地球シミュレータを用いた CO_2地下貯留シミュレーション

山本 肇[*1]，七井慎一[*2]，Keni Zhang[*3]，丸井敦尚[*4]，上原 均[*5]，西川憲明[*5]

Keywords : Carbon dioxide, CCS, The Earth Simulator, Environmental Impact, Large-scale simulation, multi-phase flow
二酸化炭素，ＣＣＳ，地球シミュレータ，環境影響，大規模シミュレーション，多相流

1.　はじめに

二酸化炭素回収・貯留（CCS : carbon dioxide 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．例えば，CoolEarth50 では，「世界全体の排出量を現状から 2050 年までに半減」という長期目標を世界共通目標として提案しているが、これは特定の技術だけでは達成不可能であり、省エネルギー、再生可能エネルギー、原子力などの主要な削減オプションを最大限活用した上で，CCS の導入が必要になると考えられている．

CCSにおけるCO_2の貯留（固定化）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．それらのうち、経済性、安全性で現実性が高いのが、本研究で対象としている地下貯留である．地下貯留では、地下約１ｋｍ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CO_2を圧入するものである．一般的な地下の温度・圧力条件では、深さ約 800m以深でCO_2は超臨界状態となる．超臨界状態のCO_2密度は 0.5～0.8 g/cm^{3}で地下水よりも軽く浮力が働くが，貯留層上に遮蔽層が存在すれば，地表へのCO_2の上昇は遮られると考えられる．CO_2の地下深部への圧入技術は，ＥＯＲ（石油増進回収法、枯渇しつつある油田にCO_2を圧入し、石油回収量を回復させる技術）での実績が多くあり，ほぼ確立されていると言える．しかし，CO_2を圧入した後の漏洩を監視する技術は研究途上にあり，特に，漏洩や環境影響に関する安全性を評価する手法は確立されていない．

著者らは，二酸化炭素の圧入が及ぼす周辺環境への影響を高精度で予測するための数値解析技術の開発を行っている．本報では，文部科学省の「地球シミュレータ産業戦略利用プログラム」の一環として実施した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を紹介する．

2.　CO_2地下貯留の安全性評価と数値シミュレーションの役割

2.1　CO_2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[1)]によれば，「適切に選択され管理された地中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」としながらも，漏洩の可能性を否定していない．例えば，次のような漏洩シナリオが考えられる（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CO_2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無く，ローカルな地域にお

＊１　技術センター土木技術研究所
＊２　技術センター技術企画部情報技術室
＊３　ローレンスバークレー国立研究所
＊４　（独）産業技術総合研究所
＊５　（独）海洋研究開発機構

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CO_2を放出する可能性があり，CO_2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の場合は，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CO_2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CO_2濃度が局所的に上昇したり，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曝される可能性も指摘されている．

上記のようなCO_2漏洩に加えて，圧入箇所周辺の地下水環境に対する潜在的な影響も考えられるが，その影響を具体的に評価した研究事例は少ない．二酸化炭素の帯水層貯留は，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）に対して，　二酸化炭素を連続的かつ大規模に圧入するものであり，相当量の地下水が帯水層から排除されるとともに，周辺の地下水圧の上昇や地盤の隆起が生じる可能性がある．地下水圧の上昇域はCO_2の移行範囲よりもはるかに広いと考えられる．地下水圧が上昇すると，井戸を通じて塩水系地下水が浅部の淡水系帯水層に流出し，飲料用水の水質が変化する可能性がある（塩分濃度の上昇，pHの低下，重金属や有機物の溶出）．地下構造物の浮力が増大して補強工事（例えば，1970 年代の地下水の揚水規制後の東京駅）が必要になる可能性もありうる．このような広域的な水圧や水質の変化速度は比較的緩慢と考えられるが，影響範囲が広大であり修復に時間を要する可能性があるため、事前に予測して対処することが重要と考えられる．

