

地球シミュレータを用いた二酸化炭素地下貯留シミュレーション

Massively Parallel Simulation of CO₂ Geologic Storage on the Earth Simulator

山 本 肇 (やまもと はじめ)

大成建設株式会社

丸 井 敦 尚 (まるい あつなお)

産業界技術総合研究所

Keni Zhang (けに つあんぐ)

ローレンスバークレー国立研究所

上 原 均 (うえはら ひとし)

産海洋研究開発機構

1. はじめに

二酸化炭素回収・貯留 (CCS: carbon capture and storage) は、火力発電所や製鉄所などの工場からの排気ガスに含まれる二酸化炭素 (CO₂) を分離・回収し、パイプラインなどを通じて輸送し、地中あるいは海洋などに貯留 (固定化) する技術であり、地球温暖化対策の切り札の一つと考えられている¹⁾。

CCS における CO₂ の貯留方法としては、地下貯留、海洋貯留、鉱物化などが考えられているが、それらのうち、経済面や安全面で現実性が高いのが、本研究対象である地下貯留である。地下貯留は、地下約 1 km 以深において、遮蔽層 (浸透性の低い泥岩など) で覆われた貯留層 (砂岩層などの多孔質で浸透性の高い地層) に、ボーリング孔を通じて CO₂ を圧入するものである。

CO₂ は、圧力 7.38 MPa、温度 31℃ 以上の温度・圧力領域において超臨界流体となる。超臨界流体は、気体と液体の中間的な物理化学的性質 (粘性、密度など) を示す。気体よりも密度が大きく、液体よりも粘性が小さい超臨界の状態では圧入する方が、貯留効率や安全性の面で有利と考えられている。したがって、CO₂ が超臨界状態になる深度 800 m 以深、温度 35℃ 以上程度の砂層などの浸透性・空隙の大きな地層が貯留層の主対象になる。貯留層の温度・圧力条件下での超臨界 CO₂ の密度は概ね 0.5~0.8 g/cm³ であり、地下水に対して浮力が働くが、貯留層の上部に泥 (岩) 層などの遮蔽層が存在すれば、CO₂ を貯留層内に長期間留めることが可能と考えられている。

CO₂ の地下深部への圧入技術は、EOR^{注1)}での実績が多くあり、ほぼ確立されていると言われているが、圧入した後の漏洩や周辺環境影響などの安全性を監視する技術は研究途上にあり、その確立が課題となっている。

筆者らは、CO₂ 地下貯留サイトの経済性 (圧入性や貯留可能量) とともに、長期的・広域的な安全性を評価するアプローチの一つとして、断層や遮蔽層分布の地質的リスク要因を高精度でモデル化・解析できる高速・大規模シミュレーション技術の開発に取り組んでいる。本報告では、我が国の大規模並列スーパーコンピュータで

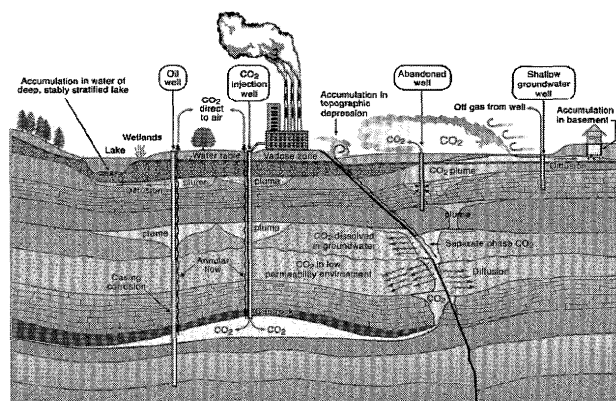
ある地球シミュレータを用い、二酸化炭素の地下貯留によって生じる周辺地下水圧上昇を予想的に計算したケーススタディを紹介する。

