

# 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 大成建設株式会社 技術センター

## 著者

山本 肇<sup>\*1</sup>、七井 慎一<sup>\*1</sup>、Keni Zhang<sup>\*2</sup>、Pascal Audigane<sup>\*3</sup>、Christophe Chiaberge<sup>\*3</sup>、

西川 憲明<sup>\*4</sup>、廣川 雄一<sup>\*4</sup>、新宮 哲<sup>\*4</sup>、緒方 隆盛<sup>\*5</sup>、中島 研吾<sup>\*6</sup>

\* 1 大成建設株式会社 技術センター

\* 2 ローレンスバークレー国立研究所 (LBNL)

\* 3 フランス地質調査所 (BRGM)

\* 4 独立行政法人海洋研究開発機構

\* 5 日本電気株式会社 HPC 事業部

\* 6 国立大学法人東京大学 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 23 年 4 月 1 日～平成 24 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 1 km の地層中に圧入する、「二酸化炭素の地下貯留技術」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 CO<sub>2</sub> の地中挙動を高精度で数値解析する技術を開発する。本年度は、解析コードの高速化や機能拡張を進め、いくつかの問題について計算速度測定を実施した。

**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 1 km の地層中に圧入する、「二酸化炭素の地下貯留技術」がある<sup>1)</sup>。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。

二酸化炭素の地下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 の井戸近

傍から数100kmにも及ぶ堆積盆まで幅広いスケールにおける様々な物理化学現象が計算の対象となる。通常、これらの現象を個別に適切なスケールでモデル化してシミュレートすることができる。ただし、個別のモデルを用いると、異なる物理化学現象の相互作用やスケール間の整合性を確保することが困難あるいは煩雑になる場合がある。高速に大規模な計算が可能であれば、例えば、数10cm～20kmスケールまでをカバーする大規模な

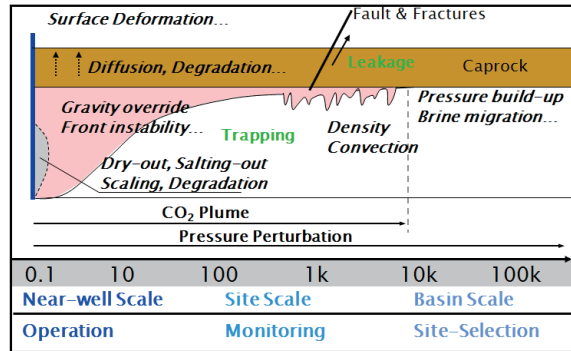


図-1 CO<sub>2</sub> 地下貯留の様々なスケールでの現象

マルチスケール格子を用いることによって、各スケールのモデルを統合することや、地層の分布を詳細に表現した高解像度のモデルを解くことが可能になるなど、多くのメリットがある。

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<sup>2)</sup>や米国の実証試験<sup>3)</sup>、高度不均質性や界面不安定性問題<sup>4)</sup>などを対象とした大規模解析を実施してきた。

本年度は、本研究で使用している多相流体シミュレータ TOUGH2-MP の速度向上や機能拡張を行うとともに、CO<sub>2</sub> 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。

## 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 TOUGH2<sup>5)</sup> の並列化バージョンである TOUGH2-MP<sup>6)</sup> 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(H<sub>2</sub>O, NaCl, CO<sub>2</sub>) 2相(水相、CO<sub>2</sub>相)系流体を取り扱う。

### 2-2 支配方程式

閉境界  $\Gamma_n$  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  $\kappa$  の単位体積当たりの質量 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) またはエネルギー ( $\text{J}/\text{m}^3$ )、 $\mathbf{F}^k$ : 成分  $\kappa$  のフラックス ( $\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$  または  $\text{J}/\text{m}^2\text{s}$ )、 $q^k$ : 成分  $\kappa$  のシンク/ソース項 ( $\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$  または  $\text{J}/\text{m}^3\text{s}$ )、 $\mathbf{n}$  は部分面要素  $d\Gamma_n$  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、 $\phi$ :空隙率、 $S_\beta$ : $\beta$ 相の飽和度、 $\rho_\beta$ : $\beta$ 相の密度 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )、 $X_\beta^\kappa$ : $\beta$ 相における成分  $\kappa$  の質量分率、 $\rho_R$ :岩石粒子の密度 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )、 $T$ :温度 ( $^\circ\text{C}$ )、 $C_R$ :岩石の比熱 ( $\text{J}/\text{kg}^\circ\text{C}$ )、 $U_\beta$ : $\beta$ 相の内部エネルギー ( $\text{J}/\text{kg}$ )、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。

