

卒 業 論 文

浸透圧を考慮した塩輸送を含む 二相流の数値シミュレーション

平成 30 年度

指導教員 合田 隆

(03-170985)

小林 俊介

東京大学
工学部システム創成学科
知能社会システムコース

提出日：平成 30 年 1 月 30 日

要旨

地下流体の挙動を把握することは、地下資源を有効に利用する上で重要である。地下流体の挙動を把握するうえで評価されている地盤のパラメータの一種に、地盤の半透膜としての性能がある。泥質岩には不完全な半透膜性があることは 1960 年代から論じられており、その性能として、実際に測定される浸透圧と理想的な浸透圧の比である反射係数がある。実際の岩石試料から、反射係数を測定する実験手法は開発されている。一方で、二相流と塩輸送を考慮するモデルで、反射係数をモデリングに加味することは実施されてきていなかった。

そこで、本研究では、二相流と塩輸送のモデルに対し、反射係数を加えたモデルを構築し、それを元にシミュレータを開発した。具体的には、水の質量フラックスを考慮する際に反射係数を乗じた浸透圧の影響を加えた。それらを、風上差分法、陰解法による有限差分法で離散化し、ニュートン法を用いて非線形計算を解いた。微分近似には複素数階微分法を利用し、多元一次方程式の行列計算にはブロック LU 分解を用いた。さらに、開発したシミュレータに対して、重力影響下による塩の拡散、および等方的な地質に井戸から二酸化炭素を圧入するモデルに反射係数と有効拡散係数を変えてシミュレーションを行うことで、反射係数がどのように地下流体流動に影響を与えるか検討した。

結果として、反射係数の高さに応じた、重力あるいは圧入により生じる圧力勾配による流動を妨げる方向に浸透圧が加わっている可能性が示唆された。また、有効拡散係数が小さい媒質ではより反射係数の影響を大きく受けることが示された。以上のことから、本研究では数値シミュレーションによる流体挙動予測において浸透圧を考慮する必要性を明らかにした。

今後の課題として、溶解や沈殿などを考慮した相平衡を反映したモデルの作成や多次元への拡張、実フィールドへの適用があげられる。今回開発したシミュレータは、地下流体資源開発、放射性廃棄処分、二酸化炭素地中貯留などの分野において、塩を含む帯水層を対象にした解析時に役立つことが期待される。

目次

要旨	i
1 序論	1
1.1 地下流体の解析に対し浸透圧を考慮する需要と課題	1
1.2 本研究の目的	3
1.3 論文の構成	3
2 塩輸送と二相流シミュレーションの定式化	5
2.1 浸透圧を考慮しない場合のモデル	5
2.2 浸透圧を考慮する際のモデルの変化	9
3 塩輸送および二相流シミュレータの開発	11
3.1 開発の概要	11
3.2 Newton-Rapson 法	11
3.3 LU 分解	12
3.4 複素数階微分法	13
3.5 開発した数値シミュレーションへの適用	14
4 開発したシミュレータの検証	16
4.1 検証の方針と概要	16
4.2 Liakopoulos の実験	16
4.3 ECO2N の例題の検証	18
5 反射係数・有効拡散係数を変えてのシミュレーション	24
5.1 重力影響下での鉛直方向のシミュレーション	24
5.2 二酸化炭素圧入条件下での水平方向のシミュレーション	30
6 結論	35
参考文献	39
謝辞	40
付録	41

1 序論

1.1 地下流体の解析に対し浸透圧を考慮する需要と課題

地下流体の挙動を把握することは、石油や天然ガス、地下水などの地下資源の開発に加え、放射性廃棄物の処理や、二酸化炭素地中貯留 (CCS) など地下空間を有効に利用する上で必要不可欠である。

CCS は二酸化炭素を地下深部に隔離する技術であり、日本では 2003 年より新潟県長岡市で実証試験が行われている [薛自求, 松岡俊文, 2008]。日本での CCS の選定条件としては、①シール性が高く、連続性のあるキャップロックが存在すること、②貯留層の深度が 800m~1200m 程度、③貯留層の有効層厚が 10m 以上、かつ連続性があること、④地層傾斜が緩やかであること、⑤圧入サイト周辺 1.5km² の範囲内には断層等が存在しないことである [棚瀬大爾, 薛自求, 嘉納康二, 2008]。石油の粘性を下げて増進回収を図る手法である CO₂-EOR(Enhanced Oil Recovery) が CCS の技術の基礎となっており [薛自求, 松岡俊文, 2008], CO₂ 圧入から地層モニタリングまで多くの関連技術が CCS に適用可能である。

地下流体の挙動を把握するにはいくつかの手法がある。貯留層に二酸化炭素を圧入すると、地層水が二酸化炭素と置換される。それによる地層密度や孔隙流体の性質の変化を用いて地層の弾性波速度を測定する音波検層、比抵抗が高くなることを用いた比抵抗検層 (インダクション検層) などに加え、孔隙率を推定する中性子検層、地層の同定や層序対比を行うガンマ線検層が長岡プロジェクトでは行われていた [薛自求, 渡辺二郎, 2008]。また、上記の物理検層よりも精度は落ちてしまうが、二酸化炭素圧入による弾性波速度の変化を坑井間断面で面的に捉えることができる坑井間弾性波トモグラフィという技術が存在する [薛自求, 渡辺二郎, 2008]。この技術は、震源と受信機をもつ 2 本の坑井を用いて、透過波の走時から直接的に坑井間の速度構造を求めることができるものである [石井吉徳, 大西正純, 青木豊, 村岡洋文, 1995]。また、同様に実フィールドでデータを収集する手法として、気圧変動に対する間隙水圧の応答を利用することにより岩盤の透水係数を評価する手法 [細谷真一, 徳永朋祥, 2008] も挙げられる。地層資料の採取、分析を行ったり、温度、圧力計測を行う方法も存在する。たとえば、室内透水試験により採取した資料の透水特性を求めることができる [高橋学, 張銘, 江崎哲郎, 坂井健太郎, 1998]。また、岩石の間隙水を介して元素を拡散させ拡散係数を求める拡散実験なども提唱されている [喜多治之, 岩井

孝幸, 中嶋悟, 1989].

こうした実証実験は、厳密な検証を行うことができるが、数百年レベルの長期の影響を確認することは現実的に可能ではない。そのため、長期間後の変動に興味がある場合は、先述したようなモニタリングを行い得られる岩石物性や圧力変化、二酸化炭素の到達時期などのデータを元に、適切なモデルを作成し、それを用いた数値シミュレーションにより、長期的な変動を予測することが必要である。たとえば、長岡プロジェクトでは、二酸化炭素長期挙動予測のためのシミュレータ GEM-CHG により、観測されたデータとのヒストリーマッチングにより得られたモデルを用いて 1000 年後までの数値シミュレーションを行い、二酸化炭素は試験地点の近傍に長期間貯留されとの予測を得ている [棚瀬大爾, 薛自求, 嘉納康二, 2008][大熊宏, 2008]。また、多様な成分や相をモデリングし数値計算を行うことのできるシミュレータ TOUGH2[Pruess, Oldenburg, Moridis, 1999] が開発されている。近年平塚らにより、二酸化炭素地中貯留時の圧力上昇に伴う圧入レートの低下を回避するため、圧入に先立ち揚水を行い、予め貯留層圧を低下させてから圧入を開始するデュアルモード手法と、圧入と並行して別の坑井で揚水する圧力緩和井の手法のどちらが有効であるか比較するシミュレーションが TOUGH2 を利用して行われている [平塚裕介, 山本肇, 中島崇裕, 薛自求 et al., 2017]。

また数値シミュレーションには複雑な問題であり、普遍性の高い構成則が存在していない状況下で、提案された構成則の検証のため室内実験と合わせ行うという利用法もある [江頭進治, 伊藤隆郭, 2004]。

このように、地下流体の挙動をモニタリングしそのデータを活かしてモデリングすることが、地下資源の利用の意思決定を行う上では有用である。モニタリングすることのできる岩盤物性の一種であり、本研究で着目したものに、半透膜としての性能がある。

泥質岩は不完全な半透膜性を発揮することは 1960 年代から論じられてきた [Kemper, 1961]。半透膜性がある場合、地下水は溶存物質の濃度勾配による力を受け移動する。徳永らは、室内実験を行い、泥質岩層の上下で塩濃度が異なっているような場では、泥質岩が不完全な半透膜として挙動し、結果として泥質岩層の上下の地層において間隙水圧勾配が静水圧的にならないという状態が発生する場合が存在しうることを示唆している [徳永朋祥, 三好悟, 2011]。このような不完全な半透膜の性能の指標として、反射係数 σ があり、以下の式で表される [Marine, Fritz, 1981]。

$$\sigma = \frac{\Delta p}{\Delta \pi} \quad (1.1)$$

ここで、 $\Delta\pi$ は半透膜を介した濃度の異なる溶液間の浸透圧の理論値であり、 Δp は半透膜を介した溶液間で実際に生じる圧力差である。 $\sigma = 1$ の場合、完全な半透膜として機能しており、 $\sigma = 0$ の場合は半透膜としての機能を有していないことに対応する。

また、粘土質岩の透水係数と比貯留率、実行拡散係数、反射係数などのパラメータを同一の岩石試料から測定する室内実験手法が考案されており、その実験結果を用いた検討からは、実験と同様な岩石物性をもつ地層中では浸透圧による間隙水圧の増加が長時間にわたって継続する可能性が示されている [竹田幹郎, 間中光雄, 平塚剛, 三好悟, 徳永朋祥, 伊藤一誠, 2013]。

このように地下層の不完全な半透膜性を考慮することの重要性は存在しているが、二相流と塩輸送のシミュレータにおいて、浸透圧が考慮されてきたものは少ない。これは、浸透圧の影響は他の地質現象と比較して小さいためであると考えられる [Osborne, Swarbrick, 1997]。しかし、先ほどのように、放射性廃棄物の処理など長期にわたる現象を解析する場合、浸透圧の影響は無視できない可能性があり、考慮するモデルに加味する必要があると思われる。

1.2 本研究の目的

以上のように、地下流体に対し、数値シミュレーションによる解析を行い長期間の影響を考慮する重要性は高く、様々な研究が行われているが、二相流と塩輸送がある系での数値解析を行う際、浸透圧に対する考慮が不十分であると考えられる。そこで、本研究では、二相流・塩輸送連成モデリングに対し、浸透圧を考慮する研究を行う。具体的には、熱力学的考察に基づき、浸透圧の影響を含めた間隙流体の流動の定式化と、その結果を用いたシミュレータの開発を行う。また、開発したシミュレータを用いて、反射係数や有効拡散係数により実際に浸透圧が与える影響がどの程度であるのかを見積もる。

1.3 論文の構成

本論文では、まず第2章で地下流体の挙動を表現するための、間隙流体の流動の定式化を行う。第3章では、第2章で行なった定式化を元に、シミュレータの開発を行うために必要な技法を示す。第4章では、開発したシミュレータの検証を行なった結果について述べる。第5章では、開発したシミュレータを元に、反射係数や有効拡散係数を変化させた場合のシミュレーションについて述べる。第6章では、各章で得られた知見の要約と今後の課題

について述べる.

2 塩輸送と二相流シミュレーションの定式化

2.1 浸透圧を考慮しない場合のモデル

本研究では, 水相中へのガスの溶解およびガス相への水蒸気, 塩の沈殿を無視した. すると, 支配方程式は以下ようになる.

水の質量保存:

$$\frac{\partial(\rho_w \phi_w)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_w = 0 \quad (2.1.1)$$

ガスの質量保存:

$$\frac{\partial(\rho_g \phi_g)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_g = 0 \quad (2.1.2)$$

塩の質量保存:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_C = 0 \quad (2.1.3)$$

ここで, ρ_w は水相の密度 [kg/m³], ϕ_w は水相が占める間隙率 [-], \mathbf{q}_w は水の質量フラックス [kg/(s · m³)], ρ_g はガス相の密度 [kg/m³], ϕ_g はガス層が占める間隙率 [-], \mathbf{q}_g はガスの質量フラックス [kg/(s · m³)], C は塩の質量濃度 [kg-塩/kg-溶液], \mathbf{q}_C は塩の質量フラックス [kg/(s · m³)] である.