2. CO₂ 地下貯留の安全性に関わるリスク

気候変動に関する政府間パネル (IPCC) が発行した CCS に関する特別報告書²⁾によれば、「適切に選択され管理された地下貯留サイトに二酸化炭素が留まる割合は、100年後に99%以上である確率は90~99% (very likely) であり、1000年後に99%以上である確率は66~90% (likely) である」と非常に小さいとされる。漏洩の可能性としては、次のような漏洩シナリオが考えられている (図-1)。

- ・井戸の不完全な閉鎖あるいは腐食、劣化
- ・浸透性の高い断層や割れ目の存在
- ・遮蔽層の連続性が途絶えること
- ・注入圧による遮蔽層の破壊
- ・自然地下水流れによる CO₂ の輸送

漏洩が生じると、グローバルな気候変動対策としての有効性が低下するだけでなく、ローカルな地域において人体や生物環境に影響を与える可能性がある。特に、井戸から漏洩する場合には、急激に大量の CO₂ を放出する可能性があり、CO₂ は低い濃度では人体に対して無害であるが、7~10%に達すると人が即死する可能性もある。その他の漏洩シナリオは、地下水で満たされた地質媒体を通じた緩慢な漏洩と考えられる。しかし、井戸とは異なり漏洩箇所の特定が困難であるため、漏洩した

図-1 CO₂ 地下貯留の漏洩リスク (Oldenburg³⁾)

注1) 石油増進回収 (Enhanced Oil Recovery): 枯渇しつつある油田に CO₂ を圧入し、石油回収量を回復させる技術

CO₂が長期間未検知のまま蓄積すると、最終的には、窪地などの空気の滞留箇所でも CO₂濃度が局所的に上昇する。あるいは地下水／海水の水質の変化によって、人体や生物の生命が危険にさらされる可能性も指摘されている。

上記のような CO₂漏洩に加えて、圧入箇所周辺の地下水に対する潜在的な影響も考えられる。CO₂貯留層が枯渇ガス・油田などではなく、自然水圧を保持している天然の帯水層（地下水を保持している浸透性の高い地層）である場合、そこへ CO₂を連続的かつ大規模に圧入すると、相当量の地下水が帯水層から排除されて、周辺の地下水圧の上昇が生じると考えられる。また、それに伴った地盤の隆起の可能性もある。地表近傍では、比貯留量の大きい不圧帯水層の地下水位が大きく上昇することは考えにくい。被圧帯水層では顕著な圧力上昇が生じる可能性がある。このような水圧や水質の広域的な変化速度は比較的緩慢と考えられるが、影響範囲が広大となり修復に時間を要する可能性があるため、事前に影響程度を予測して対処することが重要と考えられる。

3. 二酸化炭素地下貯留シミュレーション

二酸化炭素地下貯留の経済性や安全性を評価する上で、数値シミュレーションは重要な方法の一つとなる。

CO₂の貯留メカニズムは、構造トラップ、残留ガストラップ、溶解トラップ、鉱物トラップに分けられる。構造トラップは、CO₂が低浸透性の地層（遮蔽層）の下に物理的にトラップされることである。残留ガストラップは、気泡が貯留層の空隙に取り残されて動けなくなるメカニズムをいい、溶解トラップは CO₂が地下水中に溶解することを意味する。鉱物トラップは炭酸塩鉱物化による固定化を意味し、十分な量の炭酸塩鉱物が生成するには1000年以上の長期を要すると考えられている¹⁾。

圧入直後には、構造トラップにより、CO₂は浸透性の低い遮蔽層の下に押さえ込まれる。構造トラップの段階では、CO₂は周辺の地下水よりも密度の小さい超臨界相で存在するため、浮力が作用するが、時間とともに、より安定性の高い残留ガストラップ、溶解トラップ、鉱物トラップの効果・割合が多くなると考えられている²⁾。

CO₂地下挙動シミュレーションでは、上記のトラップ機構を考慮するために、温度・圧力条件などにより変化する超臨界 CO₂の流体物性（密度、粘性）や、地下水との相互作用（水相-CO₂相間の成分移動や二相流特性：相対浸透率、残留飽和度、毛管圧力等）を正確に考慮できる多成分・多相系シミュレータを使用する必要がある。加えて、鉱物トラップを考慮するために、地球化学計算との連成解析が必要となる場合もある⁴⁾。