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

$\beta$ 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。

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

ここに、 $\mu_\beta$ : $\beta$ 相の粘性係数 ( $\text{kg}/\text{ms}$ )、 $\mathbf{u}_\beta$ :流速、 $\mathbf{k}$ :絶対浸透率 ( $\text{m}^2$ )、 $k_{r\beta}$ : $\beta$ 相の相対浸透率、 $P_\beta$ : $\beta$ 相の圧力 ( $\text{MPa}$ ) 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、 $\lambda$ :熱伝導率 ( $\text{W}/\text{m}^\circ\text{C}$ )、 $T$ :温度 ( $^\circ\text{C}$ )、 $h_\beta$ : $\beta$ 相の比エンタルピー ( $\text{J}/\text{kg}$ ) 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。

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

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)、 $\mathbf{R}_n^\kappa$ : グリッドブロック  $n$  における成分  $\kappa$  に関する残差、 $V_n$ : ブロック  $n$  の体積、 $\mathbf{q}$ : 質量またはエネルギーのシンク/ソース、 $\Delta t$ : 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。

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

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. 解析コードの高速化と機能拡張

### 3-1 行列ソルバーの変更

本プロジェクトで使用している多相流シミュレータ TOUGH2-MP は、スカラー計算機用に開発されているため、特に行列ソルバー部分のベクトル化率向上に限界があった。オリジナル版の TOUGH2-MP で採用されている行列ソルバー Aztec (Sandia National Laboratory 開発)<sup>7)</sup> では、行列格納形式に DVBR (distributed variable block row) 形式が用いられている。しかし、DVBR 形式はメモリ効率

が優れるものの、行列ベクトル積計算での最内側ループ長が非対角成分の幅（多くの場合 10 以下）と短くなるため、ベクトル化率が悪化して地球シミュレータの計算性能を十分に引き出せないと判断された。

非構造格子の問題に対して並列ベクトル計算機の性能を発揮するためには、メモリアクセスの連続性を高めるとともに最内側のループ長を十分長くする必要がある。固体地球シミュレーション用並列有限要素法プラットフォーム「GeoFEM」では、ベクトルプロセッサ向けに長いループ長が得られるように行列格納形式 JDS (jagged diagonal storage) を採用した行列ソルバーを開発し、地球シミュレータ上で最適化がなされている<sup>8)</sup>。そこで、行列ソルバーをオリジナルの Aztec から GeoFEM をベースにした JDS 形式のものに入れ替えた (図-2b)。反復解法には BiCGSTAB 法を採用した。これに加えて、ループのアンローリング、インライン展開、ボトルネックループの書き換え等によるベクトル化率向上により、ソルバー変更前と比べて 60 倍以上の高速化が得られた。さらに、行列格納方式を同図 c のように行列の下三角成分と上三角成分を敷き詰めて格納するように変更することで、ランクごとの行列ベクトル積の演算数を均等化できロードインバランスが解消されることが確認された。また前処理として、分割領域ごとに並列に前処理を行う Additive Schwarz 前処理と各領域内で Neumann 多項式前処理を組み合わせて実装し、収束性を改善し、さらに約 2 倍 (改良前から比べると約 130 倍) の高速化が達成されている。現在、上述のような演算の高速化やロードインバランスの改善により、通信のロードインバランスが目立つようになっており、これが今後の課題になる。

