、「二酸化炭素の地中貯留技術」がある。本技術の事業化にあたり経済的・社会的受容の観点からも圧入後の二酸化炭素の地下挙動を正確にシミュレートし、貯留の長期的安定性や環境影響リスクを正確に予測する技術の確立が重要な課題になる。本研究では、地球シミュレータを用いて CO₂ の地中挙動を高精度で数値解析する技術を開発する。今年度は貯留層中に圧入された後の CO₂ 長期的安定性に関し、海外の実証試験の 3 次元フィールドモデルでの界面不安定性を考慮した解析を昨年度から継続実施した。

キーワード：大規模シミュレーション、二酸化炭素、地球温暖化、地下水

1. 目的

地球温暖化対策の一つとして、火力発電所などの排ガスから二酸化炭素を分離・回収し、地下深部約 1km の地層中に圧入する、「二酸化炭素の地中貯留技術」がある¹⁾。その実用化にあたっては、貯留事業の経済性や社会的受容性獲得の観点から、圧入後の二酸化炭素の地中挙動ならびに周辺への影響を評価する技術の確立が重要な課題であり、そのアプローチの一つとして数値シミュレーションが重要になる。

二酸化炭素の地中貯留に関わる数値シミュレーションでは、図 -1 に示すように、数 10cm の CO₂ 圧入井の近傍から数 10km 以上の広がりを持つ貯留層や堆積盆まで幅広いスケールでの様々な物理化学現象が計算の対象となる。通常、それらの数値シミュレーションでは、個別に問題に応じて適切な

スケールを設定してモデル化・解析する必要がある。しかし、高速な大規模並列計算技術を用いれば、各スケールの個別モデルを1つのモデルに統合することや、地層分布の高解像度モデルを粗視化（アップスケーリングなど）せずに直接解くこと、あるいは非常に詳細な空間離散化が要求される物理現象（例えば、本年度の対象である界面不安定性の解析）などへの対応が容易あるいは可能になると考えられる。

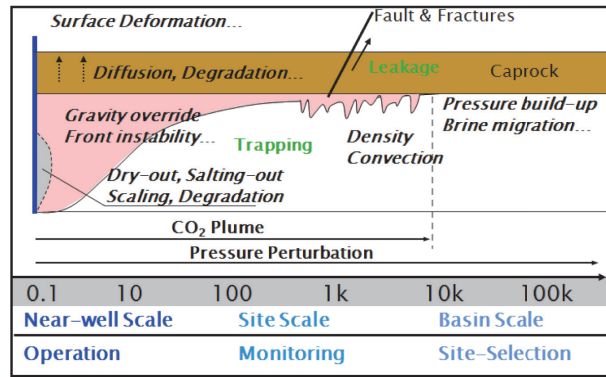


図-1 CO₂ 地中貯留の様々なスケールでの現象

本研究では、平成19年度～22年度に地球シミュレータを用いて、東京湾を対象としたケーススタディ²⁾や米国の実証試験³⁾、高度不均質性や界面不安定性問題^{4), 5)}などを対象とした大規模解析を実施してきた。CO₂ 地中貯留問題への適用を通じて大規模解析技術の工学的な実用性を高め、応用対象の拡大を図る。本年度は、平成24年度から実施している界面不安定性のCO₂ 長期的安定性への影響解析を継続し、当初予定したCO₂ 圧入開始から1000年間の計算を完了した。

2. 解析手法

2-1 解析コード

本研究では、多成分・多相系の地下流体シミュレータ TOUGH2⁶⁾ の並列化バージョンである TOUGH2-MP⁷⁾ を用いる。二酸化炭素は地下深部約1kmに圧入するのが安全面、効率面において最適と考えられているが、その温度・圧力条件下において二酸化炭素は超臨界状態となる。超臨界状態の二酸化炭素の密度や粘性は、温度・圧力に対して敏感に変化する。また、水と二酸化炭素の相互作用（溶解、混相流特性）も考慮する必要がある。今回の計算では、ECO2N という EOS モジュールを用い、非等温系での3成分（H₂O, NaCl, CO₂）2相（水相、CO₂相）系流体を取り扱う。