上記の要因を考慮できる CO₂地下貯留に特化した数値シミュレータは、既に石油系・地熱系シミュレータに改良を加える形でいくつか開発されており、世界各地の EOR（石油増進回収法）や帯水層貯留の実証試験サイトなどに適用されている。各時間ステップで流体と地層

の物性がともに変化する非線形性の強い解析であるため、多くの計算時間を要するのが通常であり、現在のシングル CPU では約10万節点が実用上の限界と考えられる。

4. 大規模並列計算システム

4.1 並列計算コード TOUGH2-MP

TOUGH2-ECO2N⁶⁾は、超臨界 CO₂の流体物性を精密にモデル化した非等温・多成分・多相系の流体シミュレータである。本研究では、TOUGH2の並列化バージョンとして開発された TOUGH2-MP⁷⁾を用いている。並列計算機の膨大なメモリを使用でき、計算時間を短縮できるため、大規模で複雑な計算が可能になる。並列化手法として、計算領域をあらかじめ分割し、それぞれの領域を各 CPU ごとに処理するドメイン・デコンポジション法を用いている。各 CPU は、分割領域毎に、熱力学変数の更新、質量・エネルギー方程式の組み立てなどを行う。各領域の線形方程式は、並列計算用の反復法ソルバーパッケージ Aztec により、複数 CPU 上で並列して解かれる。領域分割は、グラフ分割ライブラリ METIS を使用し、非構造グリッドに対応可能である。CPU 間のメッセージ授受には MPI（Message Passing Interface）ライブラリを使用している。近年のキャッシュ速度の向上や通信アルゴリズムの高速化により、マルチコア PC などにおいて、CPU 数以上の計算速度の向上率（super-linear speedup）が報告されている⁷⁾。

4.2 地球シミュレータ

地球シミュレータは、舩海洋研究開発機構が保有するベクトル型並列スーパーコンピュータである（図-2）。8台のベクトルプロセッサからなる計算ノードを高速ネットワークで640台つないだ、合計5120台のベクトルプロセッサから構成される。ピーク性能は40TFLOPS、主記憶容量は10TBである。理論ピーク性能に対する実効性能の比が非常に高いのが特徴であり、世界的なスーパーコンピュータの性能ランキングで、2002年6月から2004年6月まで5回連続で首位を獲得した。2008年に、電力コストを抑え、さらに性能向上を図るため、ピーク計算能力を131TFLOPS（主記憶容量20TB）に増強する改修が行われた。

4.3 解析コードの最適化

地球シミュレータは、ベクトル計算機であることから、実効性能を高めるには高いベクトル化率（スカラ実行に対してベクトル処理される部分の割合）が必要とされる。また、並列計算においては、プログラムの並列化率（全体のプログラムのうち、並列化対象部分の割合）をできるだけ100%に近づける必要がある。並列化率の悪いプ

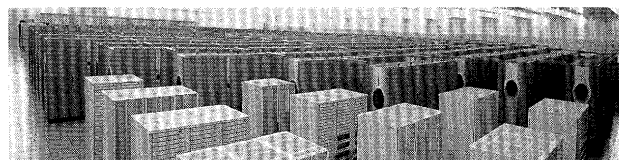
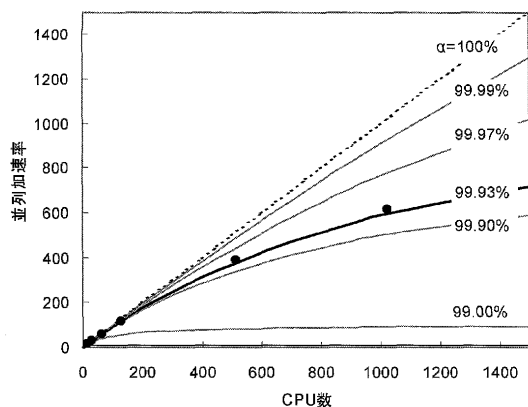


