

TSUBAME 共同利用 平成 26 年度 学術利用 成果報告書

多相流 LBM シミュレーションの大規模間隙モデルへの適用  
Multiphase LBM simulation for large-scale porous media

辻 健

Takeshi TSUJI

九州大学 カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所  
International Institute for Carbon-Neutral Energy Research, Kyushu University  
<http://i2cner.kyushu-u.ac.jp/~tsuji/>

## 邦文抄録(300 字程度)

二酸化炭素回収・貯留 (CCS) プロジェクトでは、岩石間隙内での CO<sub>2</sub> 挙動の理解が、CO<sub>2</sub> の貯留ポテンシャルの評価や、圧入した CO<sub>2</sub> の将来予測に必要となる。そこで格子ボルツマン法 (LBM) の計算コードを GPU に実装し、巨大なデジタル岩石内の多相流挙動を計算した。貯留層内での CO<sub>2</sub> の挙動は、貯留層の条件 (例えば温度、界面張力、間隙形状、濡れ性、水圧など) に強く依存する。本研究で二相 LBM を用いて、様々な貯留層条件で CO<sub>2</sub> の挙動を計算し、効果的に CO<sub>2</sub> を貯留できる条件 (高い CO<sub>2</sub> の飽和度を実現する条件) を推定した。さらに CO<sub>2</sub> を圧入したデジタル岩石に再び水を圧入することで、CO<sub>2</sub> の残留トラップに有効な条件や、溶解トラップに有効な条件を推定した。

## 英文抄録

To evaluate storage capacity and predict the fate of injected CO<sub>2</sub> in CCS project, the fundamental information including micro-scale CO<sub>2</sub> behavior within the rock pore is required. Here, we investigated multi-phase flow behaviors inside 3D porous media by a highly efficient multi-phase lattice Boltzmann method (LBM). By using a graphic processing unit (GPU), we conducted the LBM simulation for the large digital rocks. The flow processes that drive of CO<sub>2</sub> migration are influenced by many reservoir parameters (e.g., temperature, interfacial tension, pore structure, wettability, and pressure gradient). Using the two-phase LBM, we successfully evaluated CO<sub>2</sub> behavior under various reservoir conditions and identified effective conditions for CO<sub>2</sub> storage (i.e., conditions for high CO<sub>2</sub> saturation). By conducting LBM simulation for the imbibition process (i.e., water injection into CO<sub>2</sub> saturated rock), furthermore, we identified the reservoir conditions suitable both for residual trapping and solubility trapping.

*Keywords: Multiphase flow, LBM, GPGPU, Digital rock, and CO<sub>2</sub> geological storage*

## 背景と目的

近年、地球温暖化対策として、二酸化炭素 (CO<sub>2</sub>) の回収・貯留技術 (CCS) の重要性が認識されてきている。CCS は、岩石の間隙に大量の CO<sub>2</sub> を注入することで永久的に地下に閉じ込める技術であり、近未来的に CO<sub>2</sub> の排出を削減できる技術として注目されている。既に世界各地で CCS プロジェクトは実施されており、CCS による CO<sub>2</sub> の削減が始まっている。

この CCS プロジェクトにおいて、安全で効率的に CO<sub>2</sub> を貯留するためには、岩石の間隙内部の CO<sub>2</sub> の挙動を調べるのが重要となる。そのため、多くの実験が実施されている。さらに実験が難しい条件での CO<sub>2</sub> 挙動や、その定量化に向けて、流体計算が多

く実施されている。しかし地層を流れる CO<sub>2</sub> の挙動のシミュレーションでは、単純化した間隙モデルに基づく評価に限られているのが現状であった。このような単純化した間隙形状では、実際の地層内の流体挙動を説明することが難しい。