2.2　数値シミュレーションの役割

IPCCによる国別温室効果ガス目録（インベントリ）ガイドライン[3)]の中に示されているCO_2貯留サイトからの放出量評価のフローの要約を図-2 に示す．その中で数値シミュレーションの役割を記すと次のようである．漏洩リスク評価では，サイトの特性調査（地質調査）と、信頼性の高いCO_2挙動予測モデルにより、放出可能性のある時間と場所における漏洩の可能性を評価する必要がある．モニタリング計画も予測モデルによる漏洩リスク評価の結果に基づいて決定される．ここでCO_2挙動予測モデルとは，具体的には多相流れや化学反応などを考慮した数値シミュレーションモデルを指している．圧入中の貯留層性能を評価するための短期シミュレーションに加えて，長期シミュレーションに

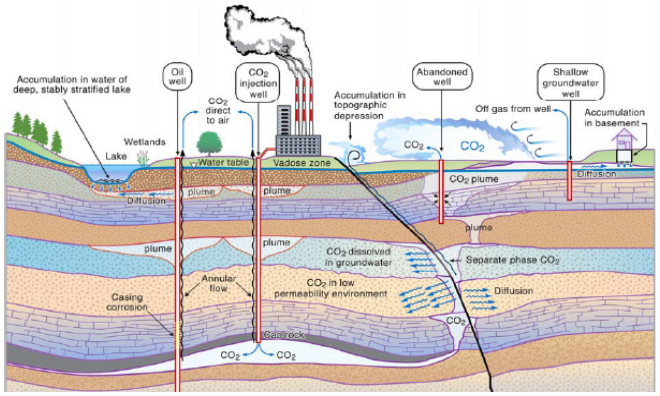


図-1　可能性のあるCO_2の漏洩経路[2)]

Figure 1. Potential leakage path of CO_2 [2)]

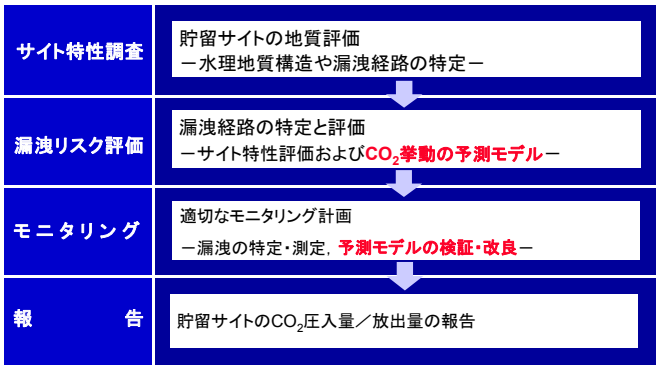


図-2 CO_2貯留サイトからの放出量評価[3)]（和訳/整理）

Figure 2 Evaluation of CO_2 emission from storage sites[3)]

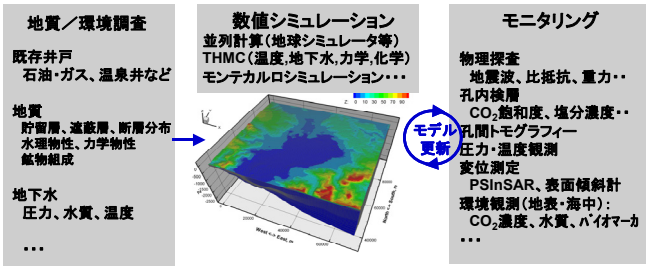


図-3　数値シミュレーションの位置付け

Figure 3 Role of numerical simulations in CO_2 geologic storages

よるCO_2の長期挙動予測（圧入後 100 年～1 万年間）を行う必要があり，特に，漏洩可能性の時期や場所，漏洩速度を評価するために，浸透率や空隙率，地層モデルなどの不確実性を考慮した感度解析も必要になると考えられる．周辺の地下水への潜在影響を予測する上でも，影響可能性のある井戸や地下構造物などを特定する上で数値シミュレーションは有力な手段となる．地下水影響評価では，圧力伝達の範囲がCO_2の移行範囲よりも広いため，漏洩評価よりもさらに広い領域を