2-2 支配方程式

閉境界 Γ_n に囲まれた体積 V_n に対して積分されたエネルギー・質量保存則は次式で表される。

$$\frac{d}{dt} \int_{V_n} M^k dV_n = \int_{\Gamma_n} \mathbf{F}^k \cdot \mathbf{n} d\Gamma_n + \int_{V_n} q^k dV_n \quad (1)$$

ここに、 M^k :成分 κ の単位体積当たりの質量 (kg/m³) またはエネルギー (J/m³)、 \mathbf{F}^k :成分 κ のフラックス (kg/m²s または J/m²s)、 q^k :成分 κ のシンク/ソース項 (kg/m³s または J/m³s)、 \mathbf{n} は部分要素 $d\Gamma_n$ の法線ベクトルである。左辺の M^k は次のように書ける。

$$\text{質量: } M^k = \phi \sum_{\beta} S_{\beta} \rho_{\beta} X_{\beta}^k \quad (2)$$

$$\text{熱: } M^h = (1-\phi) \rho_R C_R T + \phi \sum_{\beta} S_{\beta} \rho_{\beta} U_{\beta} \quad (3)$$

ここに、 ϕ : 空隙率、 S_β : β 相の飽和度、 ρ_β : β 相の密度 (kg/m^3)、 X_β^κ : β 相における成分 κ の質量分率、 ρ_R : 岩石粒子の密度 (kg/m^3)、 T : 温度 ($^\circ\text{C}$)、 C_R : 岩石の比熱 ($\text{J}/\text{kg}^\circ\text{C}$)、 U_β : β 相の内部エネルギー (J/kg)、上付き添字の h は熱を表す。

移流による質量フラックスは、全ての相のフラックスを合計して求められる。

$$\mathbf{F}^\kappa \Big|_{\text{adv}} = \sum_\beta X_\beta^\kappa \mathbf{F}_\beta \quad (4)$$

β 相の質量フラックスは、次式の多成分に拡張したダルシー則により計算する。

$$\mathbf{F}_\beta = \rho_\beta \mathbf{u}_\beta = -k \frac{k_{r\beta} \rho_\beta}{\mu_\beta} (\nabla P_\beta - \rho_\beta \mathbf{g}) \quad (5)$$

ここに、 μ_β : β 相の粘性係数 (kg/ms)、 \mathbf{u}_β : 流速、 k : 絶対浸透率 (m^2)、 $k_{r\beta}$: β 相の相対浸透率、 P_β : β 相の圧力 (MPa) である。熱フラックスは、熱伝導と熱対流を考えて、

$$\mathbf{F}^h = -\lambda \nabla T + \sum_\beta h_\beta \mathbf{F}_\beta \quad (6)$$

ここに、 λ : 熱伝導率 ($\text{W}/\text{m}^\circ\text{C}$)、 T : 温度 ($^\circ\text{C}$)、 h_β : β 相の比エンタルピー (J/kg) である。

2-3 数値解法

(1) 式を、積分差分法により時間と空間について離散化すると、次のような残差形式の非線形代数方程式が得られる。

$$\begin{aligned} R_n^\kappa(\mathbf{x}^{t+1}) &= M_n^\kappa(\mathbf{x}^{t+1}) - M_n^\kappa(\mathbf{x}^t) \\ -\frac{\Delta t}{V_n} \left\{ \sum_m A_{nm} F_{nm}^\kappa(\mathbf{x}^{t+1}) + V_n q_n^{\kappa,t+1} \right\} &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

