

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^{*1}、七井 慎一^{*1}、Keni Zhang^{*2}、Pascal Audigane^{*3}、Christophe Chiaberge^{*3}、
西川 憲明^{*4}、廣川 雄一^{*4}、新宮 哲^{*4}、緒方 隆盛^{*5}、中島 研吾^{*6}

* 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 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 22 年 4 月 1 日～平成 23 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 k m 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、CO₂ の長期的な安定性や広域的な地下水挙動への影響など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を進めるとともに、CO₂ の貯留層となる地層物性の高度な不均質性や、CO₂ を溶解した地下水の重力対流現象に着目したシミュレーションを実施し、CO₂ の貯留特性や長期的安定性に及ぼす影響を検討した結果を報告する。

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 k m の地層中に圧入する、「二酸化炭素の地下貯留技術」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。

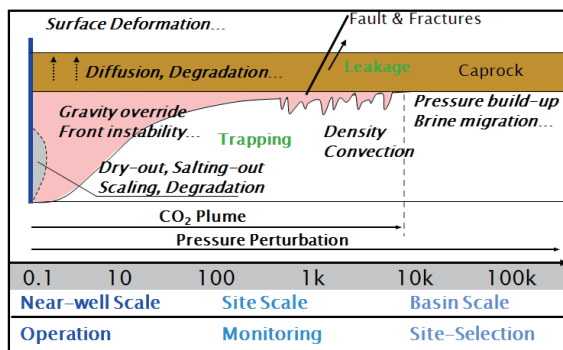


図-1 CO₂ 地下貯留の様々なスケールでの現象

本研究では、平成19年度～21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¹⁾や米国の実証試験²⁾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 の計算速度向上を行うとともに、以下の課題に取り組み、大規模解析技術の科学研究での有効性を示すとともに、工学的な実用性を高め、応用対象の拡大を図る。

- (1) 高度不均質性を有する貯留層中における CO₂ 挙動解析
- (2) 重力対流を考慮した CO₂ 長期的安定性の予測解析

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 TOUGH2³⁾ の並列化バージョンである TOUGH2-MP⁴⁾ 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/m^3) またはエネルギー (J/m^3)、 \mathbf{F}^{κ} : 成分 κ のフラックス ($\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$ または $\text{J}/\text{m}^2\text{s}$)、 q^{κ} : 成分 κ 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^{κ} 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、 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 ($\text{J/kg}^\circ\text{C}$)、 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 ($\text{W/m}^\circ\text{C}$)、 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 : 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} : 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. 解析コードの整備

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、ES2 上で並列化率 99.93% が確認されている。しかし、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。すなわち、オリジナル版の TOUGH2-MP の行列ソルバー Aztec (Sandia National Laboratory 開発) ⁵⁾ では、行列格納形式として DVBR 形式を用いており、メモリ効率は良いがベクトル長が短いという問題があった。そこで、HPC Middleware をベースにした JDS 形式のソル

バーと入れ替えを行った結果、現時点までにベクトル化率 99.6%、約 10 GFlops/PE の処理速度が得られている。

4. 高度不均質性を有する貯留層中における CO₂ 挙動解析

4.1 概要

CO₂ を貯留する地層（貯留層）は均質ではなく、浸透性や空隙率などが異なる砂と泥が重なり合った不均質性を有することが多い。CO₂ は浸透性の高い砂質部分を選択的に流れるため、地層の不均質性は CO₂ の地中挙動を大きく左右する要因である。一方、不均質な地質媒体中での多相流体の数値解析は、非定常計算における一回の時間ステップの長さが短く制約されるため、長い計算時間を要することが知られている。そのため、実用上は格子数を減らして浸透率の平均化処理をすることなどにより、地層の不均質性を緩和し、計算量ならびに計算時間を軽減することが一般的に行われる。本課題では、地球シミュレータを用いることにより、図-3 に示すような高度な不均質性を有する貯留層モデル（約 110 万格子）を平均化・単純化することなく、ダイレクトに解析することを試みた。