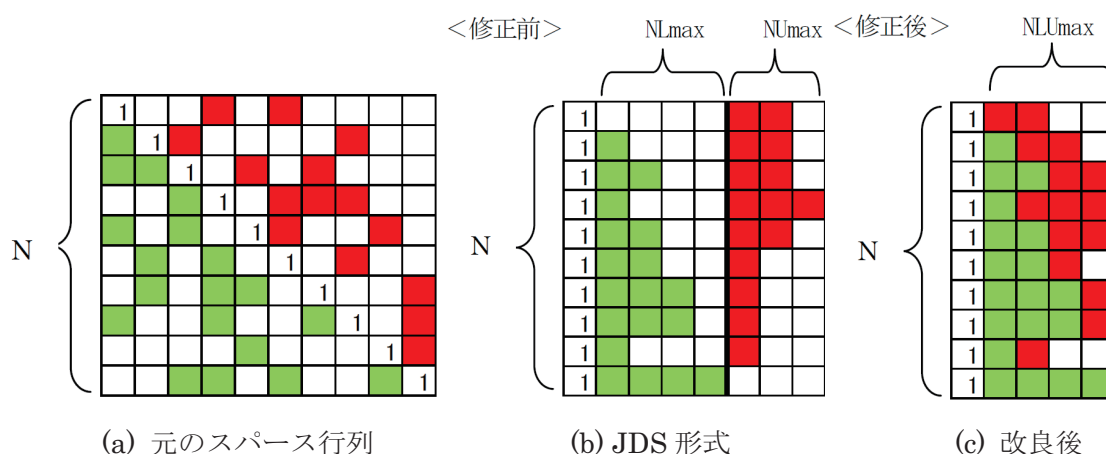


図-2 行列格納方式

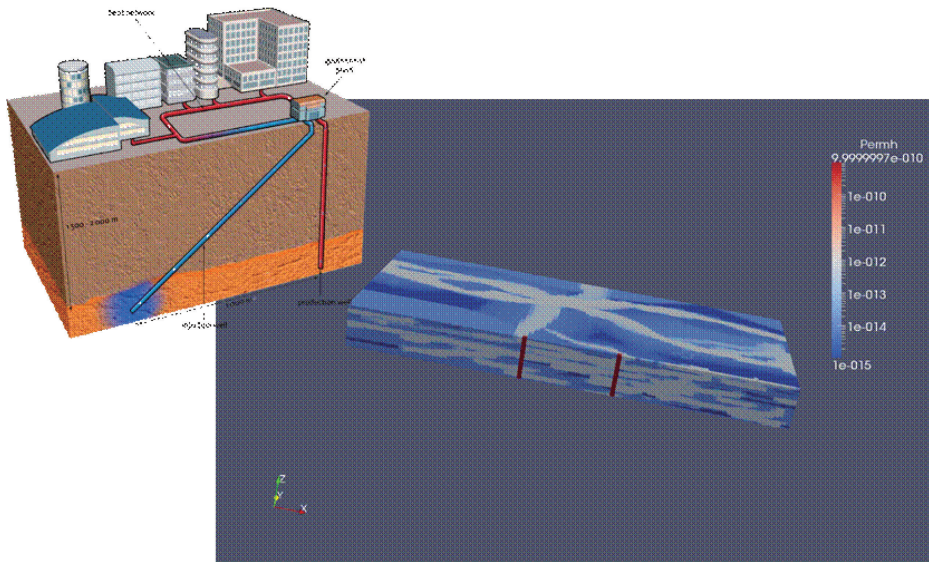
$NL_{max}+NU_{max}$  はランク番号に依存するが、 $NLU_{max}$  はランクによらず一定になる

### 3-2 機能拡張：非等温系への対応

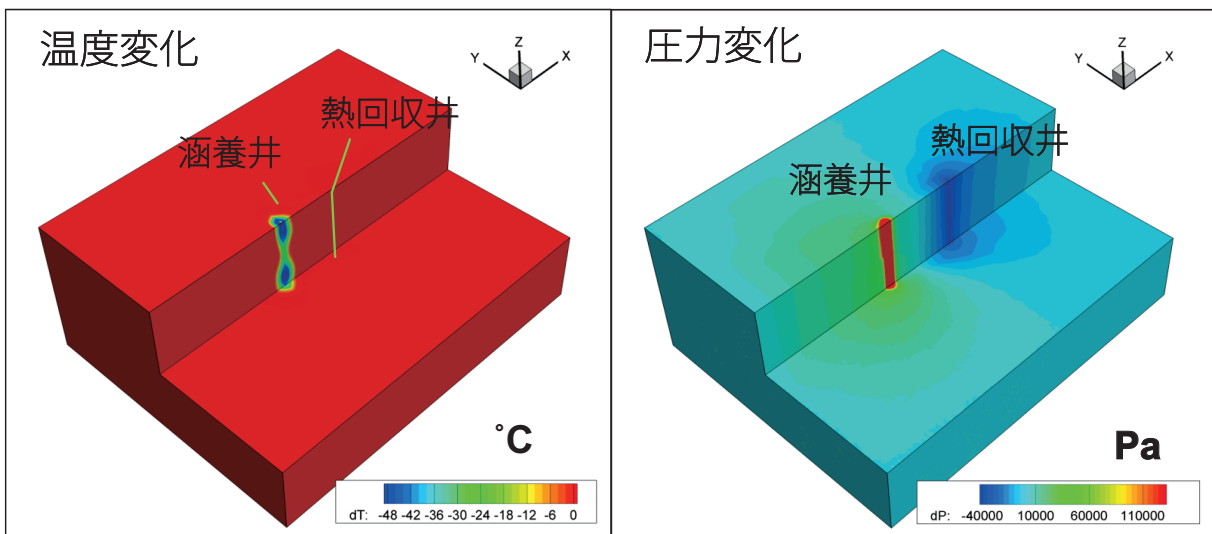
前述した通り、超臨界状態の  $CO_2$  は温度や圧力など地下の貯留層の条件によって流体の粘性や密度が大きく変化する。従って、常温状態の  $CO_2$  を地下深部に圧入する場合には、地中での熱伝導・対流による熱移動も  $CO_2$  の地中挙動を変化させる要因になる。TOUGH2-MP は、元来、非等温系の多相流体の解析コードであるが、地球シミュレータへの移植では簡単のため等温系とし、各格子の自由度は 3 ( $H_2O$ ,  $NaCl$ ,  $CO_2$  の 3 成分) に制限していた。今回、熱を加えた 4 自由度に戻す修正を加えた。