ダルシーの法則により, 各相の質量フラックスは以下のように示される.

$$\mathbf{q}_w = -k \frac{\rho_w k_{rw}}{\mu_w} (\nabla p_w + \rho_w \mathbf{g}) \quad (2.1.4)$$

$$\mathbf{q}_g = -k \frac{\rho_g k_{rg}}{\mu_g} (\nabla p_g + \rho_g \mathbf{g}) \quad (2.1.5)$$

ここで, k は絶対浸透率 [-], k_{rw} は水の相対浸透率 [-], μ_w は水の粘性 [Pa · s], p_w は水の圧力 [Pa], \mathbf{g} は重力加速度ベクトル [m²/s], k_{rg} はガスの相対浸透率 [-], μ_g はガスの粘性 [Pa · s], p_g はガスの圧力 [Pa] である.

塩の質量フラックスは, 移流および拡散からなるものとする.

$$\mathbf{q}_C = C \mathbf{q}_w - \phi S_w D \nabla (\rho_w C) \quad (2.1.6)$$

ここで, ϕ は間隙率 [-], S_w は水の飽和率 [-], D は有効拡散係数 [m²/s] である.

van Genuchten モデル [Van Genuchten, 1980] による毛管圧曲線のモデル式は

$$S_{we} = [1 + \{\alpha(p_g - p_w)\}^n]^{-m} \quad (2.1.7)$$

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad (2.1.8)$$

である. ここで, S_{we} は水の有効飽和率 [-], α と n は材料パラメータである. 有効飽和率と飽和率の関係は,

$$S_w = S_{we}(1 - S_{wr}) + S_{wr} \quad (2.1.9)$$

であり, S_{wr} は残留水飽和率 [-] である. ガスの飽和率 S_g [-] とは,

$$S_g + S_w = 1 \quad (2.1.10)$$

の関係がある.

Fig.1 にパラメータ α, m を変えていくつか van Genuchten モデルをプロットした. 毛管圧 $p_c = p_g - p_w$ が上昇すると, 水の有効飽和率が減少していくことを示している.

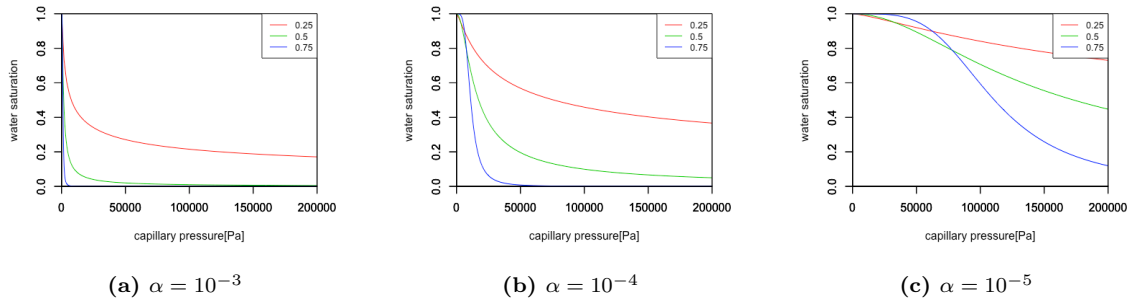


Fig.1: Plotting van Gencuhten model

Mualem モデル [Mualem, 1976] による水の相対浸透率は, 毛管圧 p_c の関数として,

$$k_{rw}(p_c) = \{1 + (\alpha p_c)^n\}^{-mL} \left[1 - \left(1 - [1 + (\alpha p_c)^n]^{-1} \right)^m \right]^2 \quad (2.1.11)$$

と表される. L は材料パラメータである.

Fig.2 にパラメータ m をいくつか変え, Mualem モデルをプロットした. 水飽和度が高いほど, 水の相対浸透率が高くなっている. また, このモデルは飽和率が残留飽和率で相対浸透率が 0 になり, 飽和率が 1 の時に相対浸透率が 1 になる関係がある. これは, 飽和率が残留飽和率の場合は孔隙内部の水はすべて岩石粒子に付着しており, 浸透は発生しないことに対応している.

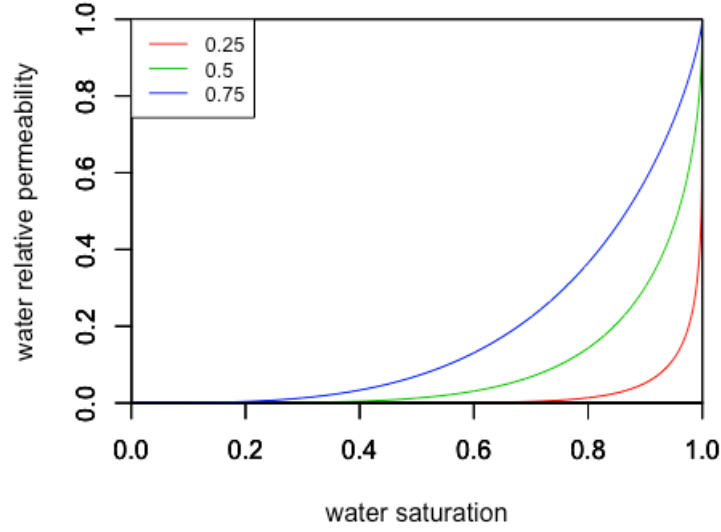


Fig.2: Plotting Mualem model

ガスの相対浸透率も同様に,

$$k_{rw}(S_g) = S_{ge}^L \left[1 - \left(1 - S_{ge}^{1/m} \right)^m \right]^2 \quad (2.1.12)$$

$$S_{ge} = \frac{S_g - S_{gr}}{1 - S_{gr}} \quad (2.1.13)$$

により表される. ただし, S_{gr} は残留ガス飽和率 [-] である. しかし, 本研究では 5.2 章で検証する問題にあわせ, Corey curve [Corey et al., 1954] を利用した. Corey curve を用いると, ガスの相対浸透率は次のように表される.

$$k_{rg} = (1 - \hat{S})^2 (1 - \hat{S}^2) \quad (2.1.14)$$

$$\hat{S} = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{gr}} \quad (2.1.15)$$

$S_{wr} = 0.3, S_{gr} = 0.05$ とした時の Corey Curve を Fig.3 に示した. 水の相対浸透率と異なり, 水の飽和率が高くなるとガスの相対浸透率は 0 に近づく. また, Corey Curve は水飽和率が残留水飽和率の時にガスの相対浸透率が 1 となり, 水飽和率が 1 から残留ガス飽和率を引いた値の時に浸透率が 0 となる. Corey Curve はガスの浸透が起きない時のみならず, 水は岩石粒子に付着した分しかなく, 水の浸透が起きない状況でも精度よく相対浸透率を求められる利点がある.

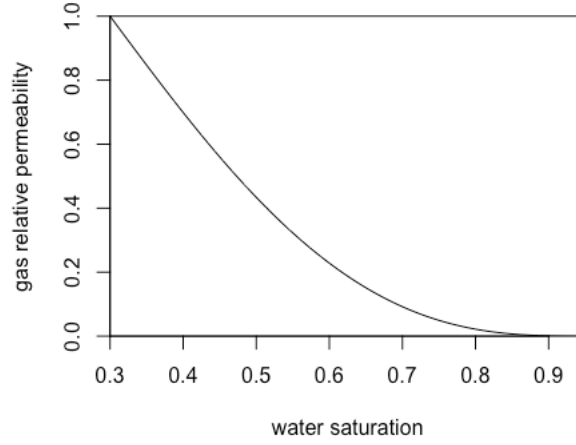


Fig.3: Plotting Corey Curve

また, 各相の占める間隙率の時間変化は, 鉱物粒子の変形を無視すると, 以下のように計算される.

$$\phi_w^{t+\Delta t} = \phi_w^t + \phi^t(S_w^{t+\Delta t} - S_w^t) + c_v \chi_w^{t+\Delta t} [(\chi_w^{t+\Delta t} p_w^{t+\Delta t} - \chi_w^t p_w^t) + (\chi_g^{t+\Delta t} p_g^{t+\Delta t} - \chi_g^t p_g^t)] \quad (2.1.16)$$

$$\phi_g^{t+\Delta t} = \phi_g^t + \phi^t(S_g^{t+\Delta t} - S_g^t) + c_v \chi_g^{t+\Delta t} [(\chi_w^{t+\Delta t} p_w^{t+\Delta t} - \chi_w^t p_w^t) + (\chi_g^{t+\Delta t} p_g^{t+\Delta t} - \chi_g^t p_g^t)] \quad (2.1.17)$$

ここに, c_v は地層の圧縮率 [Pa^{-1}], χ_w は Bishop の有効応力係数 [-], $\chi_g = 1 - \chi_w$ である. χ_w は毛管圧や水飽和率の関数として表されることが多いが, 標準的なモデル式は確立していない. 本論文では $\chi_w = S_{we}$ と仮定している.

そのほか, 水およびガスの密度の圧力依存性は考慮する必要がある. 水については, 標準状態の密度 ρ_{w0} および圧力 p_0 を用いて,

$$\rho_w = \rho_{w0} + \frac{p_w - p_0}{K_w} + \gamma C \quad (2.1.18)$$

と近似できる. ただし, K_w は水の体積弾性率で, $2.2 \times 10^9 [\text{Pa}]$ 程度である. γ は単位塩濃度あたりの密度増加率であり, NaCl 水溶液の場合, 0.8 程度である.

ガスについては, 密度の定義から以下のようなになる.

$$\rho_g = \frac{M_g}{v} \quad (2.1.19)$$

ここに, M_g はガスのモル質量 [kg/mol], v はガスの分子容 [m^3/mol] である. ガスの分子容は, 高圧時には理想気体として扱うと誤差が生じるため, van del Waals 型方程式の一つで

ある Redlich-Kwong 方程式 [Redlich, Kwong, 1949] を用いる. Redlich-Kwong 式は,

$$p_g = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{T^{0.5}V(V+b)} \quad (2.1.20)$$

で表される. R は気体定数 [J/(mol·K)], T は絶対温度 [K] である. a と b は気体の種類によって決まる定数である.

Spycher and Pruess [Spycher, Pruess, Ennis-King, 2002] によれば, 二相の混合状態では, ガス相中の水の質量分率を $y_{\text{H}_2\text{O}}$, ガスの質量分率を y_{CO_2} として

$$a = y_{\text{H}_2\text{O}}^2 a_{\text{H}_2\text{O}} + 2y_{\text{H}_2\text{O}} y_{\text{CO}_2} a_{\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2} + y_{\text{CO}_2}^2 a_{\text{CO}_2} \quad (2.1.21)$$

$$b = y_{\text{H}_2\text{O}} b_{\text{H}_2\text{O}} + y_{\text{CO}_2} b_{\text{CO}_2} \quad (2.1.22)$$

と表せる. ガス相中の水蒸気を無視しているため $y_{\text{H}_2\text{O}} = 0, y_{\text{CO}_2} = 1$ であり,

$$a = a_{\text{CO}_2} \quad (2.1.23)$$

$$b = b_{\text{CO}_2} \quad (2.1.24)$$

となる. ここで, a_{CO_2} と b_{CO_2} は Tb.1 に示したパラメータである.

Tb.1: Redlich-Kwong parameters [Spycher, Pruess, Ennis-King, 2002]

a_{CO_2}	$7.54 \times 10^7 - 4.02 \times 10^4 \times T$ [bar cm ⁶ K ^{0.5} mol ⁻²] (fitted T range: 280-380K)
b_{CO_2}	27.86 [cm ³ /mol]

また, (2.1.20) 式を変形すると, 以下のようになる.

$$v^3 - v^2 \left(\frac{RT}{p_g} \right) - v \left(\frac{RTb}{P} - \frac{a}{PT^{0.5}} + b^2 \right) - \left(\frac{ab}{PT^{0.5}} \right) = 0 \quad (2.1.25)$$

この 3 次方程式をカルダノの公式により解くと 1 つまたは 3 つの実数解が得られる. 3 つの時は, 最大のものが分子容に対応している. また, 粘度の圧力依存性は小さいため, 粘度は変化しないと仮定した.