4.2 計算条件

解析に用いた貯留層モデルを図-2 に示す。このモデル（Christie and Blunt⁶⁾）は SPE10 モデルと呼ばれ、6400m × 8800m × 170m の領域における地層の空隙率や浸透性（絶対浸透率）の不均質な分布を 1.122×10^6 個（60 × 220 × 85）のセルで表現したものである。貯留層の上は極めて浸透性の低い地層（キャップロック）で覆われていると仮定し、貯留層の外側上方への流体移動は無視する。計算では、

地層中を塩水系の地下水で満たした状態から、図-2 中の Injector から超臨界状態の CO₂ を圧入するとともに（圧入量 39 万 t/年）、Producer から塩水を揚水する（揚水量 58 万 t/年）という条件で CO₂ 地中挙動を検討した（Qi et al.⁷⁾。比較のため、図-2 の不均質モデルの空隙率ならびに絶対浸透率の平均値（各々、17%、 $1.0 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ ）を用いた均質なモデルについても計算を実施した。

4.3 計算結果

圧入開始から 20 年後における圧入井近傍の超臨界 CO₂ の分布を図-3 に示す。超臨界 CO₂ の流体密度は水よりも軽いため（今回の条件では約 650 kg/m³）、地下水に乗り上げる重力オーバーロード（gravity override）と呼ばれる現象が生じる。つまり、特に浸透性の高い貯留層の場合には圧入井からの圧力勾配よりも浮力の効果の方が支配的になり、超臨界 CO₂ は貯留層の上面（貯留層を覆う低浸透層の下面に相当）に上昇しやすい。この場合、CO₂ が乗り上げた下部の貯留層のボリュームが有効に活用されず、平面的には広い面積のプルームを形成するため、断層や既存井戸などを通じた漏洩のリスク範囲が拡大する。一方、

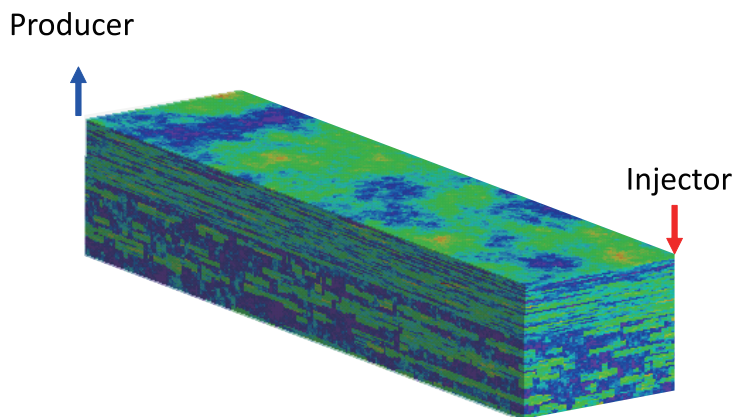


図-2 高度不均質性を有する貯留層モデルの空隙率分布ならびに圧入井と揚水井^{7), 8)}

不均質モデルでは、超臨界 CO₂ は浸透性の高い部分を選択的に側方へ移行するため、貯留層をより効率的に利用できる。また図-4 に貯留内における CO₂ の存在状態を示す。不均質モデルでは、均質モデルと比べ、浸透流路が複雑になることで超臨界 CO₂ と周辺地下水との接触面積が増加して CO₂ の地下水への溶解が促進される。溶解した CO₂ には浮力が働かないため、超臨界状態よりも安定的な貯留形態といえる。

このように、地層の不均質性は、貯留可能量という観点から CO₂ 貯留層の性能評価を行う場合重要な要因となるが、不均質場の二相流解析には一般に多大な計算時間を要する。今回の 20 年間のシミュレーションでは、均質モデルは約 3 ノード時間（約 650 ステップ）で計算が完了したのに対して、不均質モデルでは約 900 ノード時間（約 4 万ステップ）を要する。今後は、より多くのケースについて計算を実施し、不均質性の高い貯留層中での CO₂ の挙動の理解を進めるとともに、計算時間や予測誤差のバランスの観点から計算モデルの最適化の検討を行う予定である。