近年、マイクロフォーカス X-CT などのイメージング技術が発達により、実際の岩石の間隙形状 (デジタル岩石) を、 $\mu\text{m}$  の解像度で抽出することができるようになった (図 1)。さらに計算機が発達によって、デジタル岩石に対して、格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method; LBM) による流体シミュレーションを実施できるようになってきた。LBM は、速度の分布関数の時間発展方程式を解くことで、流

体運動を記述する手法である。圧力ポアソン方程式を解かず、また局所的な計算がメインであるため、複雑な多孔質形状内の流れの計算に適している。

昨年度に実施したプロジェクト（辻, 2014）では、Graphics Processing Unit（GPU）を用いた並列計算により、実際の岩石の巨大な間隙モデル（グリッドサイズ： $1000^3$ ）に対して、高解像度（ $2\mu\text{m}$ ）で LBM シミュレーションを行うことに成功した（図 2）。計算領域のサイズアップを行うことで、ポアスケール（ $\mu\text{m}$  スケール）からコアスケール（ $\text{mm}$  スケール）の数値シミュレーションを可能となった。それにより、シミュレーションの結果を、実験室で得られた結果と比較できるようになった。

## 概要

昨年度のプロジェクトで作成した計算コードを用いて 2 相の流体シミュレーションを実施し（辻, 2014）、 $\text{CO}_2$  地中貯留に関する様々な課題に挑戦した。ここでは、（1）様々な貯留層条件で流体挙動の計算し、効果的に  $\text{CO}_2$  を貯留できる条件を調べた研究、（2） $\text{CO}_2$  を圧入した岩石に再び水を圧入する吸水過程（Imbibition process）の計算によって、効果的に残留トラップや溶解トラップを引き起こす貯留層条件を調べた研究、（3） $\text{CO}_2$  の挙動から鉱物化をモデリングし、その鉱物化が流体の挙動に与える影響を解明した研究を紹介する。

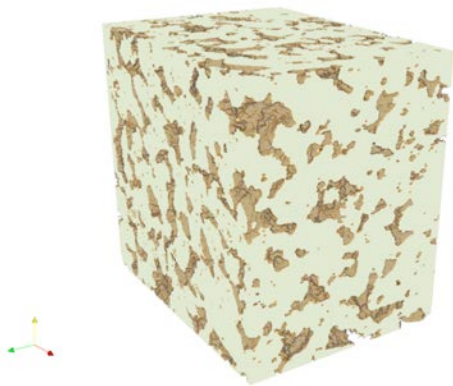


図 1. ベレア砂岩のデジタル岩石。この岩石モデルの中を流れる多相流挙動を計算する。

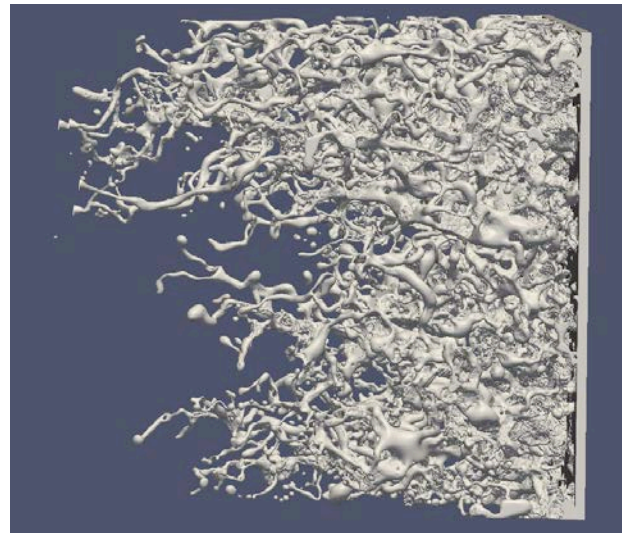


図 2. 排水過程（Drainage process）のシミュレーション結果（辻, 2014）。白い部分が間隙内に圧入した  $\text{CO}_2$  である。ここでは右側から左側に向かって  $\text{CO}_2$  を圧入した。