計算領域に含めることが必要になるであろう．

以上述べたように，CO_2地下貯留の安全性評価においては，既存井戸，断層の存在や遮蔽層の不連続性などの漏洩リスク要因をモデルに組み込んだ地質モデルを，数多くの感度解析ケースや確率的なリアライゼーションについて解く必要が生じると考えられる．しかし，そのためには計算速度の高速化が課題となる．例えば，Kreftら[4]による漏洩リスクの計算事例（計算期間：1 万年）では，約 7 万節点の基本ケース（決定論モデル）の計算に 2 日を要しており，断層や遮蔽層を通じた漏洩に関する確率モデル（1000 ケース）の解析では粗い３次元モデル（約 1500 節点）を用いている．

著者らは，CO_2地下貯留の安全性評価では，様々なリスク要因を考慮した高精度モデルを高速で解析できるシミュレーション技術の開発・整備が必要と考えている．

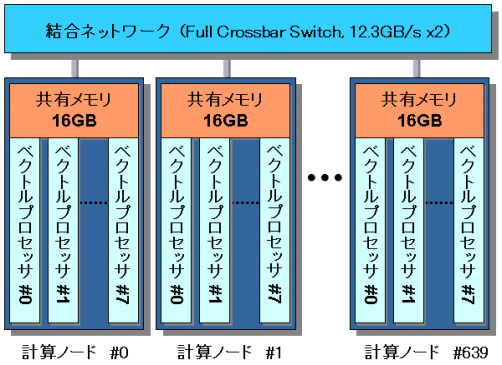
3.　地球シミュレータを用いたCO_2地下貯留の周辺環境影響シミュレーション

3.1　概要

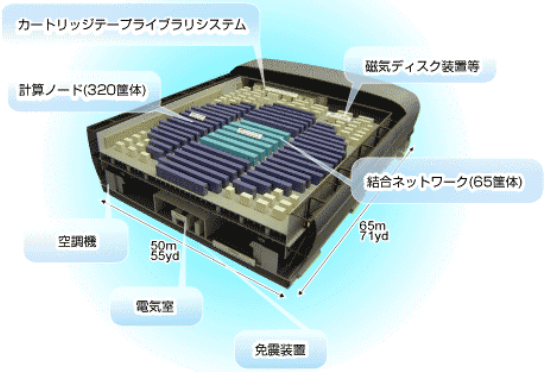
文部科学省の「地球シミュレータ産業戦略利用プログラム」において初年度に実施した内容を以下に紹介する．本研究では、非等温・多成分・多相流系の数値シミュレータ TOUGH2[5]の並列化バージョンである TOUGH2-MP[6]を用いる．TOUGH2-MP/ECO2N は、CO_2の地下挙動を予測するために，CO_2の流体物性（密度，粘性，地下水への溶解度）や，地下水（塩水）との二相流特性（相対浸透率，残留飽和度，毛管圧力など）を考慮できる代表的なシミュレータである．ここでは，地球シミュレータにおけるTOUGH2-MPのチューニングと実効性能について述べた後，前報[7]で実施した約 100 万節点のCO_2地下貯留シミュレーションを約 1000 万節点に詳細化して実施した結果を示す．

3.2　地球シミュレータの概要

地球シミュレータ[8]は，（独）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-4 (a)に示すように，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．高性能コンピュータの調査機関「TOP500 Supercomputer Organization」が年 2 回発表している世界的なスーパーコンピュータの性能ランキングでは、2002 年 6 月から 2004 年 11 月まで 5 回連続で首位を獲得した．理論ピ



