

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 22 日現在

機関番号：17102

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2014～2015

課題番号：26887028

研究課題名(和文) 格子ボルツマン法とGPGPUを用いた大規模計算による多孔質岩石内の複雑流動の解明

研究課題名(英文) Investigation of the complex flow behavior in porous rock by using the large-scale parallel GPGPU computing of lattice Boltzmann method

研究代表者

Jiang Fei (Jiang, Fei)

九州大学・カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所・学術研究員

研究者番号：60734358

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では最新の並列計算技術GPGPUを駆使し、マイクロ流動シミュレーション手法として有望な格子ボルツマン法を高効率化にし、超大規模計算に対応できるボアスケール二相流シミュレーターを開発した。このシミュレーターをベースにデジタルロック手法を構築し、CO2地下貯留における超臨界CO2の岩石空隙内の挙動を調べた。計算した結果に基づき、CO2貯留のメカニズム解明、貯留量最適化または安全性評価に有力な情報を提供することができた。

研究成果の概要(英文)：We developed a high-efficient pore-scale two-phase numerical simulator by optimizing the robust lattice Boltzmann method using the innovative GPGPU (General Purpose Graphics Processing Unit) parallel computing technique. Based on the developed simulator, we adopted the digital rock approach to investigate the behavior of supercritical CO2 inside the pore space of reservoir rock during the CO2 geological storage project. Finally, our data provide useful information for understanding of CO2 storage mechanisms, optimizing the storage capacity, and evaluation of the storage risk.

研究分野：計算力学

キーワード：二酸化炭素貯留 多孔質媒体シミュレーション 流体計算 デジタルロック

1. 研究開始当初の背景

近年国際的に地球温暖化対策とされる二酸化炭素 (CO₂) の回収・貯留技術 (CCS) の重要性に対する認識が高まっている。しかし、日本での CCS 地中貯留の実施に当たって、安全性、キャパシティ及び地層にもたらす影響を慎重に評価する必要がある。圧入された CO₂ は高圧条件で超臨界流体となり、それが多孔質岩石内の鉱物及び油・水と混在し、複雑なシステムになっており、この複雑挙動の解明が CO₂ トラッピングメカニズムの理解及び安全評価には不可欠である。

そのため、超臨界 CO₂ の地層内の流動現象を解明する必要がある。地下の流動現象は、流体の物性、ポアの形状 (大きさ、分布)、濡れ特性 (ウェッタビリティ) に代表される岩石の性質、CO₂ 圧入速度等の条件により、その挙動が大きく変化する。このような複雑な現象を解明するためには、岩石孔隙 (ポアスケール: 数 μm) における微視的流動現象についての実験的・理論的研究が不可欠である。近年、岩石の物性及び孔隙内の複雑物理現象を効率的にモデル化するため、スタンフォード大学が提唱しているデジタルロック (Digital Rock) 技術が注目されている。これは岩石モデルを Micro-CT などのイメージング技術によって、コンピュータ上で流体シミュレーションの実施や、空隙率、浸透率、電気伝導度などの計算方法である。これは石油増進回収技術に応用するだけでなく、地下における CO₂ の挙動の解明にも有力な手法になっている。CO₂ の流れの挙動計算に関しては、従来、簡単なポアネットワークモデルで行われてきたが、計算機技術の発達によって、デジタルロックに対して、実際の岩石の空隙形状における直接流体計算が可能となった。ただし、一般の岩石の空隙形状を正確に再現するため、高い解像度の CT 画像が必要となる。また、高精度の物性計算を可能にするため、計算領域が岩石サンプルの REV (Representative elementary volume) サイズをカバーする必要がある。超高解像度及び超大規模計算領域に伴い、膨大な計算能力も要求される。

2. 研究の目的

デジタルロックにおける高精度計算では、膨大な計算量が必要で、現存の工学流体シミュレーターでは CPU 処理能力の限界を超えてしまうため、非常に困難である。本研究では最新の並列計算技術 GPGPU を駆使し、マイクロ流動シミュレーション手法として有望な格子ボルツマン法を高効率化にし、超大規模計算に対応できるポアスケール多相流シミュレーターを開発することで、CO₂ 地下貯留における異なる岩石内の超臨界 CO₂ 挙動の解明を目指す。この手法を用いて、実際の岩石の空隙モデルに対して、高解像度 (2 μm) か