ここに、ベクトル \mathbf{x}^t : 時間 t における解 (温度、圧力、飽和度など)、 R_n^κ : グリッドブロック n における成分 κ に関する残差、 V_n : ブロック n の体積、 $q_n^{\kappa,t+1}$: 質量またはエネルギーのシンク/ソース、 Δt : 時間ステップ、 A_{nm} : ブロック n と m が接する面積、 F_{nm}^κ : ブロック n と m 間の平均フラックス、である。そして、(7) 式をニュートン・ラプソン法により解く。

$$-\sum_i \frac{\partial R_n^{\kappa,t+1}}{\partial x_i} \Big|_p (x_{i,p+1} - x_{i,p}) = R_n^{\kappa,t+1}(x_{i,p}) \quad (8)$$

ここに、 $x_{i,p+1}$ は i 番目の変数の p 回目の反復計算ステップでの値である。

3. 重力対流を考慮した CO_2 長期的安定性の検討

地下に圧入された超臨界状態の CO_2 は、密度が水よりもやや小さい (比重 0.5 ~ 0.8) ため、浮力によって地表へ上昇するポテンシャルを有している。そこで、CCS では、貯留層を覆うキャップロックと呼ばれる低浸透性の地層により、 CO_2 の上昇を抑え込むことが必要である。一方、 CO_2 は周辺の地下水に溶け込むが、 CO_2 が溶け込んだ水の比重は若干増加するため (地下水の塩分濃度によるが、0.1% ~ 1% 程度)、負の浮力を有する安定性の高い貯留状態になると考えられている (例えば、IPCC, 2005)。

この点に関し、上側の流体が下側の流体より重いときに生じる重力不安定性（レイリー・テラー不安定性, Rayleigh- Taylor instability) が CO₂ の地下水への溶解を促進することが指摘されている⁸⁾ (図-2)。

重力不安定性を正確に数値計算するには高解像度の格子を用いる必要があることが知られている。例えば、線形安定性解析の理論によれば、比較的浸透率の高い貯留層（絶対浸透率 1darcy）では 1cm オーダーの格子間隔が必要とされる。本課題では、cm オーダー格子を用いた高解像度シミュレーションにより、密度対流による CO₂ 長期安定性への効果を検討する。平成 22 年度には、Pruess and Zhang⁹⁾ を参考に 1m × 1m × 4m の領域の局所スケールモデルについて予察的な解析を実施した。地球シミュレータを用いれば、局所モデルをスケールアップし、重力対流が CO₂ の長期安定性に及ぼす効果を貯留層全体のスケールで計算できる可能性がある。そこで、今年度は、実際の CO₂ 貯留層をモデル化した 3次元のフィールドモデル（約 600 万自由度）を用いて、CO₂ を溶解した地下水の重力対流をシミュレートすることを試みた。モデル化範囲は CO₂ 圧入井から半径約 1.2km 範囲の厚さ約 80m の CO₂ 貯留層であり、CO₂ が到達する圧入井近傍の領域の格子サイズを約 50cm に詳細化した。CO₂ の圧入量 10 万 t/年、圧入期間 1 年とし、貯留層の有効孔隙率と絶対浸透率は各々 20%、100mD（鉛直、水平方向とも）とし、相対浸透率曲線には Corey の式を用い、毛管力の効果は無視した。

平成 25 年度はノード時間数の制約から 200 年で計算を途中終了したが、今年度はこれを継続し 1000 年までの計算を完了した。圧入井を通る鉛直断面について、圧入から 1000 年間における CO₂ 貯留層内での CO₂ 飽和度ならびに地下水中の CO₂ 濃度のコンター図を図-3 と図-4 に示す。図-5 に、地下水中の CO₂ 濃度の等値面を示す。貯留層上部に滞留した超臨界状態の CO₂ は（図-3）、地下水中に拡散しながら溶解範囲を広げ、拡散域がある厚さに達すると重力不安定性による地下水対流が発生しフィンガリングが成長している。このフィンガリングにより、超臨界 CO₂ の地下水への溶解が促進され、貯留層内に貯留された CO₂ が徐々に縮小する様子が確認される。

