

# 二酸化炭素地中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>、西川 憲明<sup>\*3</sup>、廣川 雄一<sup>\*3</sup>、緒方 隆盛<sup>\*4</sup>、  
中島 研吾<sup>\*5</sup>

\* 1 大成建設株式会社 技術センター

\* 2 北京師範大学, 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 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 24 年 4 月 1 日～平成 25 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 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。今年度は 貯留層中に圧入された後の CO<sub>2</sub> 長期的安定性に関し、界面不安定性を考慮した解析を海外の実証試験の 3 次元フィールドモデルについて実施した。

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<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（アップスケーリング）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、地層分布の高解像度モデルをアップスケーリングせずに直接解くことができる。また、本年度で対象とする界面不安定性の解析などでは、非常に詳細な空間離散化が要求される場合も対応が可能になる。

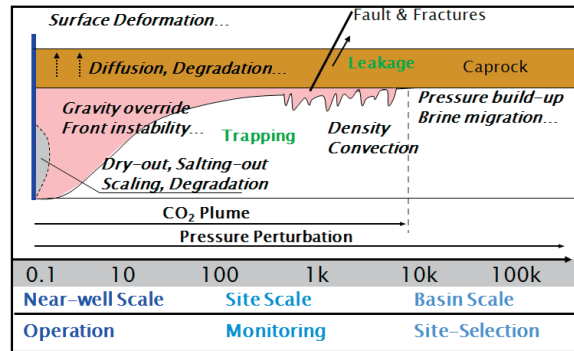


図-1 CO<sub>2</sub> 地中貯留の様々なスケールでの現象

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<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), 5)</sup>などを対象とした大規模解析を実施してきた。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。

本年度は、平成22年度に2次元軸対称モデルで予察的に実施した界面不安定性のCO<sub>2</sub> 長期的安定性への影響解析を、海外の実証試験の3次元フィールドモデルに拡張し、その実用性を検討した。

## 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 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。

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

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

ここに、 $\phi$ :空隙率、 $S_{\beta}$ : $\beta$ 相の飽和度、 $\rho_{\beta}$ : $\beta$ 相の密度 ( $\text{kg/m}^3$ )、 $X_{\kappa\beta}$ : $\beta$ 相における成分  $\kappa$  の質量分率、 $\rho_R$ :岩石粒子の密度 ( $\text{kg/m}^3$ )、 $T$ :温度 ( $^{\circ}\text{C}$ )、 $C_R$ :岩石の比熱 ( $\text{J/kg}^{\circ}\text{C}$ )、 $U_{\beta}$ : $\beta$ 相の内部エネルギー ( $\text{J/kg}$ )、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。

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

$\beta$ 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。

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

ここに、 $\mu_{\beta}$ : $\beta$ 相の粘性係数 ( $\text{kg/ms}$ )、 $\mathbf{u}_{\beta}$ :流速、 $k$ :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 ( $\text{W/m}^{\circ}\text{C}$ )、 $T$ :温度 ( $^{\circ}\text{C}$ )、 $h_{\beta}$ : $\beta$ 相の比エンタルピー ( $\text{J/kg}$ ) 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)、 $R_n^{\kappa}$ :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、 $q_n^{\kappa}$ :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、 $F_{nm}^{\kappa}$ :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. 計算性能測定

現時点での ES2 上における TOUGH2-MP の計算性能を図-2 に示す<sup>4), 5)</sup>。図-3 に示すような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。図-2 中には、T2K (東大 HA8000) で測定した計算時間との比較を併せて示した。これは、平成 19 年度に実施した東京湾での CO<sub>2</sub> 貯留シミュレーション (格子数約 1000 万) の実行結果である。ES2 と T2K では単体 CPU のピーク性能が異なるが、例えば、ES2 の 16PE により T2K の 512CPU よりも高速での計算が可能である。

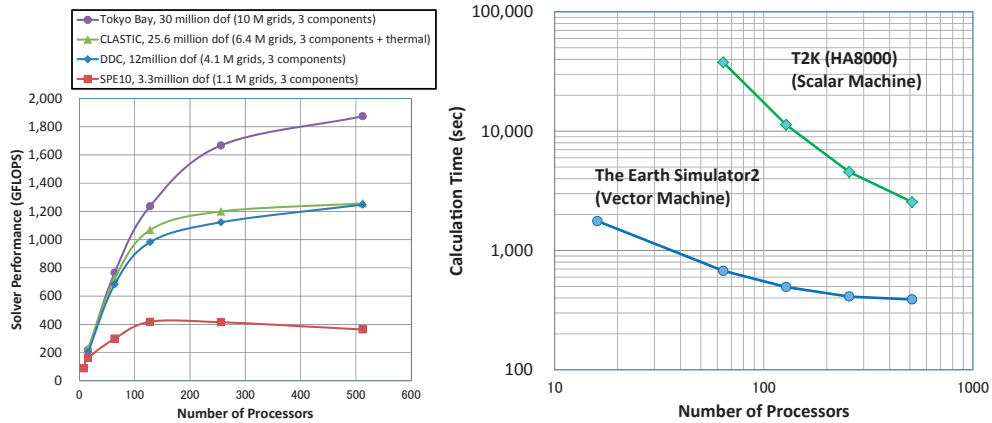


図-2 ES2 と T2K (HA8000) 上における TOUGH2-MP の計算時間の比較<sup>4), 5)</sup>

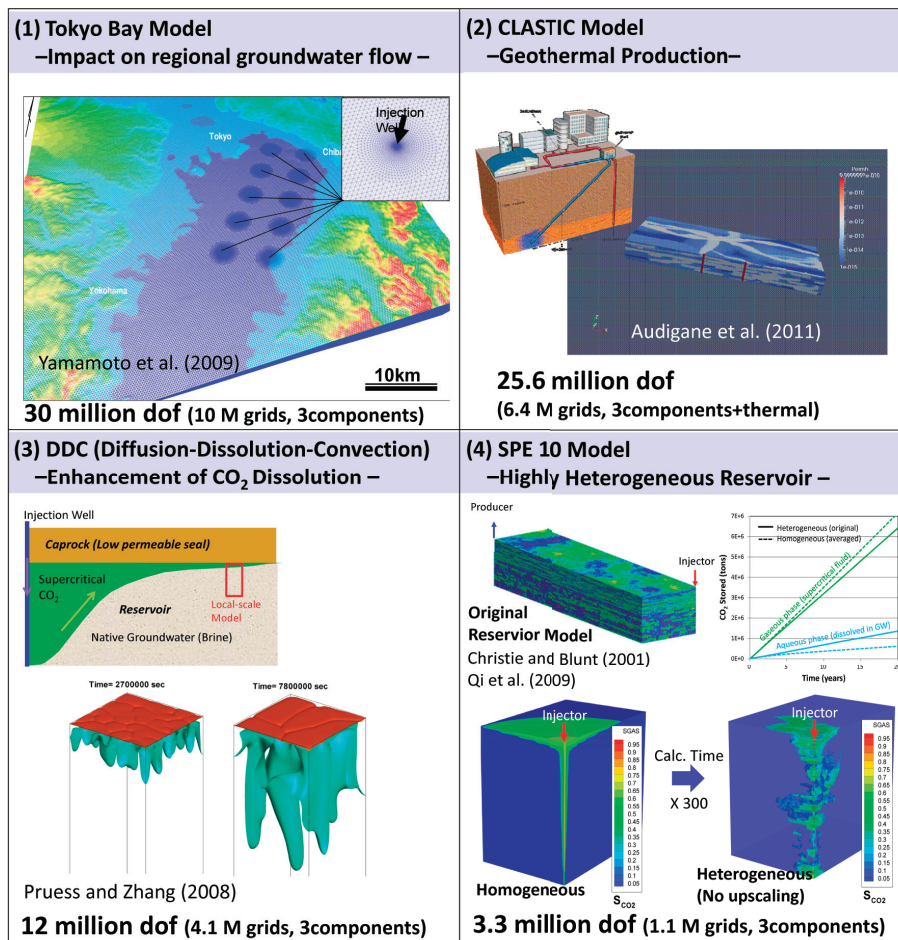


図-3 計算性能の測定に用いたモデル一覧<sup>4)</sup>

#### 4. 重力対流を考慮した CO<sub>2</sub> 長期的安定性の検討

地下に圧入された超臨界状態の CO<sub>2</sub> 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<sub>2</sub> の上昇を抑え込むことが必要である。一方、CO<sub>2</sub> は周辺の地下水に溶け込むが、CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> の地下水への溶解を促進することが指摘されている<sup>10)</sup>（図-4）。

重力不安定性を正確に計算するには高解像度のシミュレーションが必要で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 CO<sub>2</sub> 長期安定性への効果を検討する。平成 22 年度には、Pruess and Zhang (11) 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 CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> 貯留層をモデル化した 3次元のフィールドモデルを用いて、CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> 圧入井から半径約 1.2km 範囲の厚さ約 80m の CO<sub>2</sub> 貯留層であり、CO<sub>2</sub> 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。CO<sub>2</sub> 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。

計算結果の一例として、図-5(a) に、圧入から 200 年後における CO<sub>2</sub> 貯留層内での CO<sub>2</sub> 飽和度ならびに地下水中の CO<sub>2</sub> 濃度を示す。同図中 (b) に、地下水中の CO<sub>2</sub> 濃度の等値面を示す。貯留層上部に超臨界状態の CO<sub>2</sub> が滞留した状態から、地下水中に CO<sub>2</sub> が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する様子がシミュレートされ、貯留層上部に貯留された超臨界 CO<sub>2</sub> の地下水への溶解が促進される様子が確認された。今後は、さらに格子を詳細するとともに、実データに基づく地層モデルのキャリブレーションを行う予定である。

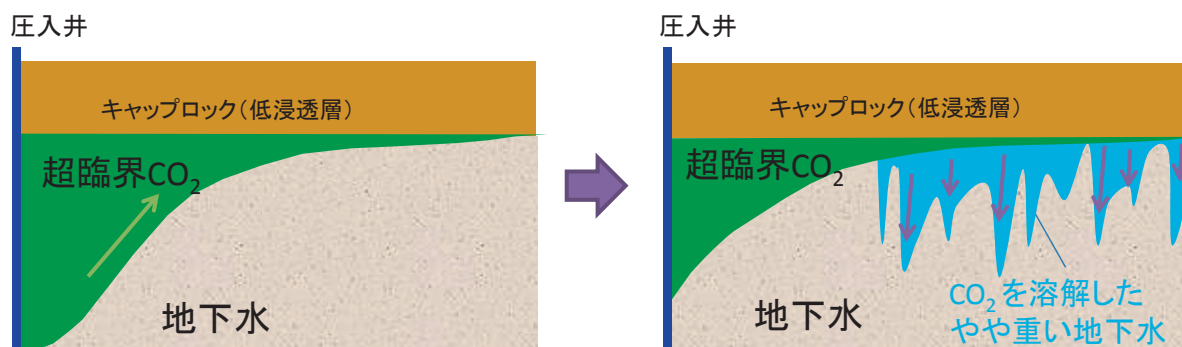
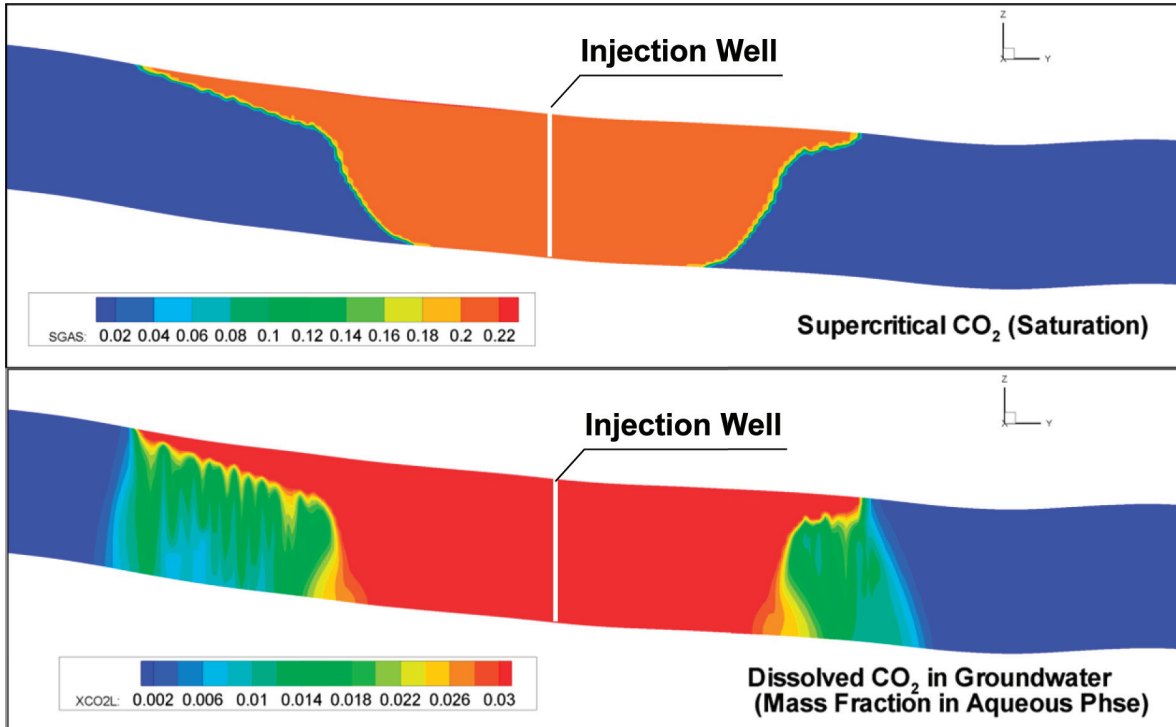
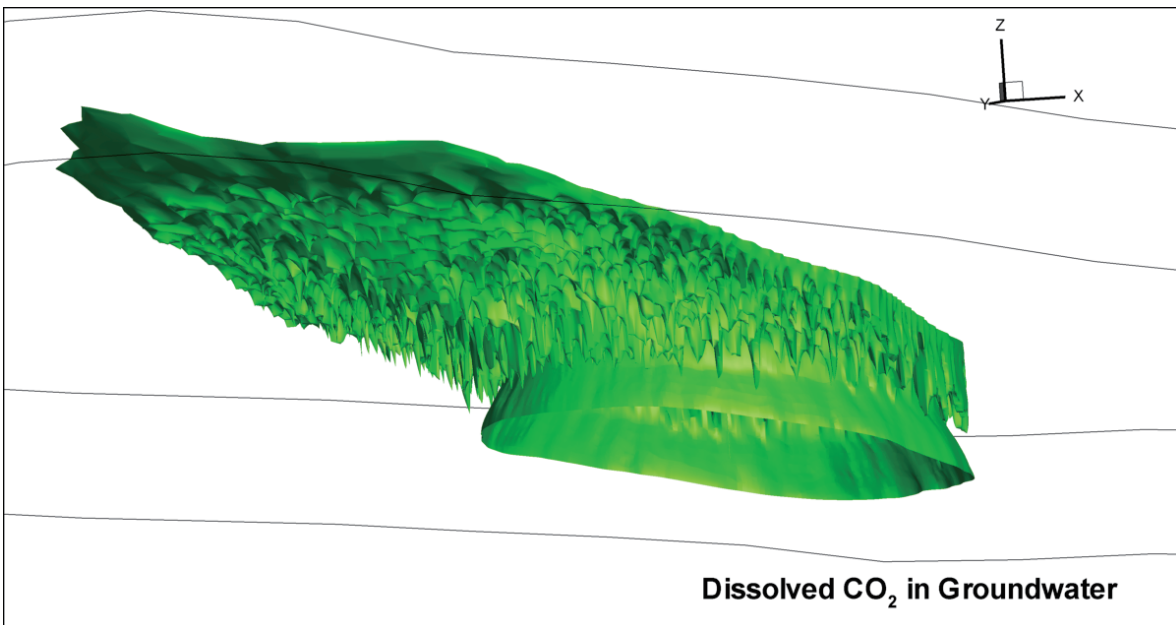