修正したコードの計算性能を確認するため、図-3a に示す 3 次元地層モデルでの EGS 地熱発電のシミュレーション<sup>10)</sup> に修正コードを適用した。地層モデル<sup>11)</sup> は、河川堆積物の構造を模擬したものであ

り、格子数は  $200 \times 160 \times 200 = 640$  万である。この地熱発電システムでは、涵養井と熱回収井の2つの井戸を設置し、涵養井から常温水を圧入し、地層中で加熱された温水を回収井から取り出す。計算結果として得られた圧力と熱の変化の例を図-3bに示す。これらの結果から、計算結果の妥当性を確認した。今後は、CO<sub>2</sub> 圧入時の非等温効果や、地熱発電における熱輸送媒体としてのCO<sub>2</sub> 利用の可能性検討などに活用していく予定である。



(a) 地層モデルと地熱発電の概念 (Audigane et al.<sup>10)</sup>)



(b) 解析結果の例

図-3 EGS 地熱発電のシミュレーション

### 3-3 計算性能の測定結果

ES2 上における行列ソルバー変更後の TOUGH2-MP の計算性能を図-4に示す。図中には、接点数や自由度の異なる4つのモデルから得られた結果を併せて示してある。3-1で述べた改良のうち Neumann 多項式前処理の実装以前の段階での測定結果である。行列演算部分について、2ノード使用時で約 10 ~ 14 GFlops/PE の処理速度 (ベクトル演算率 99.5% 以上) が得られている。ただし、同

図中に示すように、プロセッサ数が増加すると、プロセッサ間の通信負荷が相対的に大きくなって処理速度が低下する。この傾向はモデルの自由度数が小さい場合特に顕著である。

表 -1 計算性能の測定に用いたモデル一覧

	格子数	格子あたり自由度数	全自由度数	実施年度	参考文献
大規模貯留時の周辺地下水影響解析	1.00E+07	3	3.0E+07	H19,H20	2)
地熱貯留層解析 (CLASTIC)	6.40E+06	4	2.6E+07	H23	4), 10)
重力対流を考慮した溶解トラッピング解析	4.00E+06	3	1.2E+07	H22	4), 9)
高度不均質性を有する貯留層解析 (SPE10)	1.10E+06	3	3.3E+06	H22	4), 10)