## 結果および考察

### 1) 様々な貯留層条件での $\text{CO}_2$ 挙動（排水過程）：効果的に $\text{CO}_2$ を圧入できる条件の推定

貯留層内の流体挙動をコントロールするパラメータ（例えば温度、界面張力、間隙形状、濡れ性、水圧など）は非常に多い。岩石内の流体挙動の測定は、実験室でも実施されているが、実験で測定できる条件は限られている。また複雑な形状の間隙内部の  $\text{CO}_2$  の挙動は、定量化が難しいことが多い。

ここではデジタル岩石を用いたアプローチにより、貯留層条件に依存した流体挙動特性（浸透率など）を定量的に評価した研究を紹介する（e.g., Jiang et al. 2014; Yamabe et al., 2015）。界面張力を変化させて  $\text{CO}_2$  の挙動などを調べたところ、界面張力の小さい場合（図 3a）のほうが  $\text{CO}_2$  は速く流れる（浸透率が高く圧入効率が良い）ことが分かった。一方、界面張力が大きい場合（図 3b）のほうが、最終的な  $\text{CO}_2$  の飽和度は大きくなることが分かった。これらの結果から、この手法を用いれば、様々な貯留層の条件に依存した  $\text{CO}_2$  の飽和度や浸透率を定量的に推定できることが示された。

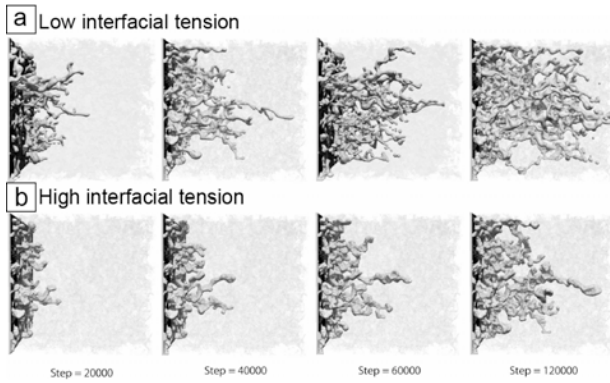


図 3. 界面張力に依存した CO<sub>2</sub> の挙動 (Jiang et al., 2014). (a)低い界面張力の場合. (b)高い界面張力の場合.

## 2) 残留・溶解トラップが効果的に働く貯留層条件の推定 (吸水過程シミュレーション)

CO<sub>2</sub>の貯留層内での残留トラップ量の定量化を目的として、界面張力が残留 CO<sub>2</sub> クラスターに与える影響を調べた。CO<sub>2</sub>の圧入が終了した後に、再び水を圧入するシミュレーションを実施し、残留トラップする CO<sub>2</sub> 量を定量化した (図 4 ; Jiang and Tsuji, 2015)。また残留 CO<sub>2</sub> クラスターに対して、サイズ、長さ、接触面積の分布を分析し、界面張力がこれらの性質に対する影響について検討を行った。

その結果、界面張力を増やすにつれて、残留 CO<sub>2</sub> クラスターのサイズが大きくなり、トラップ量が増加する傾向があることが分かった (図 4c)。一方、低い界面張力では、広い界面面積をもたらし、溶解トラップにとっては有利な条件と考えることができる (図 4a)。

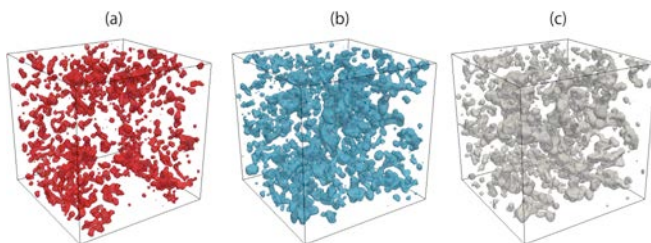


図 4. 残留 CO<sub>2</sub> の分布 (Jiang and Tsuji, 2015). 左側から右側へ界面張力が高くなる.