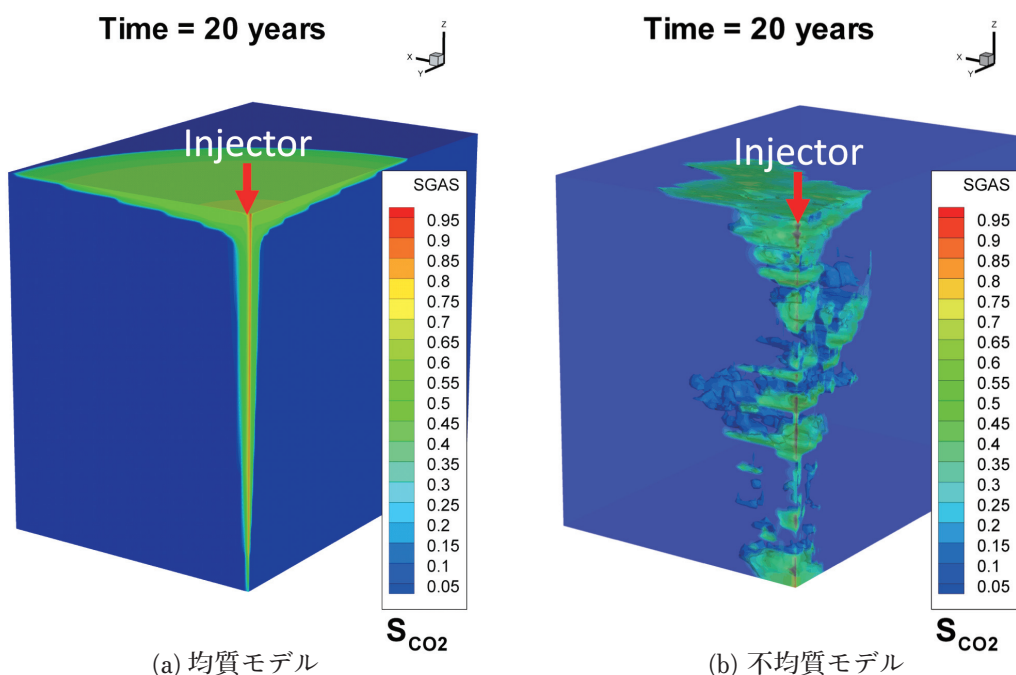


図-3 CO₂ 地中挙動の解析結果 (CO₂ 飽和度の分布)

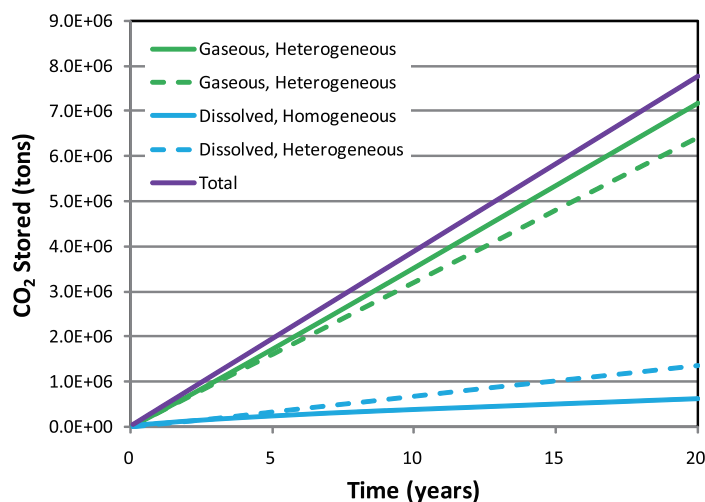


図-4 CO₂ の貯留形態 (Gaseous: 超臨界 CO₂、Dissolved: 地下水中に溶解)

5. 重力対流を考慮した CO₂ 長期的安定性の検討

地下に圧入された超臨界状態の CO₂ 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、CO₂ の上昇を抑え込むことが必要である。一方、CO₂ は周辺の地下水に溶け込むが、CO₂ 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-5）。

