

二酸化炭素地下貯留に関する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）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}、上原 均^{*3}、新宮 哲^{*3}、中島 研吾^{*4}

*1 大成建設（株）技術センター

*2 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 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 21 年 6 月 1 日～平成 22 年 3 月 31 日

アブストラクト

二酸化炭素の地下貯留技術とは、地球温暖化対策の一つとして、火力発電所や製鉄所などから排出される二酸化炭素ガスを、地下深部（約 1 km 以深）の地層中に圧入するというものである。本技術の実用化にあたり、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する技術の確立が重要な課題になる。本研究では、米国で計画中の CO₂ 地下貯留の実証試験を例とした高解像度シミュレーションを実施し、圧入後の CO₂ プリュームの形状や広がりにおける計算格子依存性を検討した。

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、環境影響、地下水

1. 目的

地球温暖化対策の一つとして、火力発電所などから排出される二酸化炭素ガスを、地下深部の地層中に圧入するという、二酸化炭素の地下貯留が国内外で認知されつつある¹⁾。その実用化にあたっては、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する技術の確立が重要な課題になる。

二酸化炭素の地下貯留シミュレーションでは、図 -1 に示すように、数 10cm の井戸近傍スケールから 100km にも及ぶ堆積盆スケールまで幅広い現象が計算の対象となる。これらの現象を解くために、各々のスケールのモデルを個別に構築してシミュレートするのが通常のアプローチである。しかし、各モデルの整合性やスケール間の相互作用を評価することが困難あるいは煩雑になる。

計算速度や容量の問題が無ければ、図 -5 に示すような数 10cm ～ 20km スケールまでをカバーするマルチスケール格子を用いることが考えられる。次に、二酸化炭素貯留シミュレーションでは、ボーリング調査や地震探査などの地下探査データにより構築される地下深部の地層分布モデルを用いる。

その一例を図-2に示す。図-2(a)に示すオリジナルの地層モデルでは、地下の砂層と泥層の分布が縦方向に2200層の解像度で構築されている。一般に、シミュレーションにあたっては、計算機速度の問題から、up-scalingと呼ばれる操作により(b)のように単純化される。この操作では、概略の地層構造は保存されるものの、細かな地層の存在や連続性が無視されることになる。一般の貯留層シミュレーションでは、数万格子程度が実用上の上限とされるが、地球シミュレータを用いることにより、(a)の地層モデルをダイレクトに解析することも可能になると考えられる。

本研究では、平成19年度～20年度に地球シミュレータを用いて約1,000万格子の大規模解析を実施してきた。

今年度は、米国炭素隔離地域協力WESTCARBで計画されている実証試験を対象とし、上記の平面及び鉛直方向の計算格子の解像度による解析結果への影響について検討を行った。本実証試験は、カリフォルニア州南部で建設予定の純酸素燃焼式のKimberlina火力発電所(50MW)のサイト内において、年間25万tのCO₂を地下深度2kmの塩水帯水層へ4年間連続圧入するものである。

2. 解析手法

2.1 解析コード

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。本研究では、二酸化炭素の物理化学・流動特性をモデル化した地下流体シミュレータTOUGH2¹⁾の並列化バージョンであるTOUGH2-MP^{2),3)}を用いる。

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。

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

ここに、 M^κ :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}^κ :成分 κ のフラックス(kg/m²sまたはJ/m²/s)、 q^κ :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。

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

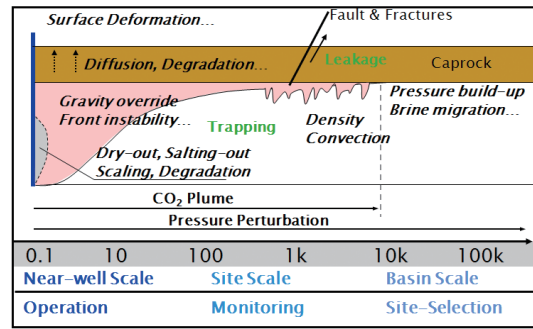
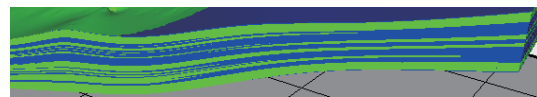
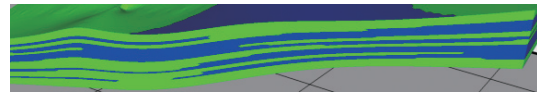