2.2 浸透圧を考慮する際のモデルの変化

浸透圧を考慮する場合, 水相の質量フラックスに濃度差による浸透圧勾配の項が加わる. したがって, (2.1.4) ・ (2.1.6) 式は以下のように書き換えられる.

$$\mathbf{q}_w = -k \frac{\rho_w k_{rw}}{\mu_w} (\nabla p_w - \sigma \nabla p_O + \rho_w \mathbf{g}) \quad (2.2.1)$$

$$\mathbf{q}_C = C(1 - \sigma) \mathbf{q}_w - (1 - \sigma) \phi S_w D \nabla (\rho_w C) \quad (2.2.2)$$

ここで, σ は反射係数 [-], p_O は浸透圧 [Pa] である.

浸透圧は, ファントホッフの法則より,

$$p_O = \frac{\rho_w CRT}{M_c} \quad (2.2.3)$$

ここで, M_C は塩のモル質量 [kg/mol] である.

3 塩輸送および二相流シミュレータの開発

3.1 開発の概要

本章では,2章で示した定式化に基づき,数値計算シミュレータを開発する上でのアルゴリズムについて示す.

主変数に関して,Pruessにより開発された水と二酸化炭素,NaClの混合流体を計算できる数値計算ソフト TOUGH2 のモジュール ECO2N[Pruess, 2005]では,主変数としてガス相の圧力,塩の飽和度あるいは水相中の塩の質量分率,ガス相の飽和度あるいは水相のガスの質量分率を用いている.ECO2Nでは水相中へのガスの溶解やガス相への水蒸気,塩の沈殿を考慮し,相転移にあわせて適切に変数を切り替えている一方で,本研究ではこれらの現象を考慮していない.そこで,本研究では主変数として水とガスの圧力,および塩の質量濃度を選択した.これにより,従属変数としてガスの飽和度を求めることで,主変数を切り替えることなくガス相と水相,あるいはその混合状態を計算できる.

また,非線形計算には Newton-Rapson 法を用いた.座標系は1次元座標系で実装を行なった.微分方程式は有限差分法で離散化することとし,陰解法,1次風上法を使用した.離散化して得られる連立一次方程式は,LU分解を用いて解いた.偏微分においては,複素数階微分法を用いて偏微分係数を計算した.

3.2 Newton-Rapson 法

Newton-Rapson 法は非線形方程式の数値解法の1つである.関数 $f(\mathbf{x})$ に関して,未知な \mathbf{x}_t に対して $f(\mathbf{x}_t) = 0$ とする. \mathbf{x}_t の近傍にある初期値 $\mathbf{x}_0 (f(\mathbf{x}_0) \neq 0)$ から \mathbf{x}_t を求めるのが Newton-Rapson 法のアルゴリズムである.一般的な Newton-Rapson 法のアルゴリズムを以下に示す.

$f(x)$ の \mathbf{x}_0 における Taylor 展開に $\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_0$ を代入すると

$$f(\mathbf{x}_t) = f(\mathbf{x}_0) + f'(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_0) + o((\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_0)^2) = 0 \quad (3.2.1)$$

となる.ここで, $o((\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_0)^2)$ を無視した場合の解を \mathbf{x}_1 とする.すなわち

$$f(\mathbf{x}_0) + f'(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = 0 \quad (3.2.2)$$

である.これを变形して差分 $\Delta \mathbf{x}_1$ は,

$$\Delta \mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0 = -\frac{f(\mathbf{x}_0)}{f'(\mathbf{x}_0)} \quad (3.2.3)$$

となる.同様に

$$\Delta \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n = -\frac{f(\mathbf{x}_n)}{f'(\mathbf{x}_n)} \quad (3.2.4)$$

となる.これを, 十分小さい ϵ に対し

$$\Delta \mathbf{x}_n < \epsilon \quad (3.2.5)$$

となるまで繰り返す.シミュレーション上では, 無限ループに陥るのを防ぐため, 規定回数繰り返しても収束しなかった場合は最後の近似解を採用することとする.また, Δ_x が極端に大きい場合, 収束域から外れてしまうため, ダンピングを行なった.ダンピング係数を λ とする.このとき差分 $\Delta \mathbf{x}_{n+1}$ を

$$\Delta \mathbf{x}_{n+1} = -\lambda \frac{f(\mathbf{x}_n)}{f'(\mathbf{x}_n)} \quad (3.2.6)$$

とし更新を行い, $f(\mathbf{x}_{n+1})$ を最小にする λ を採用して更新を行なった.

3.3 LU 分解

LU 分解は正方行列 \mathbf{A} に対して下三角行列 \mathbf{L} と上三角行列 \mathbf{U} を用いて

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \times \mathbf{U} \quad (3.3.1)$$

のように分解することである. これにより, 連立方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ は,

$$\mathbf{LUx} = \mathbf{b} \quad (3.3.2)$$

と表される. この方程式は,

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y} \quad (3.3.3)$$

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b} \quad (3.3.4)$$

と分割すると, それぞれ順に代入していくことで計算可能であるため, 逆行列を計算する必要がないという利点がある. また, 計算量も $O(n^3)$ であり, 逆行列を求める場合と変わらない. 以下に, LU 分解の流れについて述べる. いくつかの手法があるが, ここでは, 内積形式ガウス法について述べる. この手法は, LU 分解がなされたという仮定のもと, 下三角行列の対角成分を 1 として導出する方法であり, LU 分解の結果を 1 つの正方行列に詰め込めるという利点があるため, メモリを節約でき, 数値計算に適している.

n 次正方行列 $(\mathbf{A})_{ij} = a_{ij}$ を考える. LU 分解の結果を $(\mathbf{L})_{ij} = l_{ij}, (\mathbf{U})_{ij} = u_{ij}$ とする. LU 分解は以下のように \mathbf{L} と \mathbf{U} の積と \mathbf{A} を 1 列目から順に比較することによって行われる.

まず, $a_{11} = u_{11}$ により, u_{11} が定まる. これを用いて, $l_{i1}u_{11} = a_{i1}$ より, l_{i1} が求められる. 次に $a_{12} = u_{12}$ により, u_{12} が定まり, $a_{22} = u_{12}l_{21} + u_{22}$ より u_{22} が定まる. 下三角行列も先ほどと同様に求められる. このような流れを n 列目まで行うことにより LU 分解が行える.

この導出作業を一般化すると, 次のようになる.

k 列目の要素に関して,

1. $u_{1k} = a_{1k}$
2. $u_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}u_{jk} \ (i = 2, 3, \dots, k)$
3. $l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij}u_{jk})/u_{kk} \ (i = k+1, k+2, \dots, n)$

また, ブロック LU 分解 [Zhuo, Prasanna, 2006] は行列をブロックに分解して LU 分解を行う手法であり, 各ブロックに対し, 演算を並列に実行することで LU 分解の高速化を行うことができる. 以下にブロック LU 分解の流れを示す.

1. \mathbf{A} を 4 つに分割する ($\mathbf{A}_{11}, \mathbf{A}_{21}, \mathbf{A}_{12}, \mathbf{A}_{22}$)
2. \mathbf{A}_{11} を LU 分解する ($\mathbf{L}_{11}, \mathbf{U}_{11}$)
3. $\mathbf{U}_{12} = \mathbf{L}_{11}^{-1} \times \mathbf{A}_{12}$
4. $\mathbf{L}_{21} = \mathbf{A}_{21} \times \mathbf{U}_{11}^{-1}$
5. $\mathbf{A}'_{22} = \mathbf{A}_{22} - (\mathbf{L}_{21} \times \mathbf{U}_{12})$
6. \mathbf{A}'_{22} を新たな \mathbf{A} とし, 分割できない場合は \mathbf{A}'_{22} を LU 分解して終了

数値解析を行うときに解くべき方程式は, 主変数の数と同じ次元の正方行列によるブロック疎行列となることが多いため, この手法を適用することで, 高速化することが期待される.

3.4 複素数階微分法

数値計算シミュレータにおいて, 微分の計算・近似にはいくつかの手法がある. 第 1 に手計算で微分を行う方法がある. この方法は数値的に安定であるという長点があるが, 解析解を求めるのが面倒であること, 方程式を改良した場合計算しなおしになるという欠点がある.

また, 関数 f と変数 T に対し

$$\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{f(T + \Delta T) - f(T)}{\Delta T} + o(\Delta T) \quad (3.4.1)$$

と近似する前方差分法近似があるが, この手法は適切な ΔT の選択が難しいという欠点がある. 打ち切り誤差は $o(\Delta T)$ を無視することにより生じるが, T を過度に小さくすると, $f(T + \Delta T)$ と $f(T)$ の差が微小になるため桁落ちが発生してしまう. このため, 解析の条

件を変更するたびに、適切な ΔT の見積もりを行わなければならない。

そこで、虚数単位を用いた複素数階微分近似法 (CSDA)[田中真人, 藤川正毅, 儀間麻衣, 2012] を用いる。CSDA 法は虚数単位 $\sqrt{-1}$ である i を用いて Taylor 展開の変動量 h に ih を代入した式をもとにして導かれる。

$$f(T + ih) = f(T) + ihf'(T) - \frac{h^2}{2!}f''(T) - i\frac{h^3}{3!}f'''(T) + \dots \quad (3.4.2)$$

いま, (3.4.2) の虚部を取りだし, h で除すると, 以下のように数値近似が求められる。

$$f'(T) = \frac{\mathcal{L}[f(T + ih)]}{h} + o(h^2) \quad (3.4.3)$$

ここで, \mathcal{L} は虚部を取り出す演算子である。(3.4.3) 式より CSDA 法の近似精度は $o(h^2)$ のオーダーであり, また差分を取らないため桁落ちの心配がないという利点がある。計算量が増えるという欠点はあるが, 数値計算での安定性と汎用性の高さから, CSDA 法を採用した。

3.5 開発した数値シミュレーションへの適用

計算領域を n 分割したとする。このとき, (2.1.1)~(2.1.3) にニュートン法を適応できる形に変形すると, 以下ようになる。

$$\begin{pmatrix} \Delta p_1 \\ \vdots \\ \Delta p_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}'_{11} & \mathbf{r}'_{12} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \mathbf{O} \\ \mathbf{r}'_{21} & \mathbf{r}'_{22} & \mathbf{r}'_{23} & \cdots & \cdots & \cdots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & \cdots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \cdots & \mathbf{r}'_{ii-1} & \mathbf{r}'_{ii} & \mathbf{r}'_{ii+1} & \cdots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \cdots & \cdots & \ddots & \ddots & \ddots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \cdots & \cdots & \cdots & \mathbf{r}'_{n-1n-2} & \mathbf{r}'_{n-1n-1} & \mathbf{r}'_{n-1n} \\ \mathbf{O} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \mathbf{r}'_{nn-1} & \mathbf{r}'_{nn} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} -\mathbf{r}_1 \\ \vdots \\ -\mathbf{r}_n \end{pmatrix} \quad (3.5.1)$$

ここで, $\mathbf{r}_i = \begin{pmatrix} r_{wi} = \frac{\partial(\rho_{wi}\phi_{wi})}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_{wi} \\ r_{gi} = \frac{\partial(\rho_{gi}\phi_{gi})}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_{gi} \\ r_{Ci} = \frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q}_{Ci} \end{pmatrix}$, $\Delta \mathbf{p}_i = \begin{pmatrix} p_{wi} \\ p_{gi} \\ C_i \end{pmatrix}$, $\mathbf{r}'_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\partial r_{wi}}{\partial p_{wi}} & \frac{\partial r_{wi}}{\partial p_{gi}} & \frac{\partial r_{wi}}{\partial C_i} \\ \frac{\partial r_{gi}}{\partial p_{wi}} & \frac{\partial r_{gi}}{\partial p_{gi}} & \frac{\partial r_{gi}}{\partial C_i} \\ \frac{\partial r_{Ci}}{\partial p_{wi}} & \frac{\partial r_{Ci}}{\partial p_{gi}} & \frac{\partial r_{Ci}}{\partial C_i} \end{pmatrix}$ である。

\mathbf{r}'_{ij} の各要素に関しては, 多変数関数に関して (3.4.2) 式と同様に Taylor 展開を行うことで複素数階微分法を適用できる。主変数ベクトル \mathbf{v} の関数 r_{wi} に対して i 番目のメッシュの j 番目の主変数 v_{ij} を変化させる Taylor 展開を考えると

$$r_{wi}(\mathbf{v} + ihv_{ij}) = r_{wi}(\mathbf{v}) + ih \frac{\partial r_{wi}}{\partial v_{ij}}(\mathbf{v}) - \dots \quad (3.5.2)$$

となり, 虚部を取り出し, h で除することで 1 変数関数と同様に \mathbf{r}'_{ij} の各要素を得られる. h の値としては, 田中らにより, 10^{-8} 以降では計算機の用いる有効数字により近似精度が一定となることがわかっている [田中真人, 藤川正毅, 儀間麻衣, 2012]. 本研究では, 環境ごとにマシンイプシロンの違いがある可能性を考慮し, 余裕をもって $h = 10^{-10}$ を用いた.