図-2 地球シミュレータ⁵⁾

報 告



図—3 地球シミュレータ上における TOUGH2-MP の並列計算性能 (CPU 数と速度向上の関係)

プログラムが多数のノードを専有して長時間走行すると、システムの運用に支障が出ることがあるため、並列化率が低いプログラムでは使用できる CPU 数が制限される。

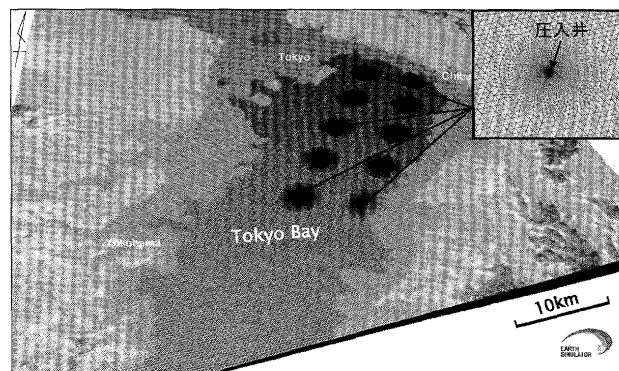
本研究で用いる TOUGH2-MP は、これまでスカラ計算機でのみ使用されており、初期のベクトル化率は 5% 未満であったが、その後のコードの全面的な書き換えにより、約 94% までベクトル化率が向上した。並列化率は、入出力の分散化などの処置により、99.93% を得ており、128 ノード (1024 CPU) での実行が認められている。並列加速率 (CPU 数に対する速度向上率) を図—3 に示す (アムダールの法則で計算)。図中の傾き 1 の破線 (並列化率 $\alpha=100\%$) は、CPU 数に比例した速度向上が得られる理想的な場合である。本プログラムの地球シミュレータ上での測定結果を図中にプロットしたが、現状の並列化率 (99.93%) では、CPU の数で 1000 個くらいが速度向上の限界である。今後は、行列ソルバーをベクトル演算に適したものに変更するなど、ベクトル化率の向上を図る予定である。

5. ケーススタディー

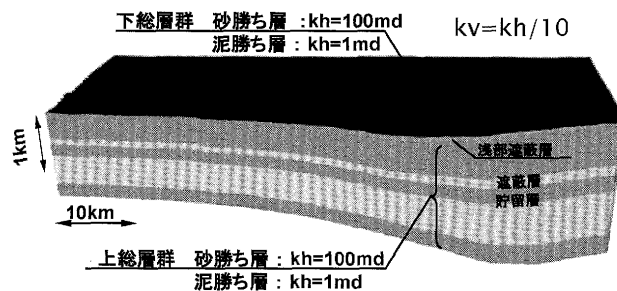
地球シミュレータ用にチューニングした TOUGH2-MP の性能を確認するために、東京湾周辺を対象としたフィールドスケールの大規模モデル (約 1000 万グリッド) を作成し、 CO_2 圧入とそれにより生じる広域地下水流動系への影響を予察的に解析した事例を紹介する。当然、東京湾およびその周辺での CCS の計画は存在しないが、地質データが比較的豊富であり、堆積盆スケールの地質モデルを作成できるサイトとして選定した。解析条件や解析結果の詳細については、Yamamoto et al.⁸⁾ を参照されたい。

5.1 解析モデル

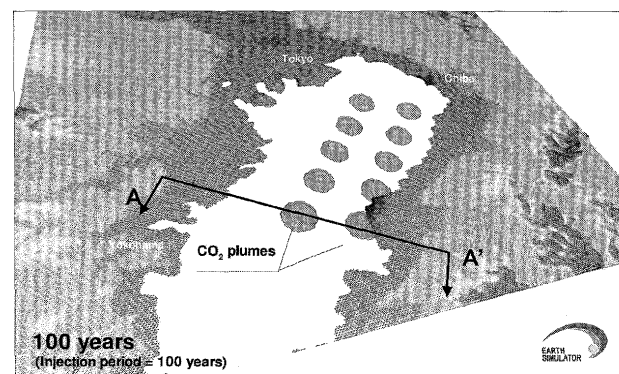
図—4 に示す関東平野南部地域の $60 \text{ km} \times 70 \text{ km}$ 領域を対象に、地形面と地層面形状を反映した 3 次元地質構造モデルを構築した。地形面形状と地層面形状 (下総層群と上総層群) には、佐々木ら⁹⁾ による 3 次元形状データ (平面格子間隔 200 m) を用いた。 CO_2 の貯留層については、RITE¹⁰⁾ を参考に、上総層群中部 (梅ヶ瀬層と東日笠層) の深度 800 m 以深 (CO_2 は超臨界状態)