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 オーダーの超極細の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。本年度は、Pruess and Zhang⁹⁾ を参考に 1m × 1m × 4m の領域を格子間隔 1cm で離散化した約 400 万格子の局所スケールモデルを作成し、CO₂ を溶解した地下水の重力対流をシミュレートした。計算結果の一例として、地下水中の CO₂ 濃度の等値面の経時変化図-6 に示す。貯留層上部に超臨界状態の CO₂ が滞留した状態から、地下水に CO₂ 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た。

地球シミュレータを用いれば、上記の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。その予想的な検討として、半径 10km、厚さ 40m の軸対称の貯留層モデルを考え、鉛直方向に約 10cm の格子で離散化して計算した結果を図-8 に示す。計算条件として、CO₂ の圧入量 10 万 t/年、圧入期間 1 年とし、貯留層の有効空隙率と絶対浸透率は各々 20%、1darcy（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。この結果によれば、重力対流により幅 10cm スケールから 10m 以上の大きさまでフィンガリングが成長し、圧入完了時に貯留層上部に貯留された超臨界 CO₂ は、約 20 年後には地下水にほぼ全量溶解している。今後は、地層の傾斜や不均質性など、より現実的な条件を考慮したシミュレーションを実施し、重力対流のインパクトを調べていきたい。