あるメッシュに対しそれ自身と隣り合っているメッシュ以外の影響は受けないため, $(\mathbf{R}')_{ij} = \mathbf{r}'_{ij}$ はブロック帯幅 1 のブロック帯行列となる. これは疎行列の 1 種である.

しかし, その逆行列は疎行列にはなるとは限らないため, (3.5.1) 式を解く上で逆行列を求めることは使用するメモリ量の観点から望ましくない. そこで (3.5.1) 式の両辺に左から \mathbf{R}' をかけて以下のようにする.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}'_{11} & \mathbf{r}'_{12} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \mathbf{O} \\ \mathbf{r}'_{21} & \mathbf{r}'_{22} & \mathbf{r}'_{23} & \cdots & \cdots & \cdots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & \cdots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \cdots & \mathbf{r}'_{ii-1} & \mathbf{r}'_{ii} & \mathbf{r}'_{ii+1} & \cdots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \cdots & \cdots & \ddots & \ddots & \ddots & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \cdots & \cdots & \cdots & \mathbf{r}'_{n-1n-2} & \mathbf{r}'_{n-1n-1} & \mathbf{r}'_{n-1n} \\ \mathbf{O} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \mathbf{r}'_{nn-1} & \mathbf{r}'_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{p}_1 \\ \vdots \\ \Delta \mathbf{p}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathbf{r}_1 \\ \vdots \\ -\mathbf{r}_n \end{pmatrix} \quad (3.5.3)$$

すると, \mathbf{R}' に対して LU 分解をすることで逆行列を求めることなく連立一次方程式を解くことができる. また, \mathbf{R}' の零行列のブロックは LU 分解をしても 0 のままであるため, 零行列ではないブロックのみを格納しておけばよく, メモリ量を大きく削減することができる. (3.5.3) 式を解いて得られる $\Delta \mathbf{p}$ の絶対値の最大値が一定値以下になった場合, 収束したとみなした. この閾値は大きすぎると解の精度が悪くなり, 小さすぎると収束が遅くなるため, 本研究では試行錯誤的に 10^2 を用いた.

また, 本研究ではブロックサイズに合わせて Fig.4 のように分割してブロック LU 分解を行なった. \mathbf{R}_{11} がちょうど \mathbf{r}_{11} と一致している.

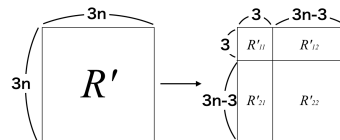


Fig.4: How to divide matrix

4 開発したシミュレータの検証

4.1 検証の方針と概要

ここでは、開発したシミュレータの妥当性を検証した。水とガスの二相状態での解析が妥当か検証するために Liakopoulos の実験 [C. Liakopoulos, 1965] と結果を比較した。浸透圧を考慮していない状況での解析が妥当か検証するために、ECO2N の例題 2 としてあげられている塩水帯水層への二酸化炭素の圧入 [Pruess, 2005] に関してガス圧、ガスの飽和度、水相中の塩濃度に関して比較を行った。

4.2 Liakopoulos の実験

Liakopoulos は空気と水の二相流動現象を明らかにすることを目的とした実験を行なった [C. Liakopoulos, 1965]。砂を詰めた 1m のカラムに通水し、その後給水を止め、カラム内のテンシオメーターで間隙水圧分布の時間変化を測定した。Fig.5 は愛知正温 [2010] によって作成された実験の概略図である。水とガスの連成現象が解析できることを検証するために、この実験の再現解析を行なった。初期条件はカラム全体にわたって水で飽和されており、間隙水圧が大気圧に等しいとした。境界条件としては、カラム側方への水および空気の流束は 0 とした。カラム上端は大気に解放されており、またカラム上端を水が通過することはないので、間隙気圧は大気圧に等しく、水の流束は 0 とした。カラム下端は水飽和率が 1 で間隙水圧が大気圧に等しいとした。大気圧は 101325Pa とした。

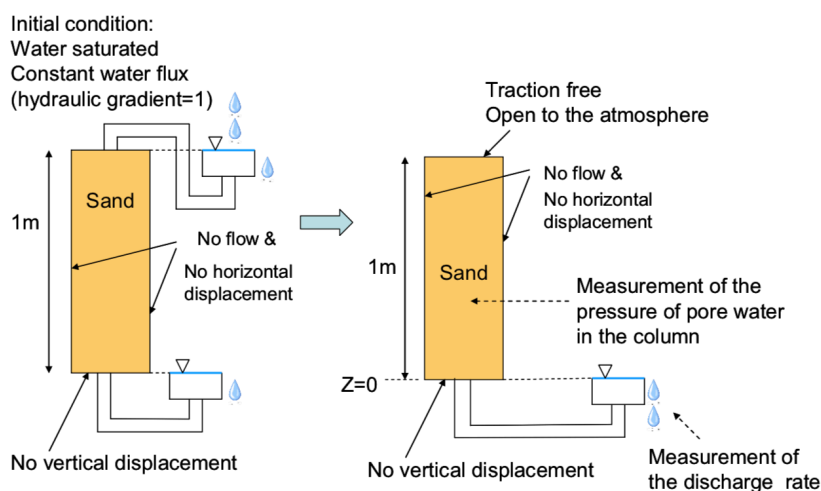


Fig.5: Schematic of Liakopoulos experiment(1965) [愛知正温, 2010]

また, 解析において用いたパラメータを Tb.2 に示す. ただし, 排水ヤング率 $E[\text{Pa}]$ とポアソン比 ν を用いて, 地層の圧縮率 $c_v[\text{Pa}^{-1}]$ は,

$$c_v = \frac{(1 - 2\nu)(1 + \nu)}{E(1 - \nu)} \quad (4.2.1)$$

と表され, 間隙比 e を用いて間隙率 ϕ は

$$\phi = \frac{e}{1 + e} \quad (4.2.2)$$

と表される.

Tb.2: Physical property values and parameters used for analysis of Liakopoulos experiment

物性	値	references
温度 (K)	300	
水の粘度 ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	1.0×10^{-3}	
ガスの粘度 ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	1.0×10^{-5}	
残留水飽和率	0	
残留ガス飽和率	0	
排水ヤング率 (MPa)	0.35	愛知正温 [2010]
排水ポアソン比	0.4	愛知正温 [2010]
絶対浸透率 (m^2)	4.4×10^{-13}	愛知正温 [2010]
初期の間隙比	0.2975	愛知正温 [2010]
van Genuchten モデルのパラメータ α	8.0×10^{-5}	
van Genuchten モデルのパラメータ m	0.839	
Mualem モデルのパラメータ L	0	

Fig.6 に実験とシミュレータによる解析結果を示した. プロットされている点は C. Liakopoulos [1965] の実験結果, 実線は開発したシミュレータによる結果を示している. 実験開始から 10 分後から 60 分後まではよい近似が取れているが, 5 分後と 120 分後では大きな乖離が見られた. また, 60 分後から 120 分後にかけては, ほとんど変化が見られなく, 定常状態に近づいている可能性が示唆された.

5 分後に関しては, 愛知正温 [2010] に報告されるように, 水飽和率が高い状況ではデータの取得が困難であるため, 相対浸透率曲線は近似関数の外挿により作られており精度が悪いことに起因すると思われる.

120 分以降に関しては, カラムの上端近くにおいて水飽和率が急激に低下する点が見られた. このことにより質量フラックスの値が大きく変化し, 定常状態をもたらすような計

算結果になったことが考えられる. この飽和率の変化は, 正確な要因は不明であるが, 使用したモデルや主変数に起因するものと推察される.

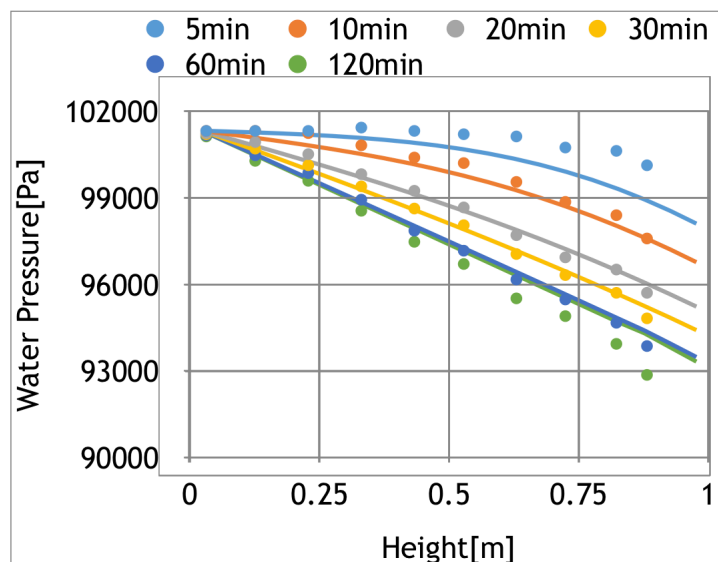


Fig.6: Simulated water pressure and Liakopoulos experiment result(1964)

4.3 ECO2N の例題の検証

圧力 120bar, 温度 45°C, 塩の質量濃度 15% の環境で, 厚さ 100m の均質で等方性のある帯水層を貫通している井戸がある. 解析領域は, 解析期間中に影響を与えない程度に十分広く設定する. 二酸化炭素は 100kg/s の一定速度で均一に圧入される.Fig.7 は Pruess によるこの例題の概略図である.

検証に用いた物性値およびパラメータを Tb.3 に示す.references がないものに関しては, 試行錯誤的にパラメータを変え求めた.

解析領域は ECO2N の例に倣い半径 100km までとした. 解析領域の分割は,ECO2N と同等に細かく分割し計算を行う資源を用意できなかったため, 分割数を減らした.0.3m の井戸,1km までの範囲を階差数列が等差数列になるように 41 分割,3km までの範囲を階差数列が等差数列になるように 20 分割,10km までの範囲を階差数列が等差数列になるように 20 分割,100km までの距離を階差数列が等差数列になるように 11 分割し, 計 93 のメッシュに分割した. また, 解析期間は 8.64×10^7 秒とした.