図-1 CO₂地下貯留で対象となる様々なスケールでの現象



(a) オリジナルの地層モデル (2200層)



(b) 単純化した地層モデル (44層)

図-2 数値解析のための地層モデルの単純化

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

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。

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

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。

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_n^k(\mathbf{x}^{t+1}) &= \mathbf{M}_n^k(\mathbf{x}^{t+1}) - \mathbf{M}_n^k(\mathbf{x}^t) \\ - \frac{\Delta t}{V_n} \left\{ \sum_m A_{nm} \mathbf{F}_{nm}^k(\mathbf{x}^{t+1}) + V_n q_n^{k,t+1} \right\} &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

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)、 \mathbf{R}_n^k : 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 : 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、 \mathbf{F}_{nm} : 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。

$$- \sum_i \frac{\partial \mathbf{R}_n^{k,t+1}}{\partial \mathbf{x}_i} \Big|_p (\mathbf{x}_{i,p+1} - \mathbf{x}_{i,p}) = \mathbf{R}_n^{k,t+1}(\mathbf{x}_{i,p}) \quad (8)$$

ここに、 $\mathbf{x}_{i,p+1}$ 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。

平成 19 年度に地球シミュレータ向けにベクトル計算機用のチューニングを行った結果、並列化率

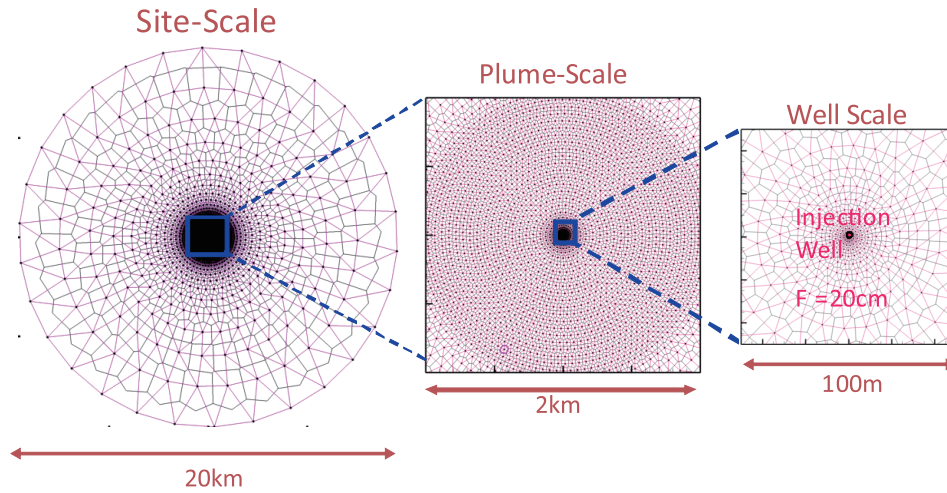
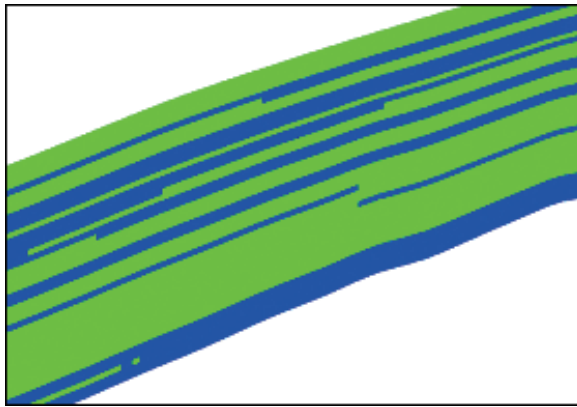
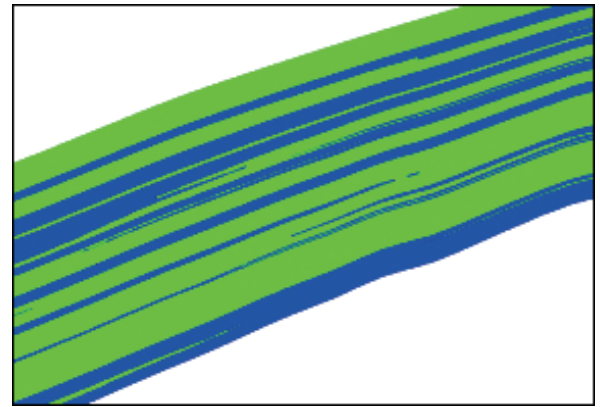