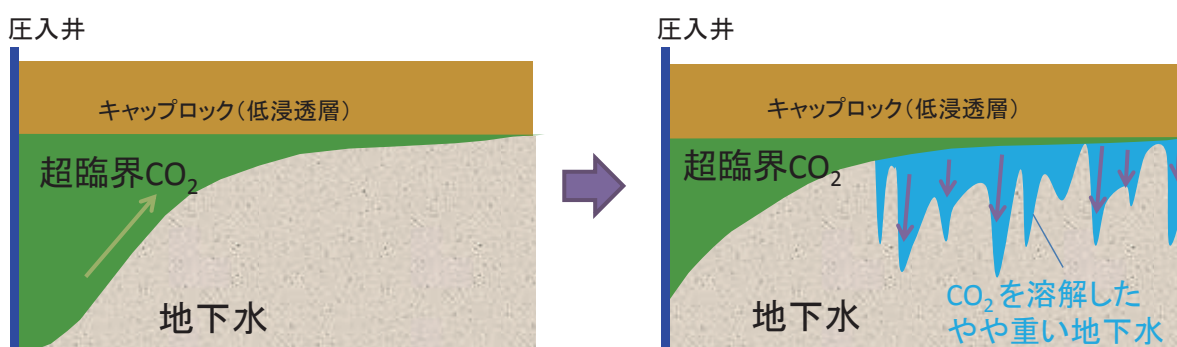


図-2 重力対流による CO₂ 溶解の促進

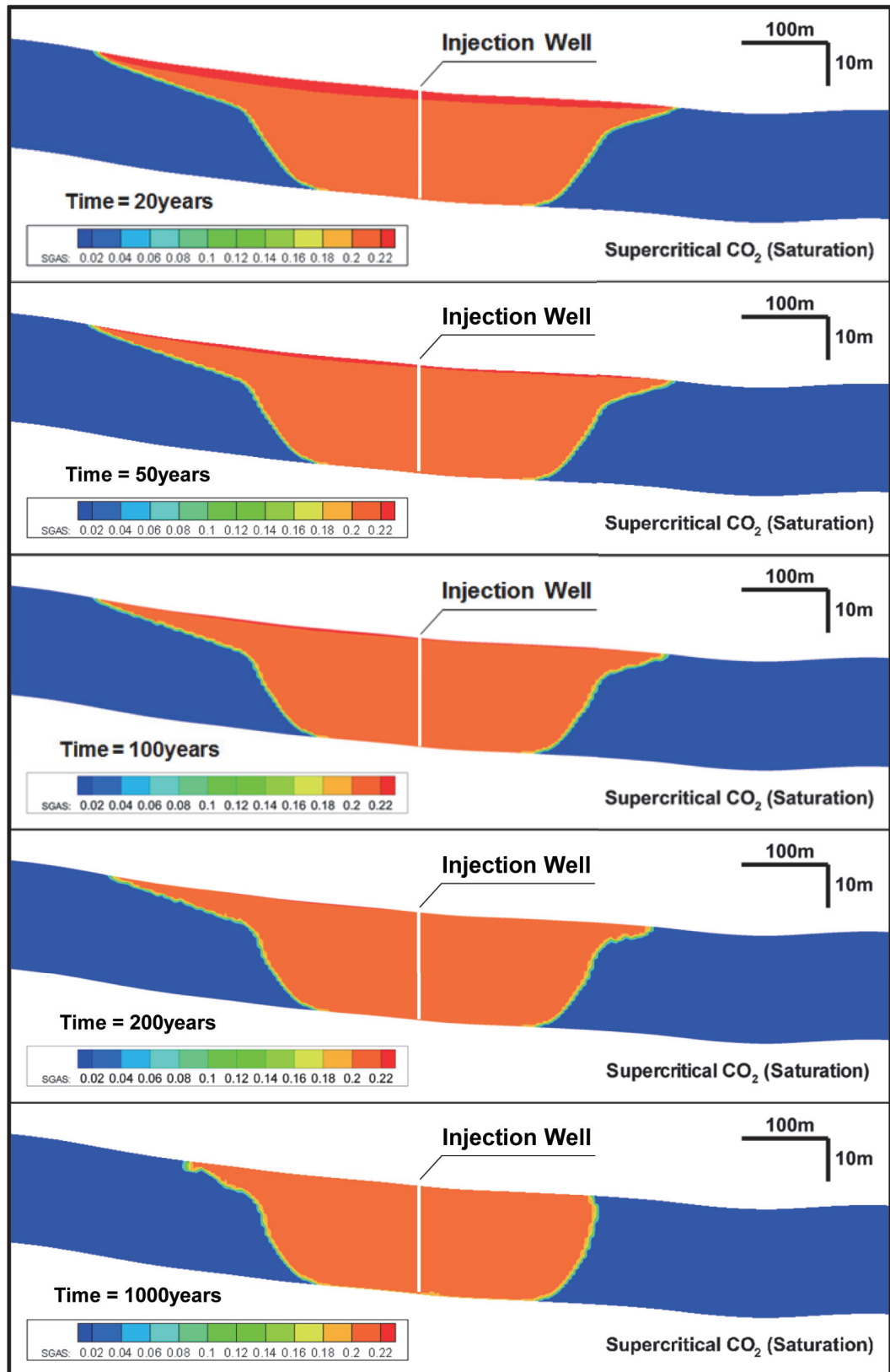


図-3 CO₂貯留層内でのCO₂飽和度 (圧入井を通る鉛直断面)