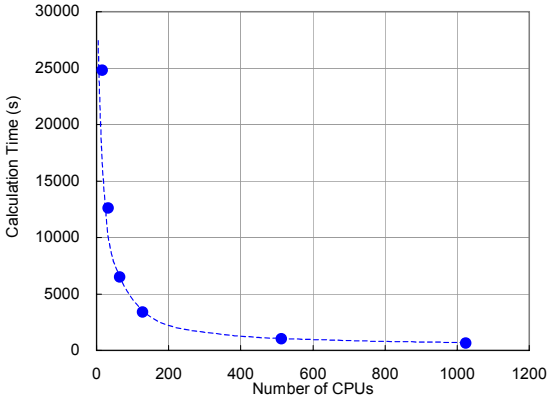
(a) 基本スペック



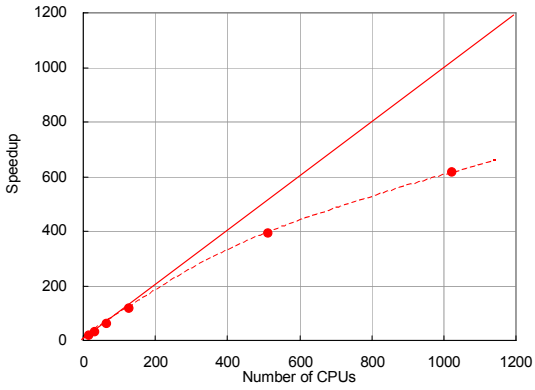
(b) システム構成

図-4 地球シミュレータのシステム概要[8]

Figure 4 Scheme of the Earth Simulator



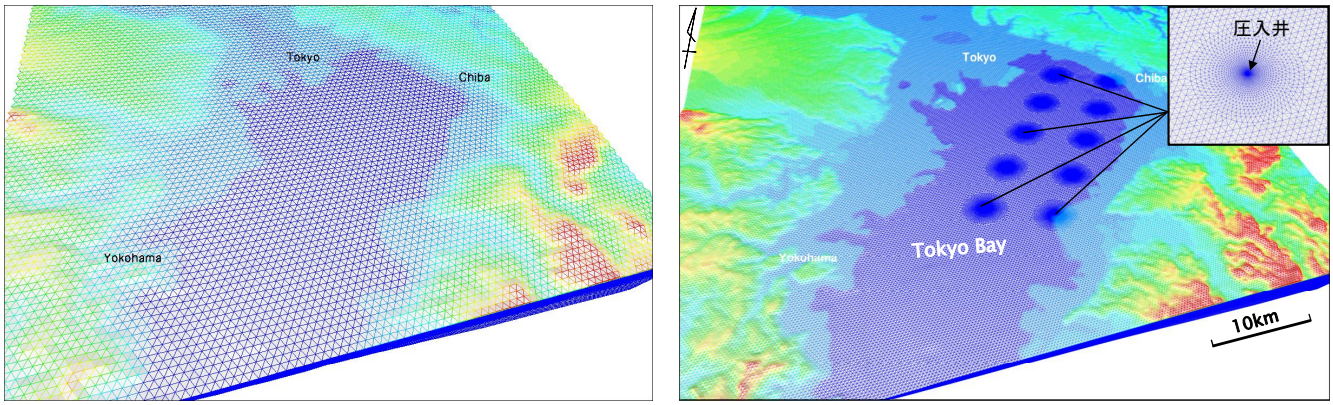
(a) CPU 数と実行時間の関係



(b) CPU 数と速度向上の関係

図-5 地球シミュレータ上での並列計算性能

Figure 5 Performance of parallel computing of TOUGH2-MP on the Earth Simulator



(a) 格子間隔 1km（約 50 万節点）　　(b) 格子間隔 200m（約 1,000 万節点）

図-6 格子間隔によるグリッド解像度の違い

Figure 5 Two models with different grid resolutions

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る．地球規模の環境変動の解明・予測を目的として開発され，地球温暖化や地殻変動など、文字通り地球規模でのシミュレーションに利用され、気候変動に関する政府間パネル（IPCC）の 2007 年ノーベル平和賞受賞にも大きく貢献した．現在（2008 年），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 130TFLOPS（主記憶容量 20TB）に増強する改修が行われている．