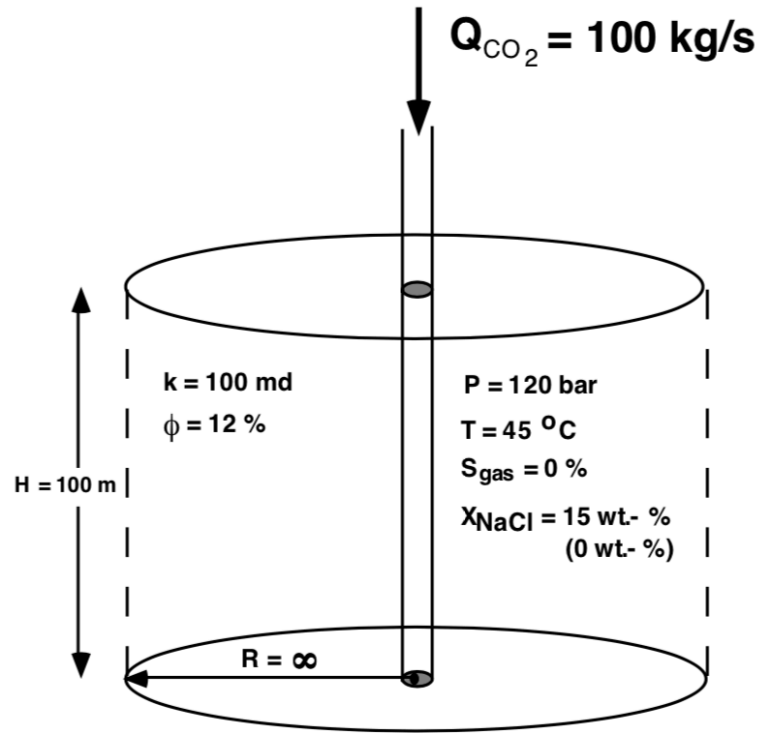


Fig.7: Schematic of ECO2N sample problem 2 [Pruess, 2005]

Tb.3: Physical property values and parameters used for analysis of ECO2N sample problem 2

物性	値	references
水の粘度 ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	6.0×10^{-4}	
ガスの粘度 ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	6.5×10^{-5}	
残留水飽和率	0.3	Pruess(2005)
残留ガス飽和率	0.05	Pruess(2005)
地層の圧縮率 (Pa^{-1})	4.5×10^{-10}	
絶対浸透率 (m^2)	1.0×10^{-13}	
有効拡散係数 (m^2/s)	2.0×10^{-2}	
初期の間隙率	0.12	Pruess(2005)
van Genuchten モデルのパラメータ α	5.0×10^{-3}	
van Genuchten モデルのパラメータ m	0.457	Pruess(2005)
Mualem モデルのパラメータ L	0.5	Mualem(1976), Pruess(2005)

ここで取り上げた半径流問題は,PVT 特性や二相流によるすべての非線形性を考慮に入れても, 解が半径 R と時間 t のみに依存し, $\xi = R^2/t$ に依存することが知られている [O'Sullivan, 1981]. そのため, 得られた数値計算の結果を ξ の関数としてプロットすることで, 解の精度を評価することができる.

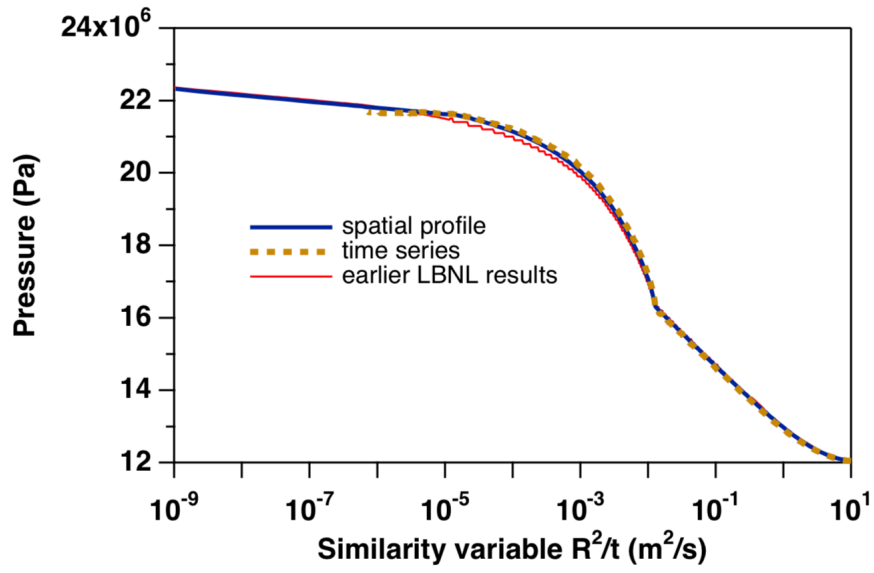
開発したシミュレータによる数値計算の結果と ECO2N による計算結果の比較を Fig.8 から Fig.10 に示した.ECO2N では水相へのガスの溶解, およびガス相中の水蒸気, 塩の沈殿を考慮しているため, 水相中のガスの質量分率やガス相中の水の質量分率, 沈殿塩の飽和率の結果も示されているが, 開発したシミュレータではこれらの現象を無視しているため, グラフを除外した.

ガス圧力に関しては, 開発したシミュレータは ECO2N の結果をおおむね再現できていると考えられる. $10^{-2} < \xi < 10^{-1}$ 程度では ECO2N の結果よりガス圧が高いが, これは溶解すべきガスが残っていることによると考えられる. $1 < \xi < 10^1$ の間は乖離が激しいが, メッシュ分割やタイムステップが粗いことによる影響が無視できないのではないかと考えられる.

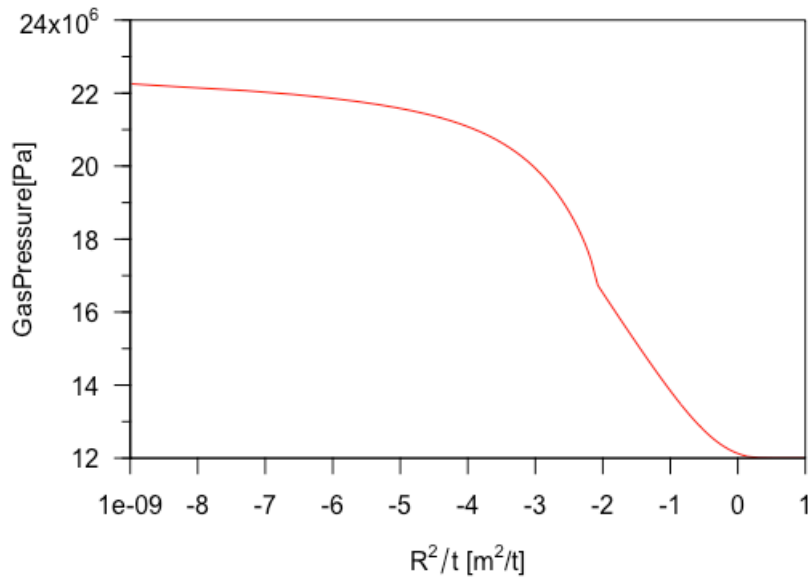
ガス飽和度に関しては, $\xi > 10^{-5}$ 程度まではよく ECO2N の結果を再現している. $\xi > 10^{-2}$ での値がわずかに乖離しているのは, 数値計算が Newton-Rapson 法の収束範囲を逸脱しないよう, 初期値においてガス圧をわずかに高くしたことによるものである. $\xi < 10^{-5}$ では, 飽和度のジャンプが発生せず, 乖離が大きくなっている. この領域は, Pruess によりガスと水の二相状態からガス単相への相転移に相当することが述べられている. ガス圧が増加した結果, ガス中の水蒸気が増加するため単相になることが想定されるが, その影響を考慮していないためこの領域では結果が再現できなくなったものだと考えられる.

塩の質量分率に関しても, $\xi > 10^{-5}$ まではよい再現が得られている. 先に述べたように, $\xi < 10^{-5}$ 程度では, 気相への水の溶解により二相状態からガス単相への相転移が起こる結果として直前に塩濃度が極度に高まり, その後塩の質量分率は 0 となることが想定されるが, 溶解を考慮していないためこれも同様にうまく再現されない.

全体として, 井戸近傍に関する興味があることと, 考慮した現象の違いによる結果の差などを踏まえ, $10^{-5} < \xi < 10^{-2}$ の計算結果を重視すべきであり, そこではよい再現が行われていると考えられる.

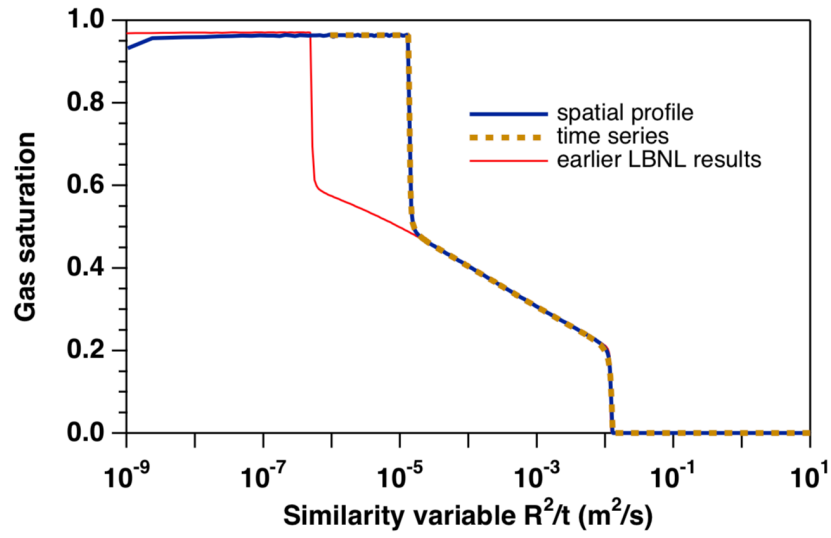


(a) ECO2N [Pruess, 2005]

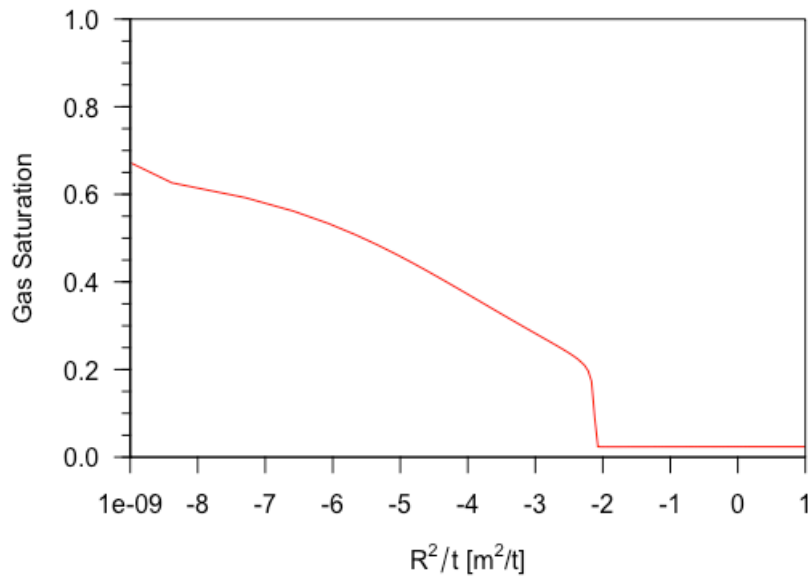


(b) Developed simulator

Fig.8: Simulated pressures as a function of the similarity variable.