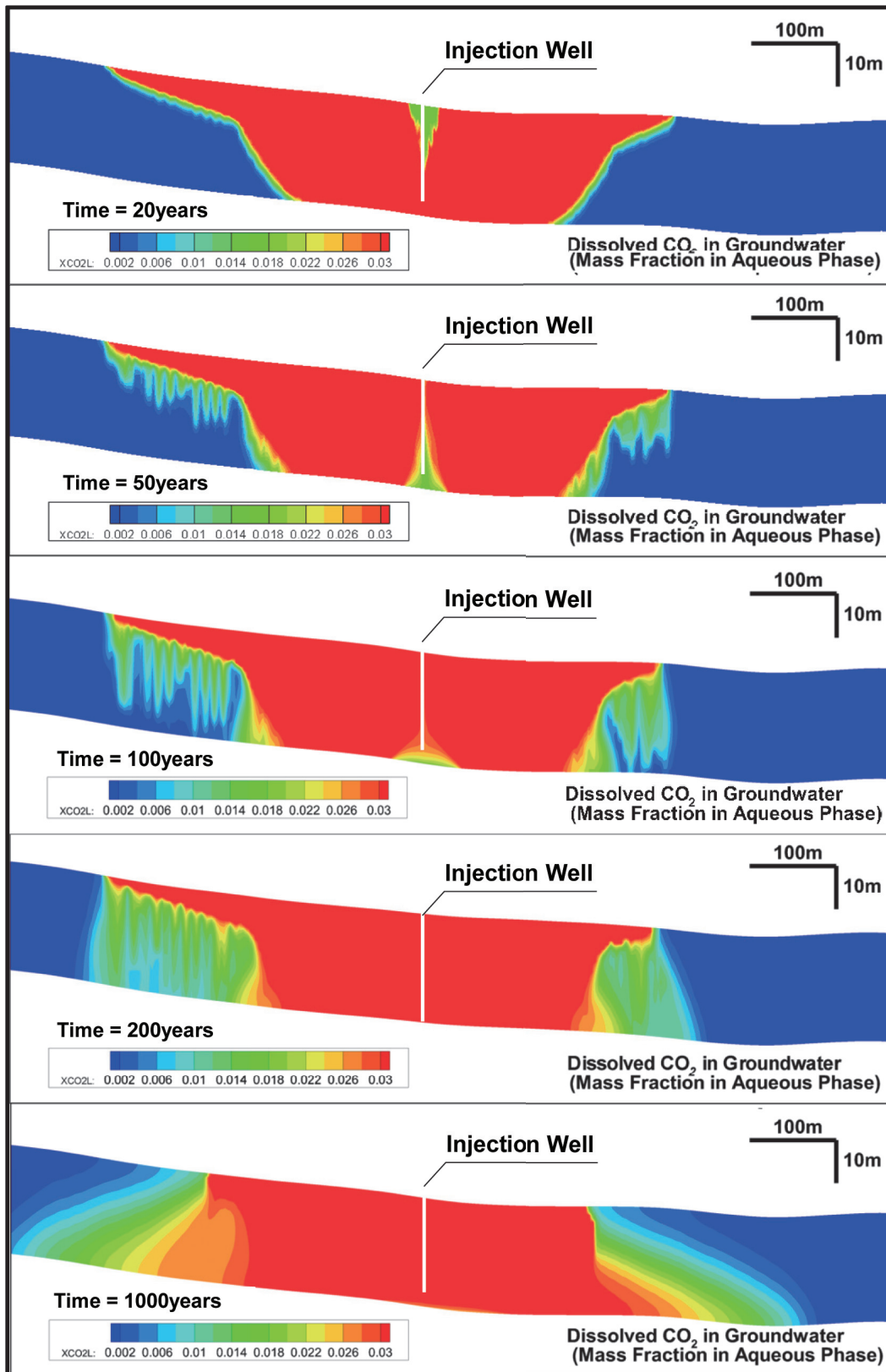


図-4 CO₂貯留層内での地下水中の溶存CO₂の質量分率（圧入井を通る鉛直断面）

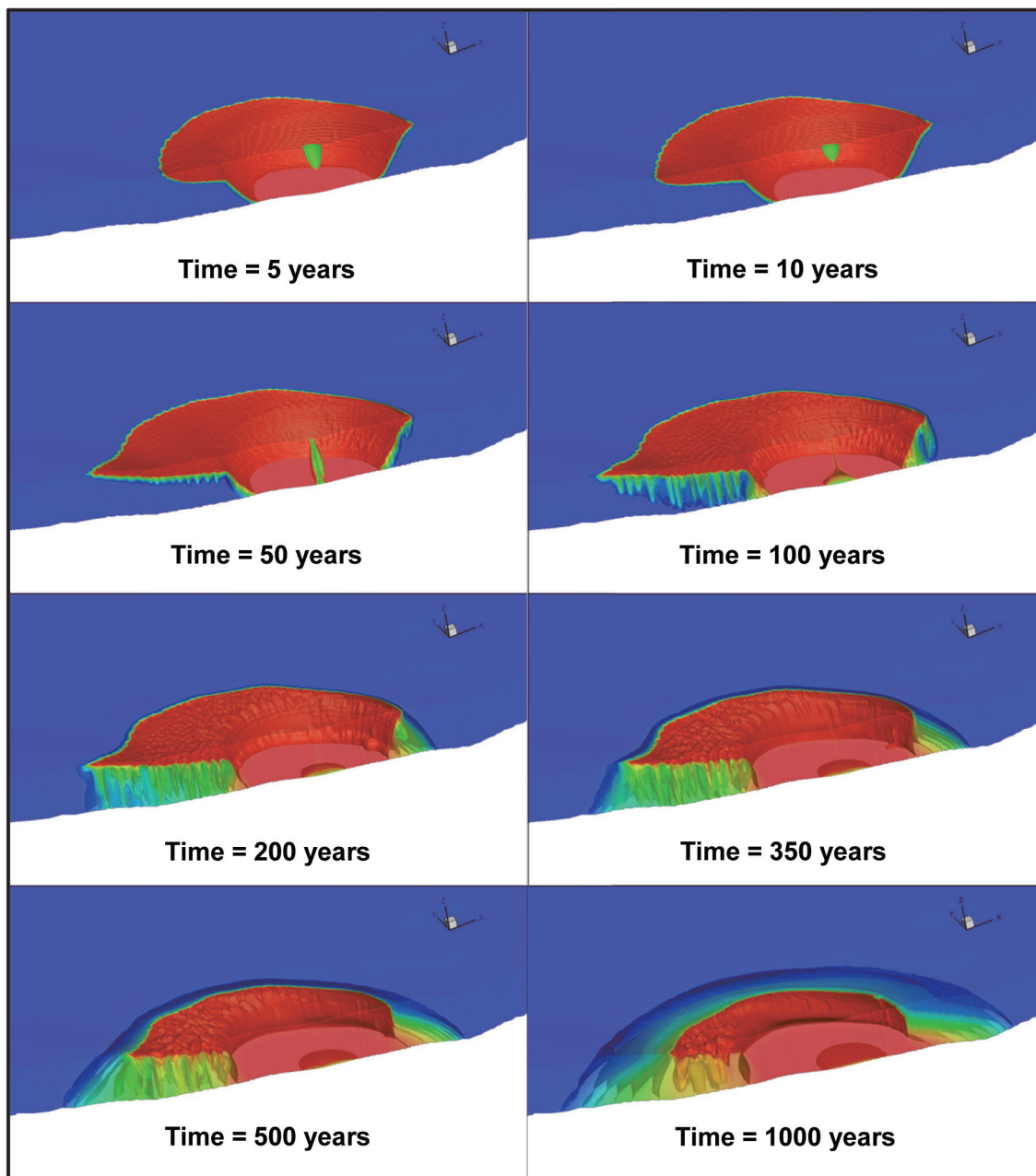


図-5 地下水中のCO₂質量分率の等値面 (圧入井を通る半断面表示、X > 0)

謝辞

本研究は、文部科学省平成 25 年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム「二酸化炭素地中貯留の大規模シミュレーション技術の開発」の一環として行われた。地球シミュレータの利用に際しては（独）海洋研究開発機構 地球シミュレータセンターの方々に懇切なるご指導、ご協力をいただきました。深く感謝いたします。

参考文献

- 1) (財) 地球環境産業技術研究機構, 図解 CO₂ 貯留テクノロジー, 工業調査会
- 2) Yamamoto, H., Zhang, K., Karasaki, K., Marui, A., Uehara, H., Nishikawa, N., Numerical investigation for the impact of CO₂ geologic sequestration on regional groundwater flow, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.3, pp.586-599, 2009.