つ大規模シミュレーションを行うことで、世界初となる 1000x1000x1000 (10 億格子レベル) の巨大グリッドでの 2 相流シミュレーションの実施が可能となり、ポアスケールで行った LBM 計算結果を、コアスケールの実験結果と定量的に比較することができる。シミュレーションと実験の連携によって、多孔質岩石内において様々な二相流物理現象がより正確に解明できる。

3. 研究の方法

(1) 異なる貯留層岩石に対するデジタルロックの再構築

日本の地質で代表的な貯留層岩石サンプルを用意し、高解像度マイクロ CT スキャナで、岩石サンプルの複雑且つ微細な空隙構造を正確に捉えるように断面画像を取得する。取得した岩石断面像から補間計算によって、解像度を落とさずに 3 次元デジタルロック形状モデルを構築する。

(2) GPGPU 計算による世界最速のポアスケール多孔質媒体シミュレーターの開発

多孔質媒体内すべての流体計算を陽的スキームで行い、またメモリの節約及び差分計算のコンパクト化などを工夫し、GPGPU 計算と併用することで、世界一の高性能ポアスケール多孔質媒体シミュレーターを開発する。

(3) 界面張力 (IFT) や、粘性、濡れ性などパラメータに依存した CO₂ 挙動変化の評価

最構築したデジタルロックと開発した多孔質媒体シミュレーターを用いて、まず岩石サンプルの浸透率、及び相対浸透率を計算する。超臨界 CO₂ の物性である界面張力や粘性、または岩石鉱物の濡れ性を変化させ、いくつかの条件で空隙内の二相流現象を計算する。それにより、超臨界 CO₂ の挙動における界面張力・粘性・濡れ性の依存性を調べ、飽和度及び相対浸透率の変化などを評価し、CO₂ の圧入の有効性を検討する。

4. 研究成果

(1) 貯留層岩石に対するデジタルロックの再構築

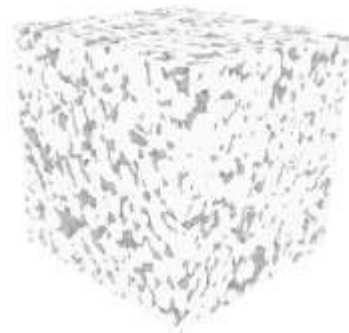


図 1. マイクロ X-CT 画像から構築されたベレア砂岩のデジタルロック

代表性のあるベレア砂岩サンプルを、約 mm 単位のサイズに加工し、円柱に整形した。整形したサンプルを1-2ミクロンの解像度でCT測定を行い、得られた CT 断面図から、岩石性質（間隙サイズ、均一性）を分析し、画像処理技術で間隙形状を明確に分かるように最適化した。二次元の断面像から補間計算によって、岩石3次元形状モデルを再構築した（図1）。最構築したデジタルロックから、空隙のサイズ分布を計算した（図2）。平均的空隙サイズは15~20 μmのあたりに集中し、分布していることがわかった。

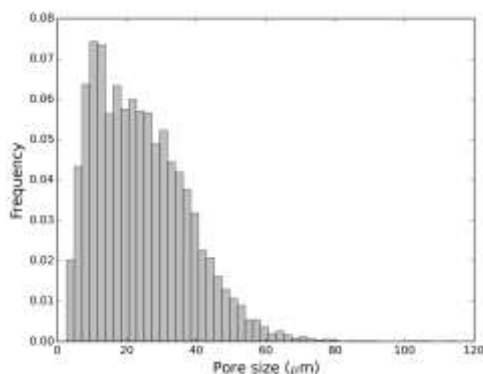


図2. ベレア砂岩の空隙のサイズ分布 (Jiang et al., 2015)

(2) GPGPU 計算による世界最速のポアスケール多孔質媒体シミュレーターの開発

格子ボルツマン法は近年多孔質媒体内の流れ計算において流行になっている。今回採用する RK color 2 相流 LBM モデルは、MRT (multiple-relaxation-time) などの改良を加えて、粘性比の高い条件でも、安定性を保つことができる。この2相流モデルはいくつの利点がある。まず、これは Poisson 方程式を解かない陽解法であり、かつ局所的な計算がメインで、大規模 GPU 並列計算に適していると考えられる。また、界面の追跡にフェーズフィールド法概念を取り込み、並列化も容易である。