図-5 マルチスケール格子 (ボロノイ分割、平面図)



(a) 粗い計算格子 (44層、約10万格子)



(b) 細かい計算格子 (1100層、約250万格子)

図-6 計算格子 (鉛直断面図、青色：砂層、緑色：泥層)

表-1 解析に用いた物性値⁷⁾

Property		Sand	Shale
Porosity	n	28%	15%
Horizontal permeability	$k_{x, y}$	200md	0.1md
Vertical permeability	k_z	20md	0.01md
Relative permeability parameters			
Residual liquid saturation	S_{lr}	0.2	0.3
van Genuchten parameter	m	0.457*	0.457*
Capillary pressure parameters			
Capillary pressure strength	P_0	1.88×10^4 Pa	8.41×10^5 Pa
van Genuchten parameter	m	0.412	0.412

* 0.917 is adopted in Doughty(2009)

4. 解析結果

圧入開始から1、4、20年後のCO₂ プリュームの挙動を図-7に示す。ここで、図中の灰色部分はCO₂ 飽和度が1%の等値面である。圧入開始後、CO₂ は圧力勾配によって井戸から放射状に広がるが、超臨界CO₂ の密度は地下水よりも小さいため（今回の温度・圧力条件では約0.6g/cm³）浮力が作用する。図-7の鉛直断面を見ると、CO₂ のプリュームはすり鉢状を呈しながら、貯留層上面（遮蔽層）の傾斜（約7°）に沿って上方に移動するのが分かる。浮力の作用によって、CO₂ プリュームが地下水の楔状に乗り上げる現象は、重力オーバーライド（gravity override）と呼ばれている。

重力オーバーライドは、密度の小さい流体が密度の大きい流体の上に乗上げる現象であり、CO₂ の最大移行距離や貯留効率（貯留後に地層の空隙中に占めるCO₂ の割合）に影響を与えるため、貯留性能や漏洩経路を検討する上で重要な要因の一つである。オーバーライドの程度は、2つの流体の密度比や粘性比が大きく、地層の浸透率が高く、圧入速度が遅いほど大きくなる。

数値解析での鉛直方向の格子分割数が少ないと、重力オーバーライドを過小評価することが良く知られている⁷⁾。これらの図から、粗い格子の解析結果は、細かい格子と比べて、（地層の最大傾斜方向に沿った）CO₂ の最大移行距離を約30%過小評価している（図-8中の白破線）。移行距離の差は、地層傾斜の上方向で著しく、下方向での違いは比較的目立たない。

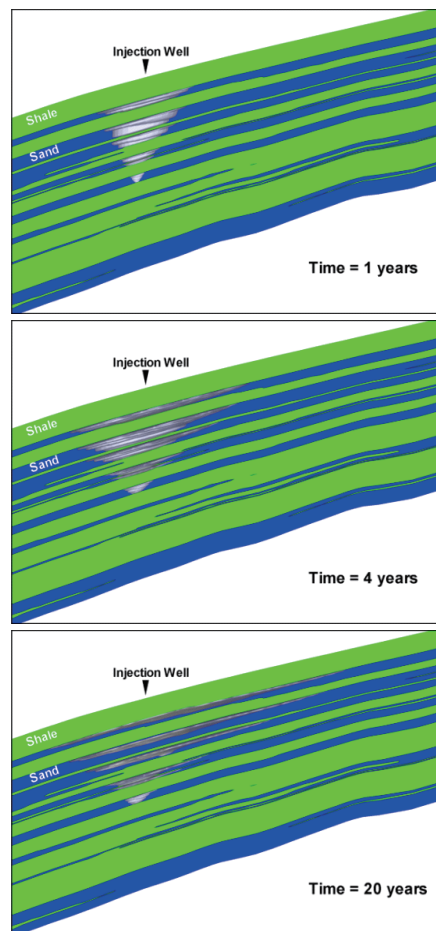
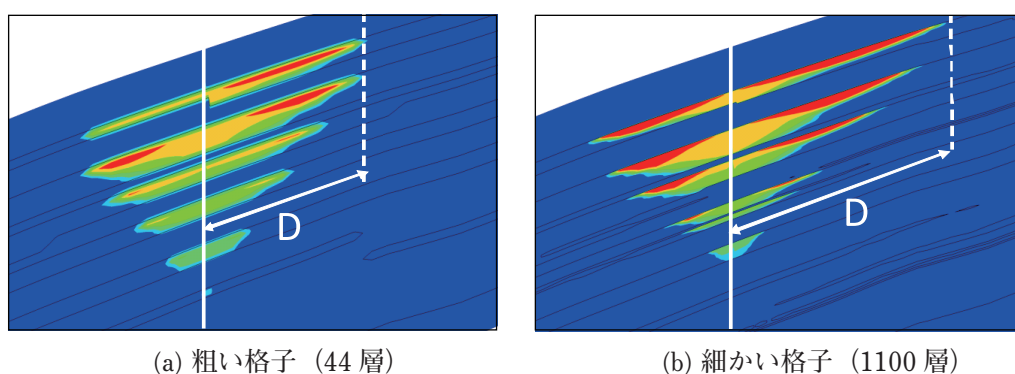