## 3) CO<sub>2</sub> の鉱物化モデリング : 鉱物トラップの再現と水理特性に与える影響

CO<sub>2</sub> 圧入に伴う鉱物化のモデリングを試みた。それ

により、CO<sub>2</sub> の鉱物トラップの再現と、それが間隙流体に与える影響を調べた。

鉱物沈殿のモデル化では、まず LBM で計算された速度場の情報から移流拡散方程式等を用いて各グリッドでの CO<sub>2</sub> 濃度を計算した。その濃度が、ある閾値を超えた場合に、そのグリッドを間隙から鉱物に変化させる。この操作を各時間ステップで行い、鉱物化の進行を再現した (図 5)。なお、この鉱物沈殿のモデル化は、実験によって検証を行っている。

鉱物化に伴って、間隙率が 20% から 10% に低下した場合 (図 5) に、絶対浸透率は 1/10 程度になることが分かった。また鉱物化によって、CO<sub>2</sub> の相対浸透率は、大きく低下することが分かった。一方、地層水の相対浸透率は、あまり変化しないことなどが分かった (Jiang and Tsuji, 2014)。

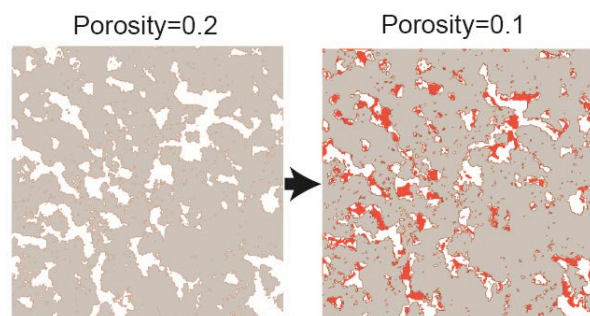


図 5. 間隙流体挙動を考慮した鉱物化シミュレーションの結果 (Jiang and Tsuji, 2014). 赤い部分が鉱物化した炭酸塩鉱物を示す.

まとめ、今後の課題

昨年度に作成した計算コードを用いることで、間隙内の流体挙動に関する様々な課題の解決が可能となった。本研究課題のタイトルにあるように計算モデルの大規模化も目指しているが、今年度はこのアプローチを利用して、CO<sub>2</sub> 地中貯留で重要となる間隙内の流体挙動を解明することに力を入れた。この報告書では 3 つの成果を報告したが、これら以外の課題にもチャレンジしており、今後も適用分野を広げる努力を継続する。このような試みによって、実際の地下で生じている流体挙動や地化学反応を、デジタル岩石を用いた計算で再現できるようになると確信している。

引用文献 (本研究課題に関係する成果)

- Jiang, F., and T. Tsuji (2015), Impact of interfacial tension on residual CO<sub>2</sub> clusters in porous sandstone, *Water Resources Research*, 51.
- Jiang, F., and T. Tsuji (2014), Changes in pore geometry and relative permeability caused by carbonate precipitation in porous media, *Physical Review E* 90, 053306.
- Jiang, F., T. Tsuji, and C. Hu (2014), Elucidating the role of interfacial tension for hydrological properties of two-phase flow in natural sandstone by an improved lattice Boltzmann method, *Transport in Porous Media*, 104, 1, 205-229.
- 辻 健 (2014), 多相流 LBM シミュレーションの大規模間隙モデルへの適用, *TSUBAME 共同利用平成 25 年度学術利用成果報告書*.
- Yamabe, H., T. Tsuji, Y. Liang, and T. Matsuoka (2015), Lattice Boltzmann simulations of supercritical CO<sub>2</sub>-water drainage displacement in porous media: CO<sub>2</sub> saturation and displacement mechanism, *Environmental Science & Technology*, 49 (1), 537-543.