並列計算では、マルチ GPU 方式を採用した。マルチ GPU 計算では、はじめに領域を分割する必要がある。本研究では、流体格子数を均等に割り、z 方向に分割する方法を採用した。分割領域界面では、一層の ghost レイヤーが設けられ、これは領域間のデータ転送かつカラー勾配の計算に用いる。GPU 間のデータ転送は、二つのパターンがある。同一のマザーボード（ノード）に装着している GPU ボード間のデータ転送は、CPU を介して行う。一方で異なるノード間のデータのやり取りは MPI (Message Passing Interface) 規格を準じて、LAN ケーブルまたは Infiniband を経由して実施する。データ転送を効率するために、CPU ホスト側のメモリ保存は pinned メモリ方式で行う。このようなコードの最適化によって、二相流シミュレーションの計算効率を大幅に向上させることに成功した。

以上のように計算コードを効率化することで、 1000^3 グリッドという大きな領域で CO_2 圧入シミュレーションを実現した（図3）。このような巨大グリッドモデルの計算を行うことができれば、長さ1cmの砂岩に対して、LBM を用いて CO_2 の挙動を調べることができるようになる。このように計算領域のサイズアップを行うことで、ポアスケール（μm スケール）から岩石スケール（mm スケール）の直接数値シミュレーションを可能となり、実験室の結果と比較した議論を行うことができるようになった。



図3. Drainage 過程のシミュレーション結果 (グリッドサイズ: 1000^3). 白い部分が空隙内に圧入した CO_2 (Non-wettable phase) である。右側から左側に向かって CO_2 を圧入している。

(3) 界面張力 (IFT) や、粘性、濡れ性などパラメータに依存した CO_2 挙動変化の評価

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 CO_2 の挙動は、定量化が難しいことが多い。

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。界面張力を変化させて 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4a）のほうが 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4b）のほうが、最終的な 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 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。

また、 CO_2 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_2 クラスタに与える影響を調べた。 CO_2 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_2 量を定量化した（図5; Jiang and Tsuji, 2015）。また残留 CO_2 クラスタに対して、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 CO₂ 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 5 c)。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 5 a)。

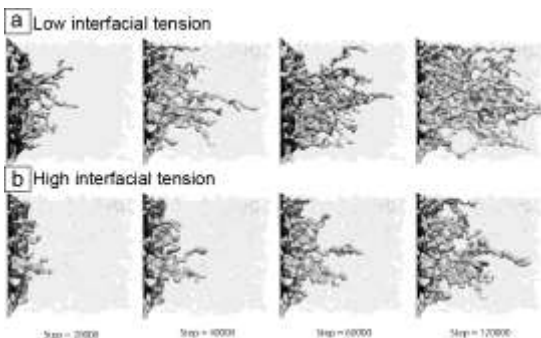


図4. 界面張力に依存した CO₂ の挙動 (Jiang et al., 2014). (a) 低い界面張力の場合. (b) 高い界面張力の場合.

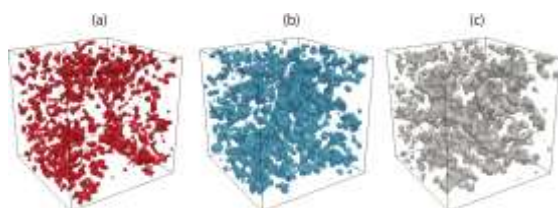


図5. 残留 CO₂ の分布 (Jiang and Tsuji, 2015). 左側から右側へ界面張力が高くなる.

最後に CO₂ 圧入に伴う鉱物化のモデリングを試みた。それにより、CO₂ 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。

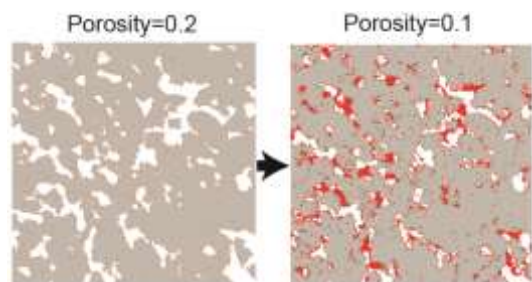


図6. 間隙流体挙動を考慮した鉱物化シミュレーションの結果 (Jiang and Tsuji, 2014). 赤い部分が鉱物化した炭酸塩鉱物を示す。

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 CO₂ 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 6)。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、CO₂ 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)。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 5 件)