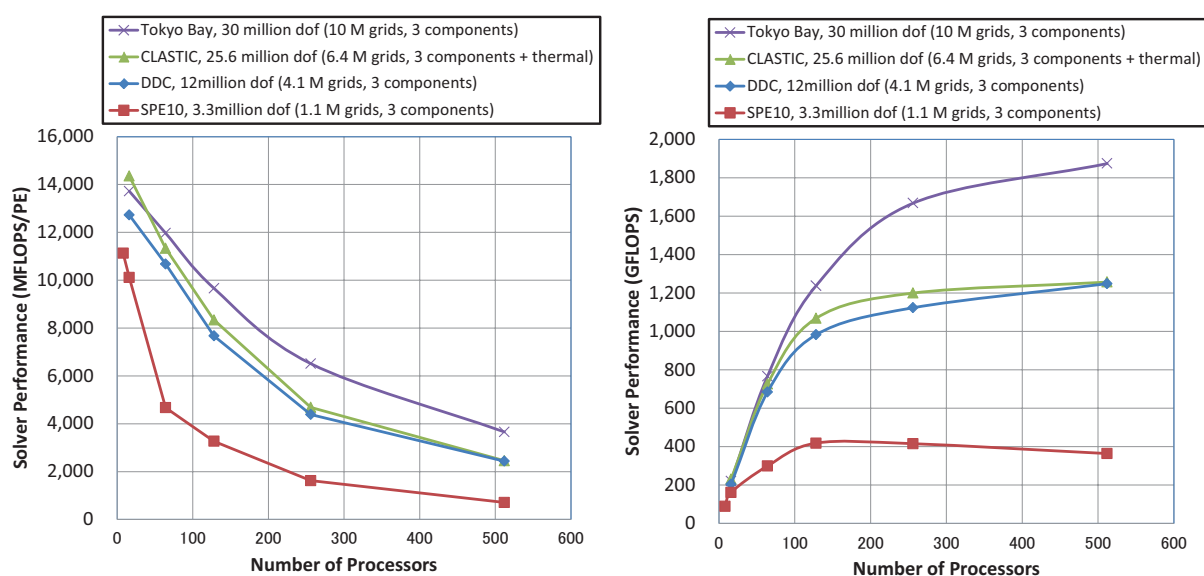


図 -4 ES2 上における TOUGH2-MP の計算性能 (行列ソルバー変更後)

#### 4. まとめ

行列ソルバーの入れ替えを含めた解析コード改良により大幅な高速化が達成され、温度依存性を考慮したシミュレーションも可能になった。

行列格納方式の変更 (DVBR から JDS へ) や、状態方程式モジュール内のボトルネックループの書き換え等によるベクトル化率向上によって 60 倍以上の高速化が達成された。改良したコードを複数の大規模問題に適用し、計算性能を測定した。行列格納方式の改良によるロードインバランスの改善や Neumann 多項式前処理の実装により、さらに 2 倍の高速化がなされている。

今後は今年度の成果を活用し、実証試験などへの適用を進め、大規模解析技術の有効性を示しながら応用対象の拡大を図る。

#### 謝辞

本研究は、文部科学省平成 23 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 地球シミュレータセンターの方々にも懇切なるご指導、ご協力をいただ

いた。プログラムの最適化には、NEC（株）HPC 事業部の方々に多大なる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 CO<sub>2</sub> 貯留テクノロジー, 工業調査会
- 2) Yamamoto, H., Zhang, K., Karasaki, K., Marui, A., Uehara, H., and Nishikawa, N., 2009, Numerical investigation for the impact of CO<sub>2</sub> geologic sequestration on regional groundwater flow, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol.3, pp.586-599.
- 3) Yamamoto, H. and C. Doughty, 2011, Investigation of gridding effects for numerical simulation of CO<sub>2</sub> geologic sequestration, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 5, pp.975-985.
- 4) Yamamoto, H., S. Nanai, K. Zhang, P. Audigane, C. Chiaberge, R. Ogata, N. Nishikawa, Y. Hirokawa, S. Shingu, K. Nakajima, Numerical Simulation of Long-term Fate of CO<sub>2</sub> Stored in Deep Reservoir Rocks on Massively Parallel Vector Supercomputer, *VECPAR2012: 10th International Meeting on High-Performance Computing for Computational Science* (accepted)
- 5) 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.
- 6) Zhang, K., C. Doughty, Yu-Shu Wu, K. Pruess, 2007, Efficient Parallel Simulation of CO<sub>2</sub> Geologic Sequestration in Saline Aquifers, *SPE 106026*.
- 7) Tuminaro, R. S., M. Heroux, S. A. Hutchinson, J. N. Shadid, *Official Aztec user's guide, Ver 2.1, Massively Parallel Computing Research Laboratory, Sandia National Lab., Albuquerque, NM, 1999.*
- 8) Nakajima, K., *Parallel Iterative Solvers of GeoFEM with Selective Blocking Preconditioning for Nonlinear Contact Problems on the Earth Simulator, ACM/IEEE Proceedings of SC2003, Phoenix, AZ, 2003.*
- 9) Pruess, K., K. Zhang, 2008, Numerical modeling studies of the dissolution-diffusion-convection process during CO<sub>2</sub> storage in saline aquifers. *Technical Report LBNL-1243E, Lawrence Berkeley National Laboratory, California.*
- 10) Audigane, P.D., A. Michel, L. Trenty, H. Yamamoto, S. Gabalda, A. Sedrakian, C. Chiaberge, CO<sub>2</sub> injection modeling in large scale heterogeneous aquifers, *Eos Trans. AGU, 92(51), Fall Meet. Suppl., Abstract H51H-1302, 2011.*
- 11) Lopez S. “Modélisation de réservoirs chenalisés méandriques, Approche génétique et stochastique” *Ecole des Mines de Paris, Ph.D Thesis, 2003.*