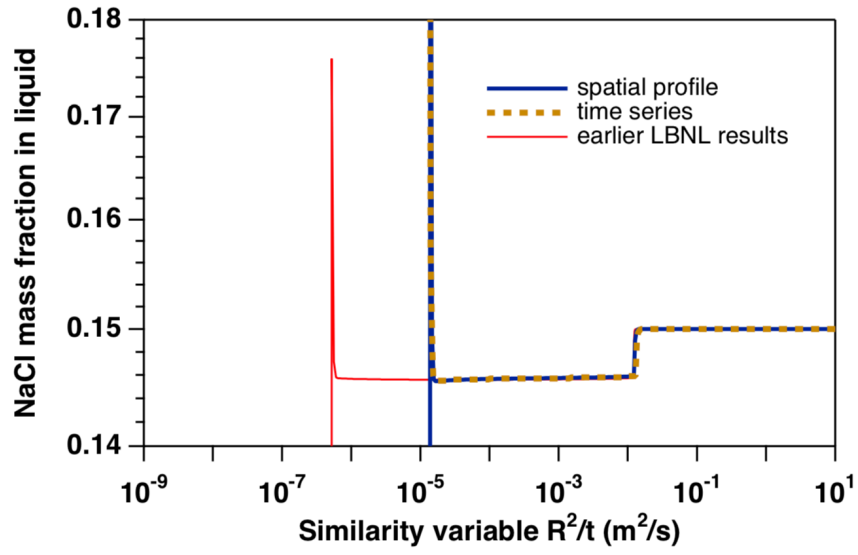


(a) ECO2N [Pruess, 2005]

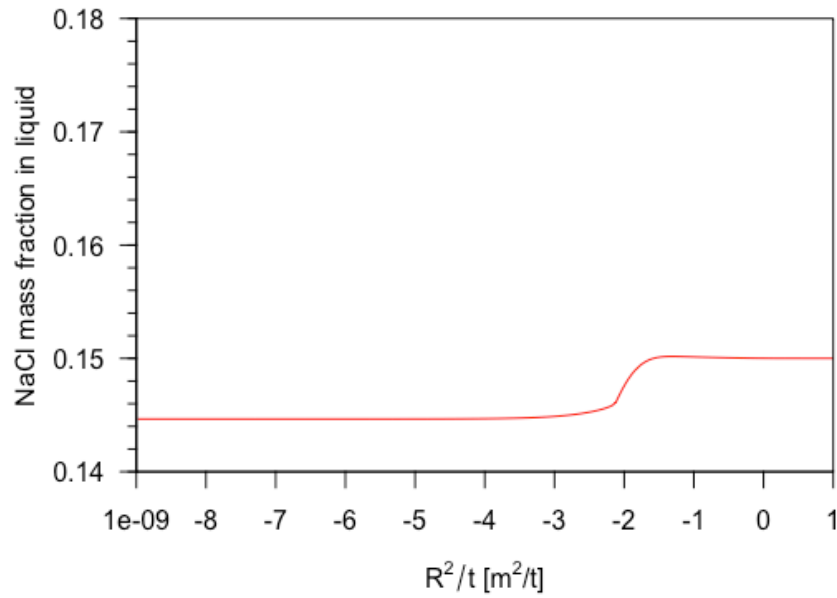


(b) Developed simulator

Fig.9: Simulated gas saturations.



(a) ECO2N [Pruess, 2005]



(b) Developed simulator

Fig.10: Simulated NaCl mass fraction in aqueous phase.

5 反射係数・有効拡散係数を変えてのシミュレーション

ここでは, 第4章で検証したシミュレータを用いて, 反射係数や有効拡散係数を変えてのシミュレーションを行う.

5.1 重力影響下での鉛直方向のシミュレーション

ここでは, 重力方向にメッシュを分割したシミュレーションを行う. 温度 27°C , 厚さ 100m のカラムの上端が解析開始時点では水で飽和しており, 塩の質量濃度 15% であるという状況を考える. カラムの上端は大気に解放されており, 水と塩の流れはないものとする. カラムの下端は水飽和率が 1 で間隙水圧が大気圧と等しいとした. 大気圧は 101325Pa とした. Fig.11 は問題の概略図である.

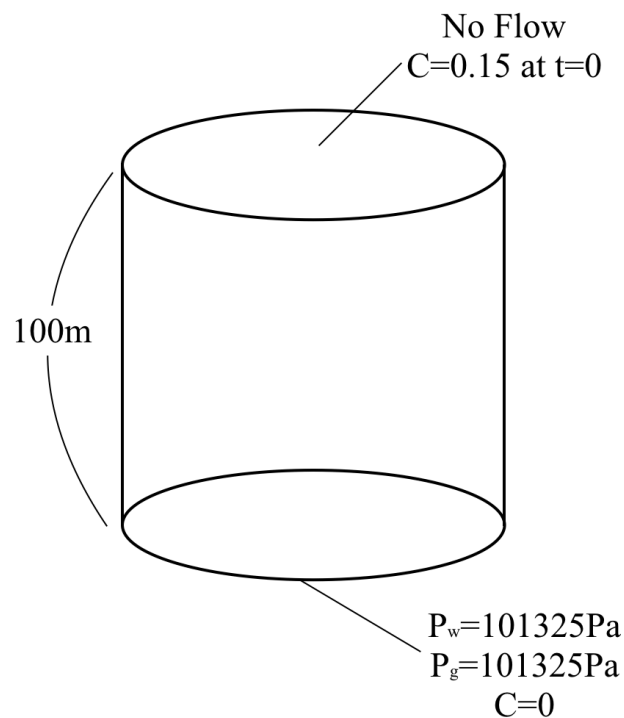


Fig.11: Schematic of simulation

シミュレーションを開始すると, 塩がカラム下部へ向けて流れる. 反射係数および拡散係数を変えたシミュレーションを行い, 塩の流動の変化を確認する. 解析期間は 7200 秒とし, タイムステップは 1 秒ごととした. 解析に用いた物性値およびパラメータを Tb.4 に示す.

Tb.4: Physical property values and parameters used for analysis of ECO2N sample problem 2

物性	値
水の粘度 (Pa · s)	1.0×10^{-3}
ガスの粘度 (Pa · s)	1.0×10^{-5}
残留水飽和率	0
残留ガス飽和率	0
地層の圧縮率 (Pa ⁻¹)	1.333×10^{-6}
絶対浸透率 (m ²)	4.4×10^{-13}
初期の間隙率	0.2293
van Genuchten モデルのパラメータ α	8.0×10^{-5}
van Genuchten モデルのパラメータ m	0.8387
Mualem モデルのパラメータ L	0

また, 反射係数と有効拡散係数は, Tb.5 の組み合わせでシミュレーションを行なった.

Tb.5: Candidate for parameters

有効拡散係数 (m ² /s)	反射係数
1×10^{-3}	0
1×10^{-3}	1×10^{-2}
1×10^{-3}	2×10^{-2}
1×10^{-6}	0
1×10^{-6}	1×10^{-2}
1×10^{-6}	2×10^{-2}
1×10^{-9}	0
1×10^{-9}	1×10^{-2}
1×10^{-9}	2×10^{-2}

Fig.12 から Fig.20 にシミュレーションの結果を示している.

Fig.12 から Fig.14 は有効拡散係数を一定にして反射係数を変化させた際の塩の質量濃度を示している. 有効拡散係数が 1×10^{-3} の場合では, 反射係数を変化させても塩濃度の分布はあまり変化しなかった. このケースでは拡散が非常に優位に立っており, 他の現象の影響が微小になったためと考えられる. Fig.13 と Fig.14 では, 塩濃度分布に極大となる点があった. また, 反射係数を高くするほど, 極大値は大きく, 極大となる点はカラム上端へと移動した. これは, 重力による移流と反する向きに濃度差による浸透圧勾配がはたら

いたことを示唆している。また、有効拡散係数が小さいケースでは反射係数を変えた際の塩濃度分布の移動がより大きくなった。

Fig.15 から Fig.17 は有効拡散係数を一定にして反射係数を変化させた際の間隙水圧の分布を示している。有効拡散係数が 1×10^{-3} の場合では反射係数の変化の影響が見られなかった。それ以外の場合ではカラム上端では反射率を上げるにつれ間隙水圧が高くなった。これは、重力に反する向きに浸透圧の影響を受けたことを示している。間隙水圧は塩濃度が極大となる点近くで極小となり、その上部で極大をとるが、反射係数が大きいと、その変動が大きくなった。また、反射係数が大きい場合では、極大値へのカーブが緩やかになった。これらは、反射係数が0の場合にはわずかにしか見られないことから、濃度差による浸透圧勾配によって、より大きく形成されたことが示唆される。

Fig.18 から Fig.20 は有効拡散係数を一定にして反射係数を変化させた際の間隙ガス圧の分布を示している。やはり有効拡散係数が 1×10^{-3} の場合では反射係数の変化の影響が見られなかった。その他の場合、間隙水圧と同様な極小極大および、極大へのカーブの変化が見られた。また、カラム上端のすぐ下のメッシュでは反射率を上げるにつれ間隙ガス圧の減少が見られた。

全体として、拡散が非常に優位でない環境下では、浸透圧の影響を考慮することにより、重力による移流効果を抑える働きを与えることが確認された。また、有効拡散係数が小さい状況では、反射係数の影響がより顕著に現れやすいことが示唆された。

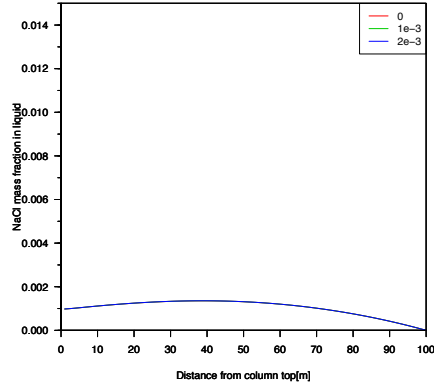


Fig.12: Simulated salt mass fraction where effective diffusion coefficient= 1×10^{-3}

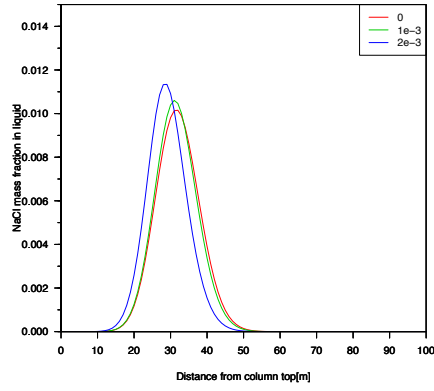


Fig.13: Simulated salt mass fraction where effective diffusion coefficient= 1×10^{-6}

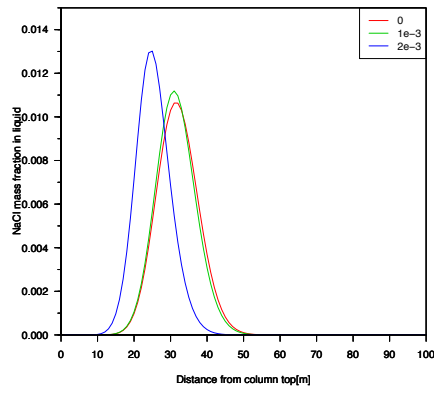


Fig.14: Simulated salt mass fraction where effective diffusion coefficient= 1×10^{-9}

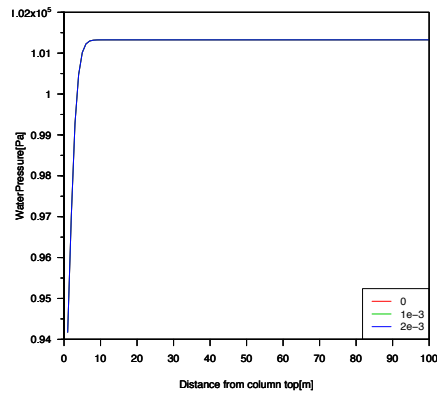


Fig.15: Simulated water pressure where effective diffusion coefficient= 1×10^{-3}

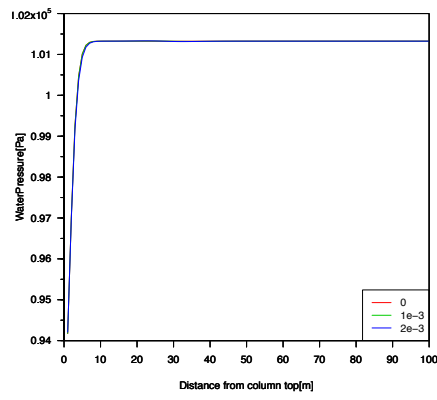


Fig.16: Simulated water pressure where effective diffusion coefficient= 1×10^{-6}