① Fei Jiang, Takeshi Tsuji, Numerical investigations on the effect of initial state CO₂ topology on capillary trapping efficiency, International Journal of Greenhouse Gas Control, 2016, Volume 49, Pages 179–191 (査読あり)
DOI: 10.1016/j.ijggc.2016.03.006

② Takeshi Tsuji, Fei Jiang, Kenneth T. Christensen, Characterization of immiscible fluid displacement processes with various capillary numbers and viscosity ratios in 3D natural sandstone, Advances in Water Resources, in press, (査読あり)
DOI :10.1016/j.advwatres.2016.03.005

③ Fei Jiang, Takeshi Tsuji, Impact of Interfacial Tension on Residual CO₂ Clusters in Porous Sandstone, Water Resources Research, 2015, Volume 51, Issue 3, Pages 1710–1722 (査読あり)
DOI: 10.1002/2014WR016070

④ Fei Jiang, Takeshi Tsuji, Changes in Pore Geometry and Relative Permeability caused by Carbonate Precipitation in Porous Media, Physical Review E. 2014, 90, 053306, (査読あり)
DOI: 10.1103/PhysRevE.90.053306

⑤ Fei Jiang, Takeshi Tsuji, Changhong Hu, 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, 2014, Volume 104, Issue 1, pp 205–229 (査読あり)
DOI: 10.1007/s11242-014-0329-0

[学会発表] (計 13 件)

① Fei Jiang, Takeshi Tsuji, Investigations of the impact of wettability heterogeneity on trapping and relative permeability using pore-scale simulations, AGU Fall Meeting 2015, San Francisco, USA

② Takeshi Tsuji, Fei Jiang, and K. Christensen,

Influence of reservoir conditions on multiphase flow in natural sandstone using lattice Boltzmann simulation: Investigation of suitable conditions in CCS and EOR, AGU Fall Meeting 2015, San Francisco, USA

③ **Fei Jiang**, Takeshi Tsuji, Investigations on Relationship between Initial and Residual Saturation by Lattice Boltzmann Simulations, 7th International Conference on Porous Media & Annual Meeting 2015, Padova, Italy

④ Takeshi Tsuji, **Fei Jiang**, and Kenneth Christensen, Influence of reservoir conditions upon multiphase fluid displacement patterns within natural sandstone, 7th International Conference on Porous Media & Annual Meeting 2015, Padova, Italy

⑤ Takeshi Tsuji, Tatsunori Ikeda, and **Fei Jiang**, Digital rock physics for seismic monitoring of injected CO₂, The 132th SEGJ Conference 2015, Waseda University, Tokyo

⑥ **Fei Jiang**, Takeshi Tsuji, CO₂ Dissolution Enhancement due to Velocity Circulation during Injection, MMIJ 2015, Chiba, Japan

⑦ Takeshi Tsuji, **Fei Jiang**, and Tatsunori Ikeda, Development of geophysical monitoring method of injected CO₂ using ambient noise, and its quantitative estimation using digital rock physics, MMIJ Spring Meeting, 2015, Chiba, Japan.

⑧ **Fei Jiang**, Takeshi Tsuji, Investigations on Capillary Trapping Mechanism by a Digital Rock Approach, CINEST (International Symposium on Earth Science and Technology) 2014, Fukuoka, JAPAN

⑨ **Fei Jiang**, Takeshi Tsuji, Interfacial tension effect on cluster size distributions for residual trapping of CO₂ in sandstones, GHGT12, 2014, Austin, USA

⑩ **Fei Jiang**, GPU Accelerated Two Phase Flow Simulation in Real Rock using the Lattice Boltzmann Method, GTC Japan 2014, Tokyo, Japan

⑪ **Fei Jiang**, Takeshi Tsuji, Lattice Boltzmann Simulation of Cluster Size Distributions for Residual Trapping of CO₂ in Sandstones, AOGS (Asia Oceania Geosciences Society) 2014, Sapporo, Japan.

⑫ Takeshi Tsuji and **Fei Jiang**, Evolution of Hydrological and Elastic Properties Due to Carbonate Precipitation within Digital Rock

Sample, AOGS (Asia Oceania Geosciences Society), 2014, Sapporo, Japan.

⑬ **Fei Jiang**, Takeshi Tsuji, Effect of Interfacial Tension on Residual CO₂ Clusters in Sandstone, September. MMIJ 2014, Kumamoto, Japan

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

蔣飛 (Fei Jiang)

九州大学・カーボンニュートラル・エネ

ギー国際研究所・学術研究員

研究者番号：60734358

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし