

岩盤のCO₂貯留性能評価のためのマルチスケール解析

東北大学大学院 学生員 落合 悠貴
東北大学大学院 正 員 加藤 準治
東北大学大学院 正 員 寺田 賢二郎
東北大学大学院 正 員 京谷 孝史

1. はじめに

現在、二酸化炭素の大気放出抑制対策として、発電所などから排出される大量の二酸化炭素を分離・回収・輸送して、地中の帯水層などに封じ込める二酸化炭素回収・貯留(CCS)が注目されている。本研究では、多孔質体に二酸化炭素を圧入した際のマルチスケールにおける流体移動、化学種輸送、化学反応が連成した初期値・境界値問題について、均質化法により求めたマクロ物性を反映させ解析を行うマルチスケール解析手法を提案する。ここでは、簡単な数値解析例を用いて、本手法の妥当性の検証を行う。

2. CO₂貯留に関する巨視的初期値・境界値問題

2.1 流体移動

本研究では空隙内の流体を水(H₂O)と二酸化炭素(CO₂)の二成分とし、相を液相・気相の二相とした二成分二相系を仮定する。以下にマルチスケールにおける多孔質体の流体移動の支配方程式を示す。

$$\frac{\phi S^\beta \rho^\beta X_\kappa^\beta}{\partial t} = -\nabla X_\kappa^\beta \rho^\beta \mathbf{u}^\beta + q_\kappa^\beta \quad (1)$$

ここで \mathbf{u}^β は β 相のダルシー流速(m/s)、 S^β は β 相の飽和度、 ρ^β は β 相の密度(kg/m³)、 ϕ は空隙率、 X_κ^β は β 相における成分 κ の質量分率を表す。また、 q_κ^β は化学反応により生じる β 相における成分 κ のソース項(kg/(m³・s))である。

また、多相流のダルシー則は以下のように表せる。

$$\mathbf{u}^\beta = -k \frac{k_r^\beta}{\mu^\beta} (\nabla P^\beta - \rho^\beta \mathbf{g}) \quad (2)$$

ここで、 P^β は β 相のマクロ圧力(MPa)、 μ^β は β 相のミクロ領域での粘性係数(kg/(m・s))、 k はマクロ固有透水係数(m²)、 k_r^β は β 相の相対透水係数を表す。

2.2 化学種輸送

水溶性化学種の輸送現象は以下の移流拡散方程式に支配される。

$$\frac{\partial \phi S^l c_j^l}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{u}^l c_j^l - (\tau \phi S^l D^l) \nabla c_j^l) + q_j \quad (3)$$

ここで、 c_j^l は液相での成分 j の濃度(mol/m³)、 D^l は液相中での化学種の拡散係数(m²/s)、 τ は屈曲度、 q_j は化学反応により生じる成分 j のシンク/ソース項である。

2.3 化学反応

本研究では、CO₂貯留に関して支配的な化学反応と考えられる水溶性化学種の平衡反応、気体の溶解/脱ガス、鉱物の溶解/析出について扱う。マクロスケールでの反応速度は後述の反応速度に空隙率 ϕ と液相飽和度 S^l を乗じたものとなる。平衡反応は反応速度定数を用いて反応速度を求めている。

水溶性化学種の平衡反応

水溶性化学種の濃度は、質量作用の法則より化学種の濃度の関数として次式で求められる。

$$c_i = K_i^{-1} \gamma_i^{-1} \prod_{j=1}^{N_c} c_j^{v_{ij}} \gamma_j^{v_{ij}} \quad (4)$$

ここで c_i は i 番目の水溶性化学種のモル濃度(mol/m³)、 c_j は j 番目の成分のモル濃度(mol/m³)、 γ_i 、 γ_j は活動度係数、 K_i は平衡定数である。

鉱物の溶解/析出

一般に水相中における鉱物 m の溶解/析出の反応速度 r_m (mol/(m³・s))は実験的に求められ、それらは次式の形に集約される。

$$r_m = -\text{sign} \left(\log \frac{\prod_{j=1}^{N_c} c_j^{v_{mj}} \gamma_j^{v_{mj}}}{X_m \lambda_m K_m} \right) k_m A_m |\Omega_m^\theta - 1|^\eta \quad (5)$$

r_m が正であれば溶解速度、負であれば沈殿速度を表す。ここで、 X_m はのモル分率、 λ_m は活動度係数、 $\text{sign}()$ は符号関数、 k_m は反応速度定数(mol/(m²・s))、 A_m は反応比表面積(m²/m³)である。

ガスの溶解/脱ガス

ヘンリーの法則より、ガスの溶解/脱ガスの反応は平衡反応として次式で表される。

$$P_f \Gamma_f K_f = \prod_{j=1}^{N_c} c_j^{v_{fj}} \gamma_j^{v_{fj}} \quad (6)$$

ここで、添字 f は気体を表し、 P_f は気体 f の分圧(Pa)、 Γ は気体のフガシティー係数である。

3. 均質化法によるマクロ物性評価

ここで、均質化法を用いて前章で示した支配方程式に用いたマクロ物性、すなわち、均質化浸透係数と均質化拡散係数を求める方法を述べる。

3.1 均質化浸透係数

マクロスケールにおける流速の支配方程式は式 (2) である。多孔質体ミクロ領域での流れは、慣性項に比べて粘性項および圧力項の影響が卓越するので、Navier-Stokes 方程式における慣性項を無視した、Stokes 方程式および連続式が支配方程式となる (y はミクロスケール座標)。

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} = \mathbf{0} \quad (7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (8)$$

ここで、 p はミクロ圧力 (Pa)、 $\mathbf{v}(y)$ はミクロ流速 (m/s)、 $\mathbf{f}(x)$ は物体力 (Pa/m)、 μ は粘性係数 (Pa·s) である。

対象とするミクロ構造に対して単位圧力勾配を与えてこれらの式を解き、境界面で得られる流速の面積平均が流速の支配方程式 (2) のマクロ固有透水係数 k となる。

3.2 均質化拡散係数

マクロスケールにおける拡散問題の支配方程式は式 (3) である。ミクロスケールの拡散問題の支配方程式は次式のフィックの法則で与えられる。

$$\partial_y^T d \partial_y c = 0 \quad (9)$$

ここで、ミクロ濃度 $c(y)$ (mol/m³)、ミクロ拡散係数 d (m²/s)、 $\partial_y = [\partial/\partial y_1 \partial/\partial y_2]^T$ である。

ミクロ構造に単位濃度勾配を与えてこの式を解き、境界面で得られる流束の面積平均が拡散問題の支配方程式 (3) のマクロ拡散係数 τD^1 となる。

4. 数値解析例

4.1 ミクロスケール解析による均質化係数の算出

ここで 3 節で扱った内容を用いて岩盤ミクロ構造を想定した数値材料試験を行い、マクロスケールの支配方程式の物性評価を例示する。流体の通り道がある不連続性岩盤を想定し、対応する理想的なミクロ構造を図-1 に示す。3 節で述べた方法に従って数値材料試験を行った結果、固有透水係数は $k = 3.489 \times 10^{-10}$ (m²) となり、拡散係数は $\tau D^1 = 0.1273 S^{17/3} D^1$ (m²/s) となった。これらを用いて次節のマクロスケール解析を行う。

4.2 マクロスケール解析

解析領域を図-2 に示す。くり貫いた正方形の辺から気体の二酸化炭素のフラックスを与えることで、二酸化炭素の圧入を表現する。

圧入開始時から 10000 秒後、50000 秒後における二酸化炭素の気相の質量分率 X_g^g の分布を図-3 に示す。また、図-2 に示す測定点での水に溶解した二酸化炭素 CO₂(aq) の濃度を図-4 に示す。図-3 より、圧入位置から二酸化炭素が広がっていく様子が、図-4 より二酸化炭素が広がった範囲の測定点での二酸化炭素の溶解が確認できる。

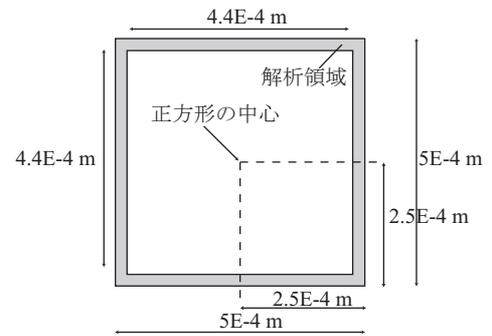


図-1 ミクロ構造

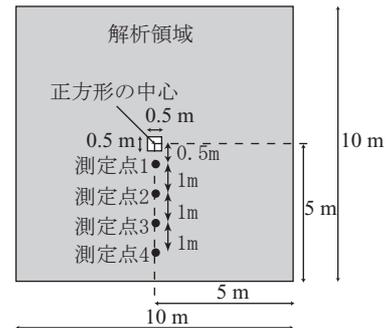


図-2 マクロ解析領域

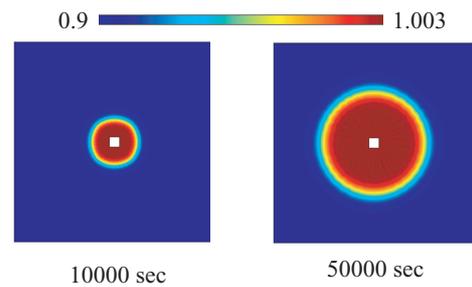


図-3 二酸化炭素の気相の質量分率 X_g^g

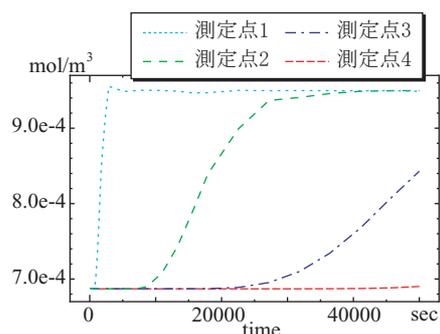


図-4 水に溶解した二酸化炭素 CO₂(aq) の濃度

5. 結論

本研究では、多孔質体に二酸化炭素を圧入した際の流体移動、化学種輸送、化学反応の挙動を表現しうるマルチスケール解析手法を提案した。