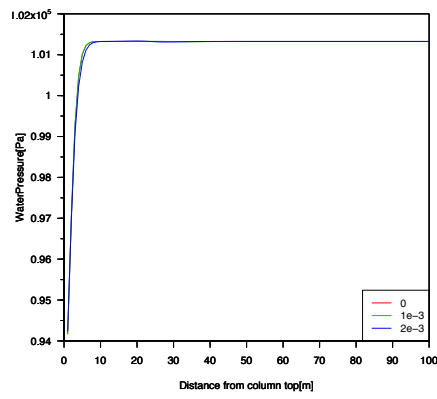


Fig.17: Simulated water pressure where effective diffusion coefficient= 1×10^{-9}

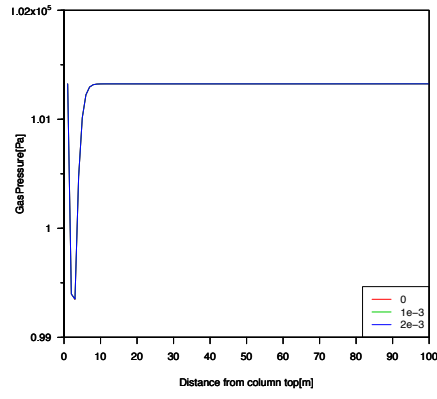


Fig.18: Simulated gas pressure where effective diffusion coefficient= 1×10^{-3}

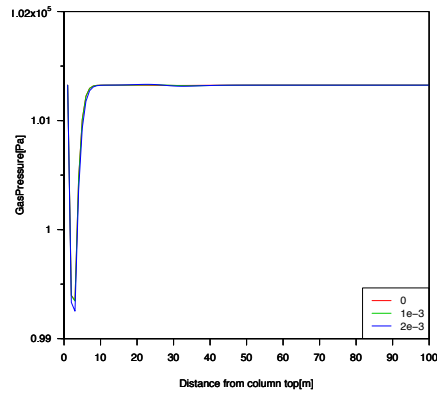


Fig.19: Simulated gas pressure where effective diffusion coefficient= 1×10^{-6}

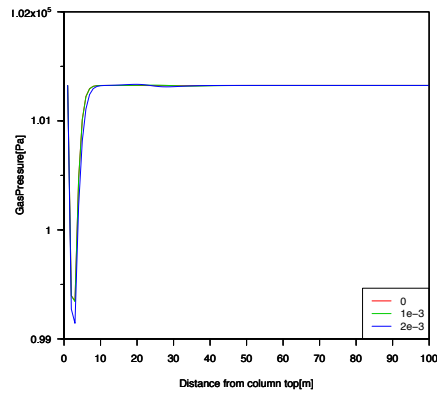


Fig.20: Simulated gas pressure where effective diffusion coefficient= 1×10^{-9}

5.2 二酸化炭素圧入条件下での水平方向のシミュレーション

ここでは、第4章で想定した問題と同じとし、反射係数と有効拡散係数を変化させることによるシミュレーションを行う。変更したパラメータの候補を Tb.6 に示した。解析期間も検証時と同様に 8.64×10^7 秒とした。シミュレーションの結果を Fig.21 から Fig.26 に示す。圧力に関しては、いずれの条件でも違いが微小であったため $\xi = R^2/t > 10^{-3}$ を省いた。

Tb.6: Candidate for parameters

有効拡散係数 (m^2/s)	反射係数
2×10^{-2}	0
2×10^{-2}	0.1
2×10^{-2}	0.5
1×10^{-5}	0
1×10^{-5}	0.1
1×10^{-5}	0.5

Fig.21 および Fig.22 はそれぞれ有効拡散係数を固定して、反射係数を変化した際のガスの飽和率を示している。反射係数、有効拡散係数ともに、変化させてもガスの飽和率に大きな変化は見受けられなかった。しかし、Fig.22 からは、反射係数を小さくするとわずかに飽和率が増加することが見て取れた。現行のモデルでは判断できないが、飽和率のわずかな増加が二相状態からガス単相への ξ の閾値に影響を与える可能性があるのではないかと考えられる。また、ガス単相に転移したあとのガス飽和率をより高める可能性が考慮できる。

Fig.23 および Fig.24 は、それぞれ有効拡散係数を固定して、反射係数を変更した際のガス圧をプロットしている。反射係数を大きくすると、ガス圧が全体として小さくなった。これは、不完全な半透膜としての性能が働き、圧入による圧力勾配とは反対方向の向きに浸透圧が働いた結果によるものと考えられる。また、有効拡散係数が小さい場合、反射係数が0の場合はガス圧の変化があまり見られないが、反射係数が大きくなるとガス圧の差が見られるようになった。

Fig.25 および Fig.26 は、それぞれ有効拡散係数を固定して、反射係数を変更した際の水相中における塩濃度を示している。いずれのグラフも、反射係数を大きくすることで、二相

状態における塩濃度を高める効果が確認された。また、特に 25 では、相転移点右近傍に見られる峰に関して、反射係数が大きくなるにつれて極大を与える ξ の値は大きくなり、極大値は大きくなっている。これらからは、輸送されている塩の量が減少していることが示唆される。Fig.26 では反射係数を変更したことによる水相中の塩の質量分率の応答がより顕著になっている。また、相転移点における塩濃度のジャンプがより急激になっているが、二相状態になってから値の変動がほぼなくなるまでの範囲が広がった。これは、有効拡散係数が小さい場合では、拡散の影響が少なくなり、濃度差による浸透圧勾配の影響が強くなったことを示唆している。

全体として、浸透圧を考慮したモデルの場合、不完全な半透膜の性能の指標である反射係数は、増加することで圧入により生じる圧力勾配に起因する流動を和らげる効果があることが示された。また、有効拡散係数が小さい材質では、大きい材質より反射係数の影響を受けやすいことが示唆された。

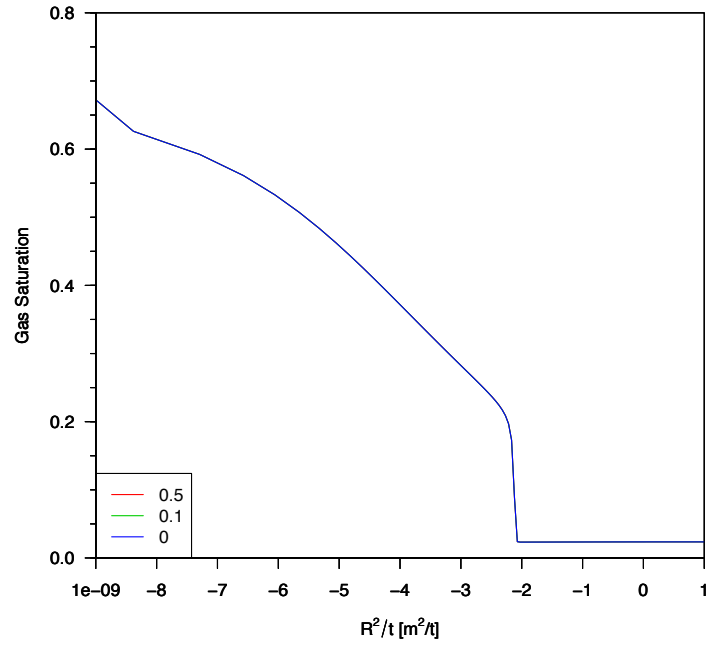


Fig.21: Simulated salt mass fraction where effective diffusion coefficient= 2×10^{-2}

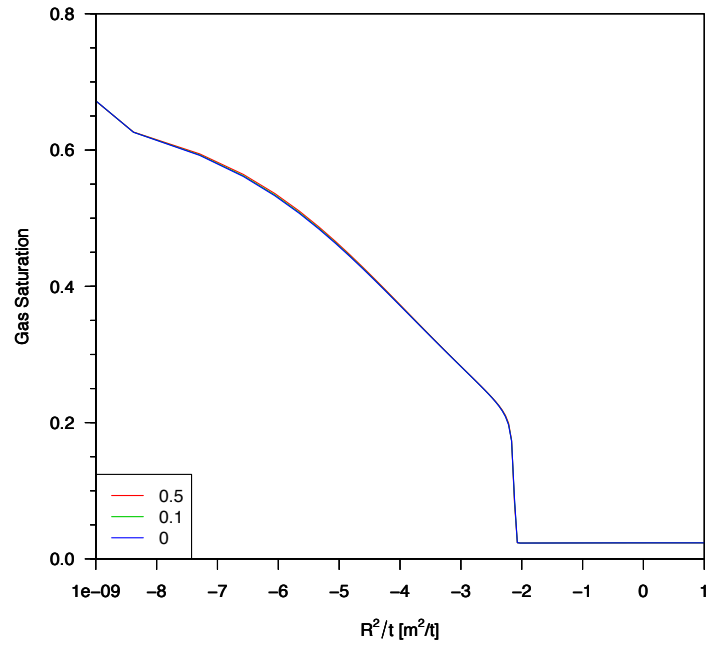


Fig.22: Simulated salt mass fraction where effective diffusion coefficient= 1×10^{-5}