図—4 解析グリッド



図—5 水理地質構造モデル

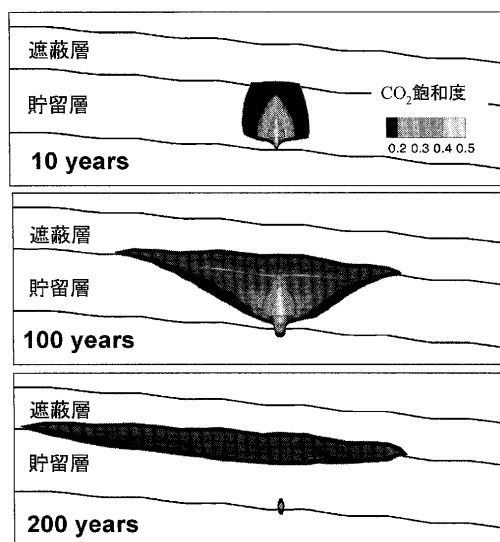


図—6 CO_2 プリューム (100年後)

とし、それを被覆する上総層群上部と下総層群下部に 2 枚の遮蔽層を設定した。貯留層と遮蔽層の横方向浸透率は各々 100 md と 1 md とし、縦方向はその $1/10$ に設定した。有効空隙率は 40% とした (図—5)。

解析グリッド (格子数: 約 1000 万) を図—4 に示した。平面方向に平均 250 m 間隔のボロノイ格子に分割し、深度方向には、地形や地層面形状に沿って 84 レイヤーに分割した。ただし、圧力やガス飽和度が急激に変化する圧入井近傍は、解析の精度を向上させるため、最小 5 m まで格子を詳細化した。

圧入井は、上総層群の分布深度が深い房総半島寄りの東京湾内に、10 本を 2 列に分けて設定した。超臨界状態となる CO_2 の圧入レート (質量流量) は、圧入井 1 本当たり 100 万 t/年 で一定とした。したがって、10 本を合わせたトータルの圧入レートは、 1000 万 t/年 である。圧入は 100 年間連続して行うものとし、その後の 1000 年までを解析対象とした。外部境界条件について、地表面、海底面ならびに側方境界は、圧力固定境界とし、底面を不透水境界とした。圧力固定境界は、地表面および

図-7 CO₂ プリュームの形状変化 (CO₂ 飽和度)

海面で大気圧 (1 atm) とし、側方境界面には静水圧分布を与えた。

5.2 解析結果

東京湾下に10地点から圧入されたCO₂ プリューム (圧入開始から100年後) の分布を図-6に示す (プリューム半径は約5 km)。図-7は、あるCO₂ プリュームの東西断面における形状変化を示したものである。プリュームが傘を逆さにした形状となるのは、注入圧以外に、超臨界CO₂の密度は地下水よりも小さいために浮力が作用するためである。浮力による上昇は、貯留層 (砂層) を覆う遮蔽層 (泥層) により抑えられているが、遮蔽層は東落ちで約1°傾斜しているため、遮蔽層に沿った斜め上方への移動が生じている。100年間の圧入終了後は、浮力による移動が主体となる。また、図-8に示すように、地下水へ溶解する割合が時間とともに増加し、より安定した貯留状態に移行している。