図-4 重力対流による CO<sub>2</sub> 溶解の促進





(a) CO<sub>2</sub> 貯留層内での CO<sub>2</sub> 飽和度 (上図) ならびに地下水中の溶存 CO<sub>2</sub> の質量分率 (下図)  
(圧入井を通る鉛直断面)



(b) 地下水中の CO<sub>2</sub> 質量分率の等値面 (緑色 : 0.02)

図-5 貯留層スケールの重力対流のシミュレーション結果 (約 200 年後)

## 謝辞

本研究は、文部科学省平成 24 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懇切なるご指導、ご協力をいただきました。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., Nishikawa, N., 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, 2009.
- 3) Yamamoto, H. and C. Doughty, 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, 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 - 22<sup>nd</sup>, 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 CO<sub>2</sub> Stored in Deep Reservoir Rocks on Massively Parallel Vector Supercomputer, *Lecture Notes in Computer Science* Vol. 7851, Springer Verlag (in press)
- 6) 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.
- 7) Zhang, K., C. Doughty, Yu-Shu Wu, K. Pruess, Efficient Parallel Simulation of CO<sub>2</sub> Geologic Sequestration in Saline Aquifers, *SPE* 106026, 2007.
- 8) 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.
- 9) 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.
- 10) 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.
- 11) Pruess, K., K. Zhang, 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, 2008.