図-7 CO₂プリュームの挙動



(a) 粗い格子 (44層) (b) 細かい格子 (1100層)

図-8 格子解像度によるCO₂ プリュームの広がりの違い

6. まとめ

米国のCO₂地下貯留の実証試験を対象としたCO₂地中挙動解析を実施し、計算格子の形状や解像度(格子分割数)による予測結果の違いを検討した。その結果、粗い格子を用いる場合には、細かな地層の存在や連続性を無視するだけでなく、CO₂プルームの最大移動距離を過小評価する(今回は30%以上)ことが分かった。CO₂地下貯留シミュレーションのように、二相流体の密度や粘性の差が大きい場合には、重力オーバーライドが生じやすく、鉛直方向の格子分割数を十分に確保する必要があることを確認した。

謝 辞

本研究は、文部科学省平成21年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラム「二酸化炭素地下貯留に関する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)海洋研究開発機構の福井義成氏、廣川雄一氏に懇切なるご指導、ご協力をいただいた。プログラムの最適化には、日本電気株式会社の緒方隆盛氏、久保克維氏に多大なるご協力をいただいた。地質モデルをご提供いただいたローレンスリバモア国立研究所のJeff Wagoner氏、研究の実施にご助力いただいたローレンスバークレー国立研究所のChristine Doughty、Larry Myer、Curt Oldenburg、大成建設(株)の今村聡氏、青木智幸氏、小川豊和氏の各氏に感謝いたします。

参考文献

- 1) Pruess, K., The TOUGH Codes—A Family of Simulation Tools for Multiphase Flow and Transport Processes in Permeable Media, Vadose Zone J., Vol. 3, pp. 738 - 746, 2004.
- 2) Zhang, K., C. Doughty, Yu-Shu Wu, K. Pruess, Efficient Parallel Simulation of CO₂ Geologic Sequestration in Saline Aquifers, SPE 106026, 2007.
- 3) Zhang, K., Y.S. Wu, and G.S. Bodvarsson, Massively Parallel Computing Simulation of Fluid Flow in the Unsaturated Zone of Yucca Mountain, Nevada, Journal of Contaminant Hydrology, 2002.
- 4) Yamamoto, H., Zhang, K., Karasaki, K., Marui, A., Uehara, H., and Nishikawa, N., 2009, Numerical investigation for the impact of CO₂ geologic sequestration on regional groundwater flow, International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol.3, pp.586-599.
- 5) Doughty, C., Investigation of CO₂ plume behavior for a large-scale pilot test of geologic carbon storage in a saline formation, Transport in Porous Media, doi:10.1007/s11242-009-9396-z, 2009.
- 6) Wagoner, J., 3D geologic modeling of the southern San Joaquin basin for the Westcarb Kimberlina demonstration project -a status report. Rep. LLNL-TR-410813. Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 2009.
- 7) Yamamoto, H. and C. Doughty, 2009, Investigation of gridding effects for numerical simulation of CO₂ geologic sequestration, Proceedings of TOUGH Symposium 2009.