圧入開始から100年後における地下水圧上昇量の分布 (図-6中のA-A'断面) を図-9に示す。この図を見ると、圧入箇所から横方向に20~30 km以上の広い範囲で顕著な水圧上昇域 (1 bar以上) が生じているのが分かる。このことから、大規模な地下貯留に当たっては、周辺地下水圧への影響への配慮が必要であると考えられる。あわせて、深部の貯留層の周辺だけでなく、比較的浅部の水理地質構造のキャラクタリゼーションの重要性も指摘される。

6. おわりに

本報告では、二酸化炭素の地下貯留の安全性などを評価するアプローチの一つとして、地球シミュレータによるシミュレーションの事例を紹介した。大規模な並列計算技術の利用により、従来の研究のような二酸化炭素の地中挙動だけでなく、広域的な周辺地下水に及ぼす影響も同時に、十分な解像度で解析することが可能となる。安全性評価では、地質要因などの多くの不確実性を考慮した多くのケーススタディーが必要となる場合も考えら

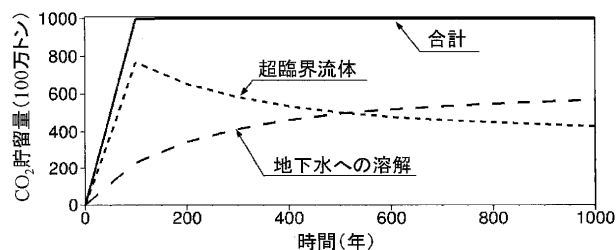
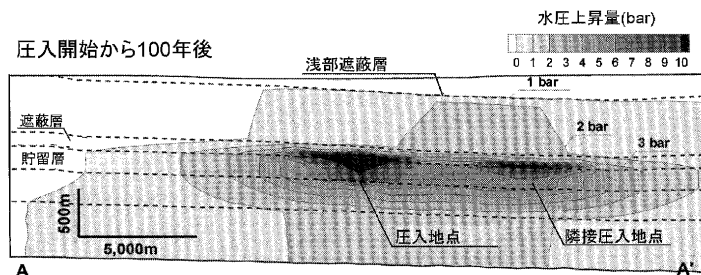
図-8 CO₂ の貯留形態の経時変化

図-9 水圧上昇量の断面分布 (A-A'断面, 100年後)

れ、計算の高速化が望ましい。近年は、大規模スパコンの利用に限らず、マルチコア PC などパソコンでの並列計算も一般的になっており、並列計算技術の必要性は、今後もさらに高まると考えられる。

謝辞：本研究は、文部科学省平成19年度地球シミュレータ産業戦略利用プログラムの一環として行ったものである。ここに記して謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) 例えば、勸地球環境産業技術研究機構 (RITE), 図解CO₂ 貯留テクノロジー, 工業調査会, 2006.
- 2) IPCC Special Report on Carbon dioxide Capture and Storage, 2005.
- 3) Oldenburg, C. M., Health, Safety and Environmental Screening and Ranking Framework for Geologic CO₂ Storage Site Selection, LBNL-58873, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California, 2005.
- 4) 山本 肇：地下水-岩石反応を考慮した水理・物質移行解析-解析コード TOUGHREACT と CO₂ 地下貯留への適用-, 大成建設技術センター報, 第38号, CDROM, 2005.
- 5) <http://www.jamstec.go.jp/es/jp/system/index.html>
- 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. et al., Efficient Parallel Simulation of CO₂ Geologic Sequestration in Saline Aquifers, SPE 106026, 2007.
- 8) Yamamoto, H. et al., Large-scale numerical simulation of CO₂ geologic storage and its impact on regional groundwater flow: A hypothetical case study at Tokyo Bay, Japan, Proceedings of GHGT-9, Washington D C., Nov. 16-20, 2008.
- 9) 佐々木勝司ほか, 東京湾東部地域の深部帯水層の層序について, 日本地下水学会2006年春季講演会要旨, pp. 80~85, 2006.
- 10) 勸地球環境産業技術研究機構 (RITE), 平成17年度二酸化炭素固定化・有効利用技術等対策事業, 二酸化炭素地中貯留技術研究開発成果報告書, 2006.

(原稿受理 2009.1.9)