3.3　計算プログラムの最適化

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 95%以上のベクトル化率が必要とされる．また，地球シミュレータが有する 640 ノード（5120CPU）のうち、どれくらいの CPU 数まで使用できるかは，計算コードの並列計算性能である並列化率に基づいて決定される．例えば，512 ノードを使用するには、99.97%の並列化率が必要となる．

本研究で用いている解析コードTOUGH2-MP[6] は、これまでスカラー計算機に対してのみ使用されてきたため、初期のベクトル化率は 5%未満であった。そこで，解析コードの全面的な見直しと書き換えを行った結果，ベクトル化率が約 93.7%に向上した．並列化率についても，入出力の分散化などの処置により、99.93%を得た．地球シミュレータでの並列計算性能として，CPU 数に対する計算時間、速度向上の例を図-5 に示す．

この結果は，地球シミュレータの利用における大規模計算のための必要条件をほぼ満たしており，本計算コードが地球シミュレータの性能を生かすことのできる計算コードとして認められた．現在の並列化率であれば，187 ノード（1496CPU）での並列実行が可能である．ただし，ベクトル化率については，特にソルバ一部分のベクトル化率向上の余地が大きい．今後は，ソルバーの改良あるいは変更により，ベクトル化率のさらなる向上を図る予定である．

なお，次節で述べる約 1000 万節点のシミュレーションは，例えば，大成建設が保有する並列計算機（SGI ONYX 3800, CPU 数 64，ピーク性能 64GFlops）の速度では約約 2 ヶ月を要すると想定される計算が，地球シミュレータの 128 ノード（1024CPU）を使用すると約 3 日で完了し，実用的な時間で計算可能であることが分かった．

3.4　解析モデル

解析モデルについては，前報[7]と同じであるが，解析グリッドを，約 100 万グリッドから約 1000 万グリッドに詳細化した．

3.4.1　地形・地質構造モデル

関東平野南部地域の 60km×70km領域を対象に，地形面と地層面形状を反映した３次元高解像度の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 200m）を用いた．RITE[10]を参考に，上総層群の中部を二酸化炭素の貯留層とし，その上部を被覆する上総層上部と下総層を遮蔽層に設定した．貯留層と遮蔽層の横方向浸透率は各々100mdと 1mdに設定し，縦方向はその 1/10 とした．有効空隙率は一律に 40%を与えている．その他の詳細な条件については，前報[5]の基本ケースを参照されたい．

3.4.2　解析グリッド

解析グリッドを図-6(b)に示す．平面方向に節点間距離約 250m でボロノイ分割し，深度方向には，地形や地層面形状に沿って 100 レイヤーに分割した．その結果，グリッド総数は約 1000 万となった．特に圧力やガ

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 5m からのグリッドの詳細化を施した．参考に，一般的な PC クラスタやマルチコア PC などで計算可能な規模として，節点間距離 1km で離散化した 50 万節点の解析グリッドを図-6(a)に示す．地形面全体を格子で覆うので精一杯であり、地形の詳細な表現や井戸周辺の詳細化処理までは困難である．

3.4.3　境界条件

(1) 二酸化炭素の圧入条件

二酸化炭素を圧入する帯水層は，前述の通り，深度 800m以深の上総層群中部の梅ヶ瀬層と東日笠層とした[7]．この深度では，二酸化炭素は全て超臨界状態になる．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．圧入レート（質量流量）は一定とし，圧入井１本当たり 100 万t/年とした．従って，計 10 本トータルの圧入速度は，1,000 万t/年である．圧入は 100 年間継続した後中止し，シミュレーションは圧入開始から 1,000 年後まで実施した．

(2) 外部境界条件

地盤表面（地表面・海底面）と側方境界は，圧力固定（完全水飽和）とし，底面を不透水境界とした．圧力は，地表面及び海水面で大気圧（1 atm）とし，側方境界面には静水圧分布を与えた．