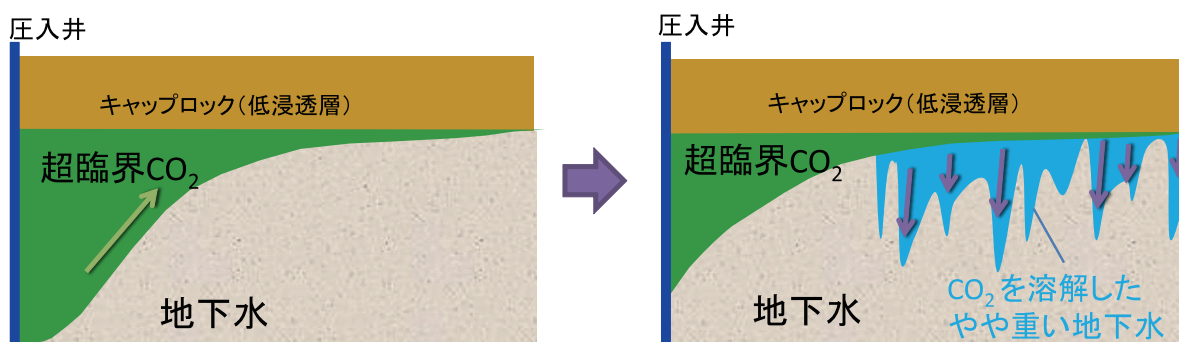


図-5 重力対流による CO₂ 溶解の促進

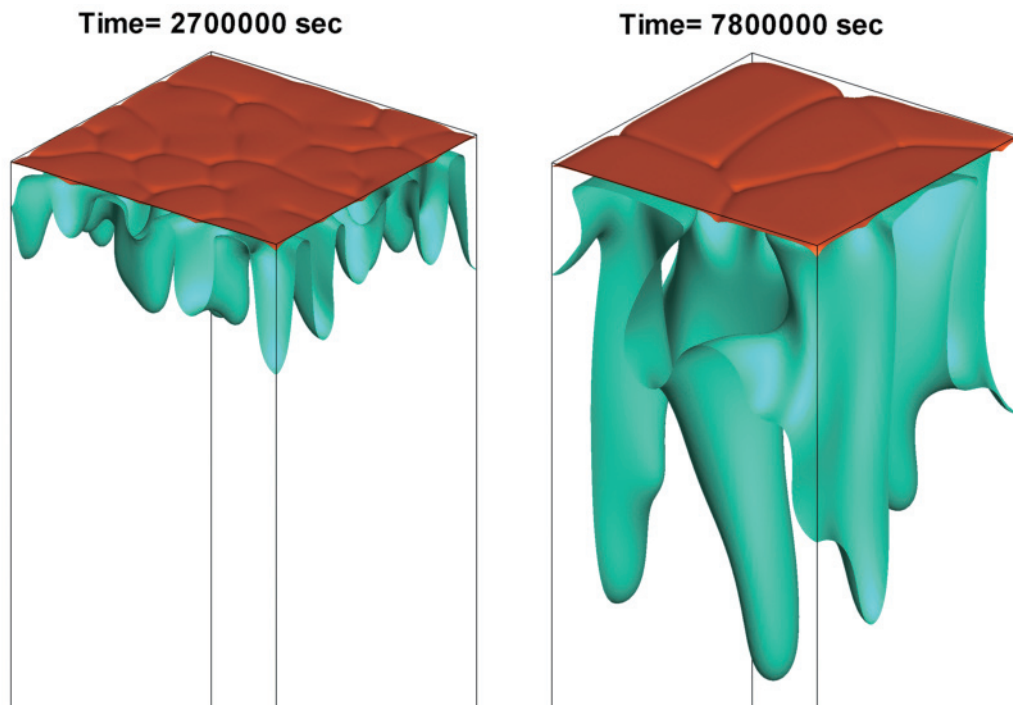


図-6 地下水中の CO₂ 濃度の等値面の経時変化 (局所スケールモデル (1m × 1m × 4m))
 (地下水中の CO₂ 質量分率の等値面：茶色：0.025、緑色：0.008)

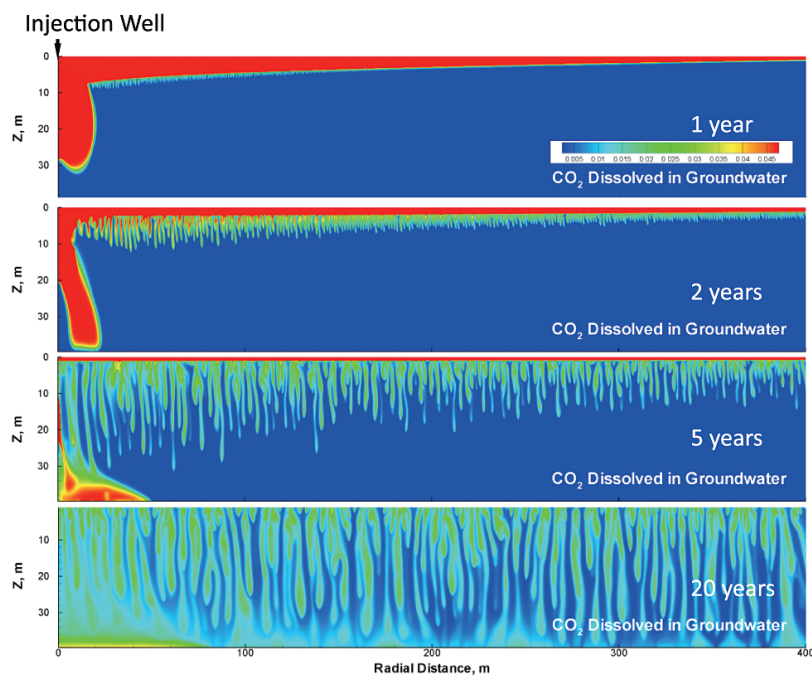


図-7 貯留層スケールの重力対流の予察シミュレーション結果 (地下水中の CO₂ 溶解量 (質量分率、厚さ 40m、半径 10km の軸対称モデル、約 60 万格子)

6. まとめ

地層の不均質性や重力対流など計算格子の詳細化が重要なテーマについて、CO₂ 地中挙動解析を実施し、計算格子の分割数（解像度）による予測結果の違いを検討した。不均質性の高い地層中でのCO₂ 地中挙動は、均質な場を仮定した場合と比べて、貯留効率や安定性が大きく異なる結果になるため、不均質性を高解像度で表現したモデルを解析することが望ましい。しかし、高度不均質モデルでの二相流解析は、1つの計算ステップの時間長が著しく制約され、多大な計算時間を要する。よって、必要な計算精度と実用的な計算時間を考慮したモデル解像度の最適化が重要である。同様に、重力対流現象のシミュレーションについてもモデルを簡略化しつつ、実用的な計算手法を見出すことが必要である。いずれの問題に対しても、地球シミュレータにより得られる不均質や非線形現象の高解像度計算結果は、それらの現象を工学的に簡略化して取り扱う上でもリファレンスとして重要である。