- 3) Yamamoto, H. and C. Doughty, Investigation of gridding effects for numerical simulation of CO₂ geologic sequestration, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 5, pp.975-985, 2011.
- 4) Yamamoto, H., S. Nanai, K. Zhang, P. Audigane, C. Chiaberge, R. Ogata, N. Nishikawa, Y. Hirokawa, S. Shingu, K. Nakajima, High-performance supercomputing as a risk evaluation tool for geologic carbon dioxide storages, *Proceedings of 11th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT-11)*, Kyoto, Japan, November 18th - 22nd, 2012.
- 5) Yamamoto, H., S. Nanai, K. Zhang, P. Audigane, C. Chiaberge, R. Ogata, N. Nishikawa, Y. Hirokawa, S. Shingu, and K. Nakajima, Numerical Simulation of Long-term Fate of CO₂ Stored in Deep Reservoir Rocks on Massively Parallel Vector Supercomputer, *Lecture Notes in Computer Science* Vol. 7851, Springer Verlag, 2013.
- 6) Pruess, K. C. Oldenburg, G. Moridis, TOUGH2 User's Guide, Ver2, Report LBNL-43134. Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, 1999.
- 7) Zhang, K., Wu, Y.S., Pruess, K., User's Guide for TOUGH2-MP. A massively parallel version of the TOUGH2 code, LBNL-315E, Lawrence Berkeley National Laboratory Report, Berkeley, CA, 2008.
- 8) Ennis-King JP, Paterson L. Role of convective mixing in the long-term storage of carbon dioxide in deep saline formations. *SPE J*, 10(3):349-56. SPE-84344-PA, 2005.
- 9) Pruess, K., K. Zhang, Numerical modeling studies of the dissolution-diffusion-convection process during CO₂ storage in saline aquifers. *Technical Report LBNL-1243E*, Lawrence Berkeley National Laboratory, California, 2008.