3.4.4　解析結果

圧入開始から 100 年後の二酸化炭素プリュームを図-7 に示す．東京湾下に前述の 10 地点から圧入されたプリュームが確認される（各々の半径は約 5km）．図-8 は，ある東西断面における二酸化炭素（超臨界状態）プリュームの形状変化をCO_2飽和度で示している．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CO_2の密度が地下水よりも軽いので，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，遮蔽層は東落ちで傾斜（約 1°）しているので，遮蔽層に沿った斜め上方への移動が生じている．特に，100 年間の圧入終了後は，浮力による移動が主体となる．図-9 に、約 50 万節点と約 1000 万節点での解析結果の比較を示す．解析グリッドの細かい(b)の方が、数値分散が低減されCO_2プリュームの形状が細かく表現されているのが分かる．同様の理由により、粗い解析グリッドを用いると、地下水中へのCO_2の溶解量が多く計算されるなどの誤差が生じる。

二酸化炭素の圧入前後の地下水圧（全水頭換算）の分布を図-10 に示す．この図から解析領域のほぼ全域にわたり全水頭変化が生じているのが分かる．例えば湾岸地域において水頭換算で数 10m の顕著な水圧上昇が生じる結果になっており，大規模な二酸化炭素貯留を行う場合には，周辺への地下水影響についても考慮する必要性が指摘される。

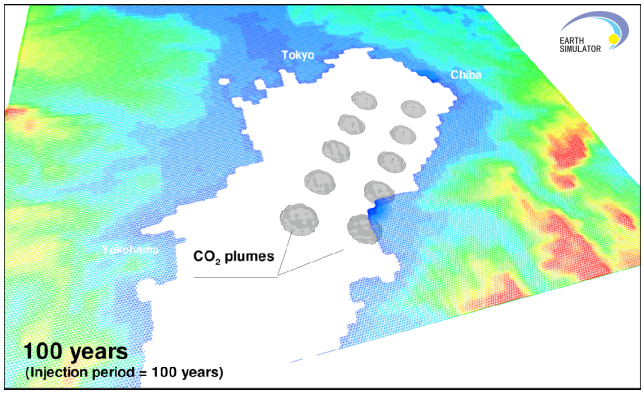


図-7　二酸化炭素プリューム（100 年後）
Figure 7 Plumes of injected supercritical CO_2

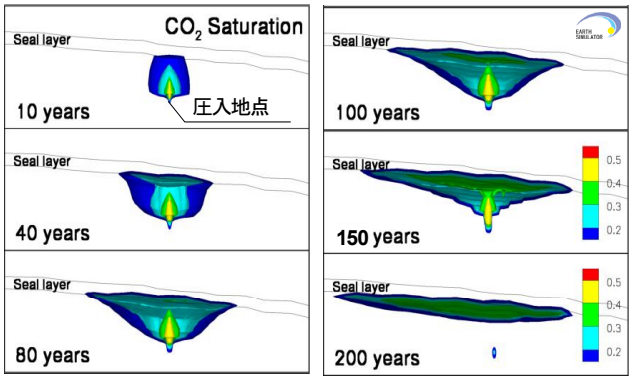
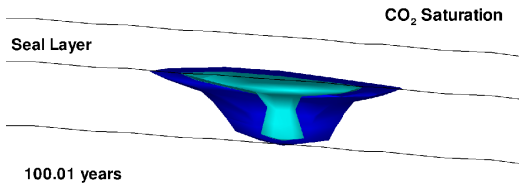
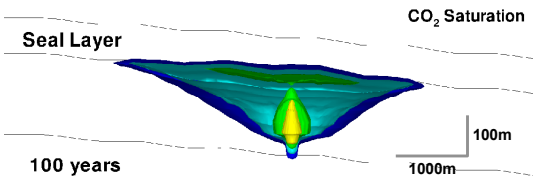