謝辞

本研究は、文部科学省平成 22 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、福井 義成氏ほか（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) 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.
- 2) Yamamoto, H. and C. Doughty, 2011, Investigation of gridding effects for numerical simulation of CO₂ geologic sequestration, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 5, pp.975-985.
- 3) 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.
- 4) Zhang, K., C. Doughty, Yu-Shu Wu, K. Pruess, 2007, Efficient Parallel Simulation of CO₂ Geologic Sequestration in Saline Aquifers, SPE 106026.
- 5) 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.*
- 6) Christie and Blunt, 2001, Tenth SPE comparative solution project: a comparison of upscaling techniques” , SPE 66599, SPE Reservoir Simulation Symposium, Houston, Texas, 11-14 February.
- 7) Qi, R., T.C. LaForce, M.J. Blunt, 2009, Design of carbon dioxide storage in aquifers, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol 3, pp.195-205.
- 8) Ennis-King JP, Paterson L. Role of convective mixing in the long-term storage of carbon dioxide in deep saline formations. *SPE J* 2005;10(3):349-56. SPE-84344-PA.
- 9) Pruess, K., K. Zhang, 2008, Numerical modeling studies of the dissolution-diffusion-convection process during CO₂ storage in saline aquifers. Technical Report LBNL-1243E, Lawrence Berkeley National Laboratory, California.

Massively parallel simulation of Geologic CO₂ storage on the Earth Simulator

Project Representative

Hajime Yamamoto
Taisei Corporation

Authors

Hajime Yamamoto^{*1}, Shinichi Nanai^{*1}, Keni Zhang^{*2}, Pascal Audigane^{*3}, Christophe Chiaberge^{*3}, Noriaki Nishikawa^{*4}, Yuichi Hirokawa^{*4}, Satoru Shingu^{*4}, Ryusei Ogata^{*5}, Kengo Nakajima^{*6}

* 1 Taisei Corporation

* 2 E.O. Lawrence Berkeley National Laboratory

* 3 Bureau de Recherches Geologiques et Minieres (French Geological Survey)

* 4 Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

* 5 NEC Corporation

* 6 The University of Tokyo

Abstract

CCS (carbon dioxide capture and storage) is a promising approach for reducing the greenhouse gas content in the atmosphere, through capturing carbon dioxide (CO₂) from large emission sources and injecting it into reservoirs (such as deep saline aquifers). Large-scale storage projects will likely involve very long-term storage of huge amounts of CO₂, potentially exceeding hundreds of millions of tonnes (Mt). This study intends to demonstrate potential benefits of massively parallel computing technology for simulating geologic CO₂ storage for important scientific and engineering topics. In this year, uncertainties due to grid resolution effects are investigated for two topics: 1) CO₂ behaviors in highly heterogeneous geologic formations; 2) diffusion-dissolution-convection process that may cause gravity instability greatly enhancing convective mixing of dissolved CO₂ in storage reservoirs in long-term.

Keywords: large-scale simulation, CCS, CO₂, global warming, groundwater

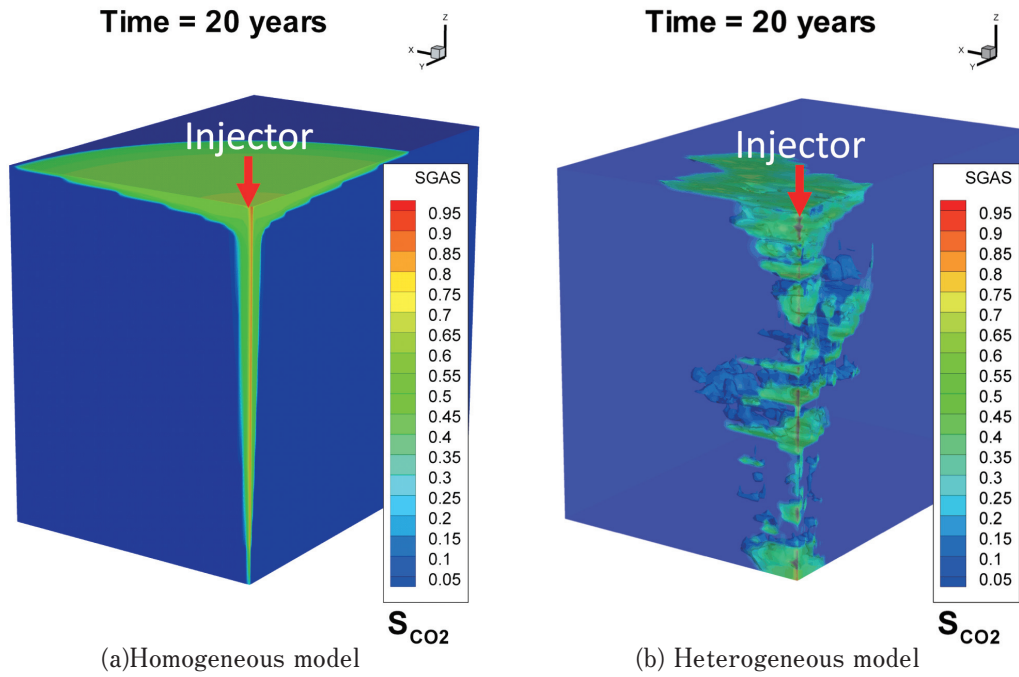


Figure 1 CO₂ plume spreading from the injection well in homogeneous (left) and heterogeneous (right) model. The heterogeneous model represents irregular nature of sand/shale distribution in the reservoir, while the hydraulic properties (porosities and permeabilities) are averaged and uniformly assigned in the homogeneous model. Obviously CO₂ tends to migrate in sand portions with higher permeability, suppressing the gravity override (i.e., less-dense CO₂ flows over denser groundwater)

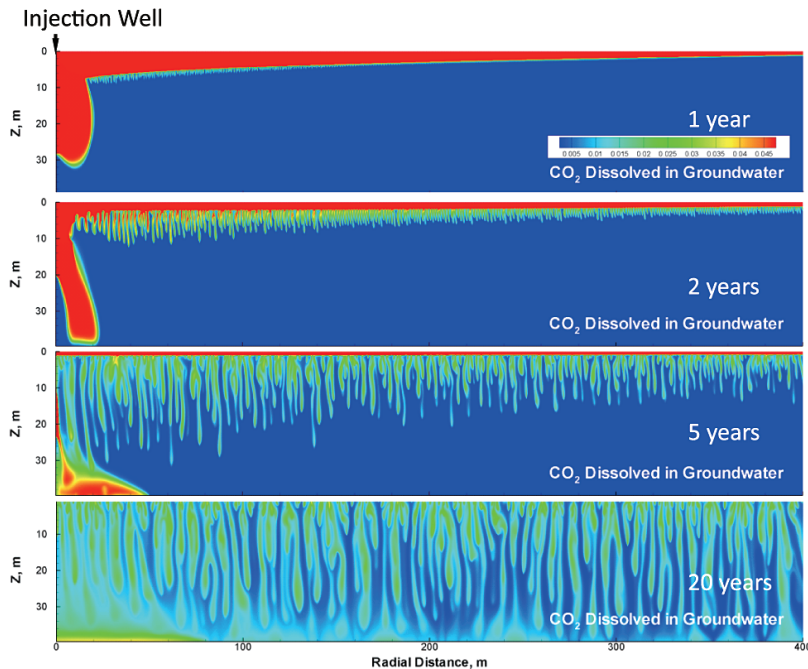


Figure 2 A preliminary simulation result of diffusion-dissolution-convection process in a radially symmetrical model at a reservoir-scale. CO₂ is injected in supercritical state with the rate of 100kt/year for one year. Due to the gravity convection, CO₂ dissolution in groundwater is greatly enhanced and eventually the supercritical CO₂ disappears.