図-8　プリュームの形状変化（CO_2飽和度）
Figure 8 Time evolution of a CO_2 plume

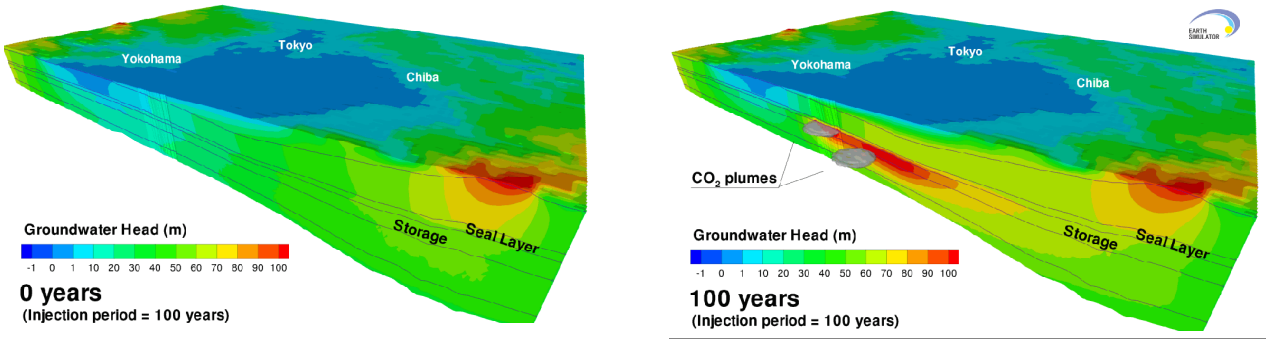


(a) 通常規模のモデル（約 50 万節点）



(b) 地球シミュレータで解析可能な規模（約 1000 万節点）

図-9　グリッド解像度の異なる計算結果の違い
Figure 9 Effect of grid resolution on calculated geometry of a CO_2 plume



(a)　圧入前　　(b) 圧入開始から 100 年後

図-10　周辺地下水圧の変化（全水頭換算）

Figure 10 Changes of groundwater pressures due to the CO_2 injections

4.　まとめ

本研究の初年度である平成 19 年度は，地球シミュレータでプログラムを実行するための準備期間として、計算プログラム（TOUGH2-MP）の最適化を行った．そして、128 ノード（CPU 数 1024）にて、関東平野南部地域を対象に，　1000 万グリッド規模の予備解析を実施した．その結果，地球シミュレータによる大規模解析は，二酸化炭素の局所的な地中挙動と広域的な周辺環境影響を総合的に検討する上で有効であることが分かった．

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「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．研究の実現ならびに実施をサポートしていただいた大成建設（株）の今村 聡氏，青木智幸氏，小川豊和氏，ローレンスバークレー国立研究所の唐崎建二氏，Karsten Pruess 氏にお礼を申し上げる．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新宮 哲氏，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，NEC システムテクノロジー（株）の野口孝明氏に多大なるご協力をいただいた．サンコーコンサルタント（株）の佐々木勝司氏，日向哲氏には地質データをご提供いただいた．ここに記して謝意を表する．

参考文献

1) IPCC Special Report. on Carbon dioxide Capture and Storage, 2005.
2) 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.
3) IPCC, Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories, 2006.
4) Kreft.E., Van.der.Meer.B., Geel.K., Svensson.R., Bernstone.C., Geological characterisation of the structure Schweinrich as a candidate site for CO_2-storage in Germany, Proceedings of the 7lh International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT-8), 2005.
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, Efficient Parallel Simulation of CO_2 Geologic Sequestration in Saline Aquifers, SPE 106026, 2007.
7) 山本 肇, Zhang, K.，唐崎建二，丸井敦尚，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，大成建設技術センター報，第 40 号，41-1～10, 2007.
8) http://www.jamstec.go.jp/es/jp/system/index.html
9) 佐々木勝司，日向哲，中村静也，堀川滋雄，丸井敦尚，宮越昭暢，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 年春季講演会講演要旨，pp.80-85, 2006.
10) （財）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.