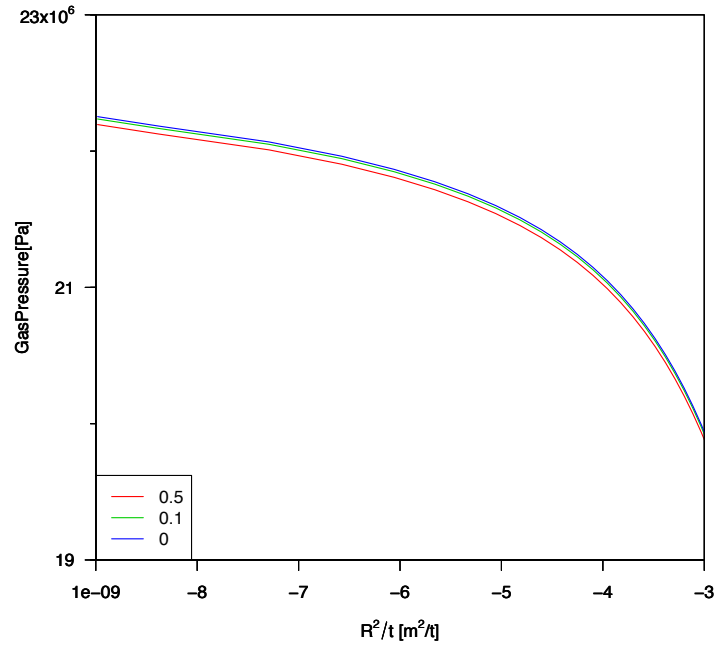


Fig.23: Simulated gas pressure where effective diffusion coefficient= 2×10^{-2}

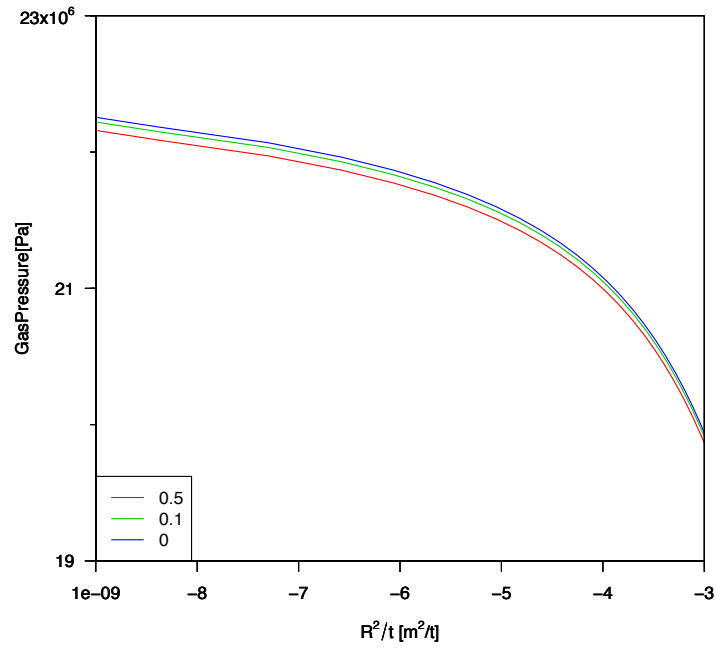


Fig.24: Simulated gas pressure where effective diffusion coefficient= 1×10^{-5}

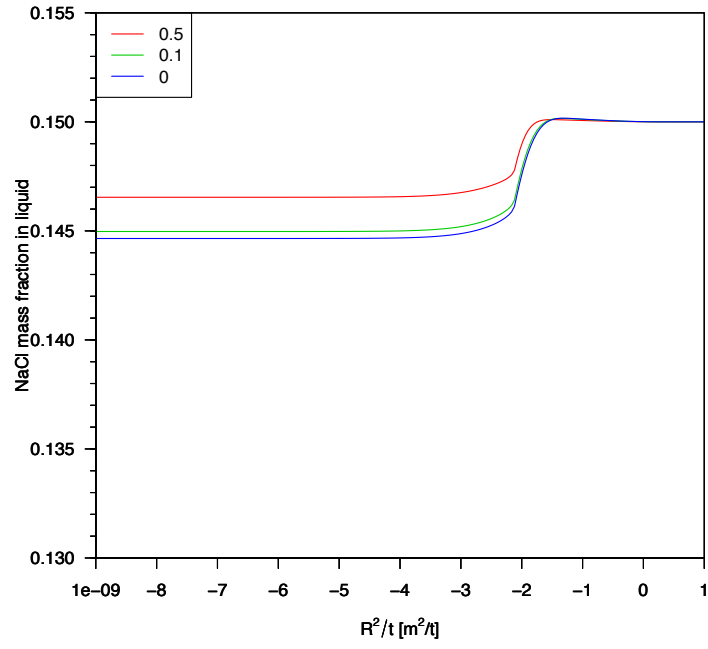


Fig.25: Simulated gas saturation where effective diffusion coefficient= 2×10^{-2}

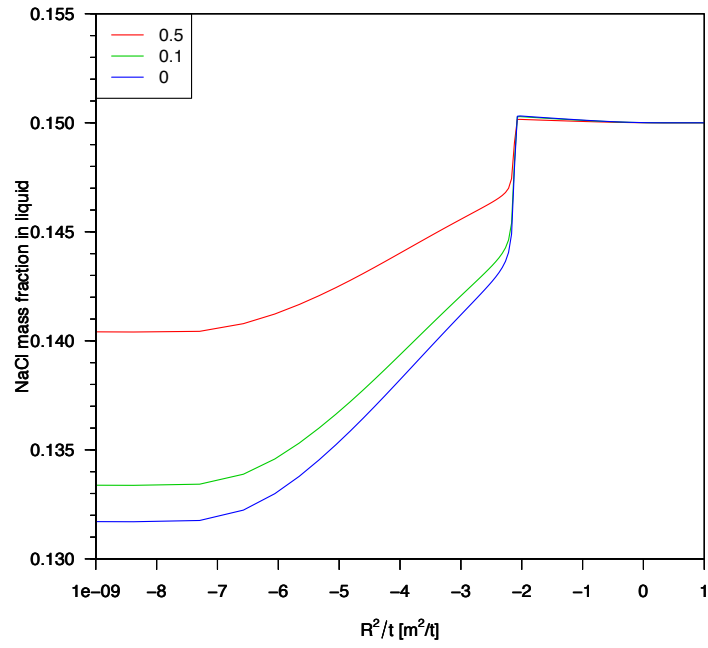


Fig.26: Simulated gas saturation where effective diffusion coefficient= 1×10^{-5}

6 結論

本研究では、二相流・塩輸送モデリングに対し、浸透圧の影響を考慮したモデルの構築を目的として、熱力学的考察に基づき、浸透圧の影響を含めた間隙流体の流動の定式化と、その結果を用いたシミュレータを開発し、反射係数を考慮する重要性について検討した。特に、ガスの圧入により塩輸送が行われている場への適用を意識し、反射係数による結果の変化の分析を実施した。

2章では、地下流体の挙動を表現するための、間隙流体の流動の定式化を行なった。また、相対浸透率や気体の密度に関し、使用すべきモデルを示した。

3章では、2章の定式化に基づき、導出した方程式系を解くための手法について示した。また、特に1次元座標系を考え、分割した領域に対し、手法を実際に適用する手順を記した。

4章では、開発したシミュレータを先行の実験結果および既存のシミュレータにより計算された問題に対して適用し、水相中の気体、ガス相中の水蒸気および塩の沈殿を無視するというモデルの範囲内で二相流と塩輸送の連成解析を適切に行えることが示された。

5章では、開発したシミュレータを用いて、重力影響下、および4章と同様な問題に関して反射係数と有効拡散係数を変化させたシミュレーションを行なった。重力影響下では、極めて拡散優位でなければ、浸透圧は重力による移流効果を抑える効果があり、反射係数を大きくする、および有効拡散係数を小さくすることでより効果が得られることが示され、井戸からの気体の圧入現象を想定すると、反射係数の変化は圧入による圧力勾配による流動を弱める効果があり、有効拡散係数が小さい地盤のほうが効果が高いことが示唆された。

これら本研究で開発したモデリング技術は、地下流体資源開発、放射性廃棄物処分、二酸化炭素地中貯留などの分野において、今後塩を含む帯水層を対象に長期間の解析を試みる際に役立つことが期待される。

今後の課題としては、多次元への拡張、および水相中のガス、ガス相中の水蒸気や塩の沈殿を考慮したモデルの開発があげられる。実際に各相のフガシティ係数を計算することにより、各相中の質量分率を求めることができることが知られている [Spycher, Pruess, 2005]。これらの実装により、現実をより適正に反映したモデルを作成することができ、実在する地盤モデルを用いたシミュレーションに対して効果を発揮することが期待される。また、より細かなメッシュ分割に対して実用的な時間で結果を得られるようにするために、行列計算の高速化・並列化が必要である。ブロック LU 分解において、 U_{21}, L_{12} をさら

に分割することで高次正方行列に対し計算時間を削減できる [前田康平, 瀬戸謙修 et al., 2015]. このような数値計算上の技術を取り入れることで, 実用に耐えうるシミュレータが開発されることが期待される.

参考文献

- 薛自求, 松岡俊文. 長岡プロジェクトからみた二酸化炭素地中貯留技術の現状と課題. 地学雑誌, 117(4):734–752, 2008.
- 棚瀬大爾, 薛自求, 嘉納康二. 長岡における二酸化炭素圧入実証試験. *Journal of MMIJ*, 124(1):50–60, 2008.
- 薛自求, 渡辺二郎. 長岡実証試験サイトにおける二酸化炭素挙動モニタリングへの物理検層の適用. *Journal of MMIJ*, 124(1):68–77, 2008.
- 石井吉徳, 大西正純, 青木豊, 村岡洋文. 坑井間トモグラフィによる地下構造探査その技術と将来性. 地学雑誌, 104(7):984–997, 1995.
- 細谷真一, 徳永朋祥. 間隙水圧の気圧変動に対する応答を利用した堆積岩の鉛直方向の透水係数の評価. 土木学会論文集 C, 64(2):238–252, 2008.
- 高橋学, 張銘, 江崎哲郎, 坂井健太郎. 室内透水試験法について. 応用地質, 39(3):315–321, 1998.
- 喜多治之, 岩井孝幸, 中嶋悟. 花こう岩および凝灰岩間隙水中のイオンの拡散係数の測定. 応用地質, 30(2):84–90, 1989.
- 大熊宏. 地下深部塩水層における二酸化炭素地中貯留のシミュレーション技術および長岡圧入実証試験への適用. *Journal of MMIJ*, 124(1):87–94, 2008.
- Karsten Pruess, Curtis M Oldenburg, GJ Moridis. Tough2 user's guide version 2. 1999.
- 平塚裕介, 山本肇, 中島崇裕, 薛自求 et al. 二酸化炭素地中貯留時の貯留層内圧力上昇の抑制に関する数値解析検討. 地下水学会誌, 59(3):229–237, 2017.
- 江頭進治, 伊藤隆郭. 土石流の数値シミュレーション. 日本流体力学会数値流体力学部門 Web 会誌, 12(2):33–43, 2004.
- WD Kemper. Movement of water as effected by free energy and pressure gradients: Ii. experimental analysis of porous systems in which free energy and pressure gradients act in opposite directions 1. *Soil Science Society of America Journal*, 25(4):260–265, 1961.
- 徳永朋祥, 三好悟. 堆積盆地内における過剰間隙水圧発生・継続に対する化学的浸透現象の役割について. 石油技術協会誌, 76(1):27–31, 2011.
- I Wendell Marine, Steven J Fritz. Osmotic model to explain anomalous hydraulic

- heads. *Water Resources Research*, 17(1):73–82, 1981.
- 竹田幹郎, 間中光雄, 平塚剛, 三好悟, 徳永朋祥, 伊藤一誠. 堆積岩地域における化学的浸透現象の地下水流動への影響. *地学雑誌*, 122(1):192–213, 2013.
- Mark J Osborne, Richard E Swarbrick. Mechanisms for generating overpressure in sedimentary basins: A reevaluation. *AAPG bulletin*, 81(6):1023–1041, 1997.
- M Th Van Genuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils 1. *Soil science society of America journal*, 44(5):892–898, 1980.
- Yechezkel Mualem. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water resources research*, 12(3):513–522, 1976.
- Arthur T Corey et al. The interrelation between gas and oil relative permeabilities. *Producers monthly*, 19(1):38–41, 1954.
- Otto Redlich, Joseph NS Kwong. On the thermodynamics of solutions. v. an equation of state. fugacities of gaseous solutions. *Chemical reviews*, 44(1):233–244, 1949.
- Nicolas Spycher, Karsten Pruess, Jonathan Ennis-King. Co₂-h₂o mixtures in the geologic sequestration of co₂. i. assessment and calculation of mutual solubilities from 12 to 100 degrees c and up to 600 bar. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 67(LBNL-50991), 2002.
- Karsten Pruess. *ECO2N: A TOUGH2 fluid property module for mixtures of water, NaCl, and CO₂*. Lawrence Berkeley National Laboratory Berkeley, CA, 2005.
- Ling Zhuo, Viktor K Prasanna. High-performance and parameterized matrix factorization on fpgas. In *Field Programmable Logic and Applications, 2006. FPL'06. International Conference on*, pages 1–6. IEEE, 2006.
- 田中真人, 藤川正毅, 儀間麻衣. 複素数階微分法と材料構成則実装への応用. In *理論応用力学講演会 講演論文集 第 61 回理論応用力学講演会*, pages 88–88. 日本学術会議「機械工学委員会・土木工学・建築学委員会合同 IUTAM 分科会」, 2012.
- Aristides C. Liakopoulos. Transient flow through unsaturated porous media. 01 1965.
- 愛知正温. 熱力学的考察に基づく二相流動・変形連成シミュレータの開発と水溶性天然ガス貯留層シミュレーションへの適用. 東京大学大学院工学系研究科・地球システム工学専攻博士論文, 2010. URL <https://ci.nii.ac.jp/naid/20000877406/>.
- Michael J O'Sullivan. A similarity method for geothermal well test analysis. *Water*

Resources Research, 17(2):390–398, 1981.

Nicolas Spycher, Karsten Pruess. Co₂-h₂o mixtures in the geological sequestration of co₂. ii. partitioning in chloride brines at 12–100 c and up to 600 bar. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 69(13):3309–3320, 2005.

前田康平, 瀬戸謙修 et al. 高位合成によるブロック lu 分解のハードウェア化. 第 77 回 全国大会講演論文集, 2015(1):69–70, 2015.

謝辞

本研究を進めるにあたって, 東京大学大学院システム創成学専攻合田隆准教授には, 研究の指針について, 貴重なご指導, 助言をいただきました. 東京大学大学院新領域創成科学研究科環境システム学専攻愛知正温講師には, 折に触れて, 地下流体の基礎的な知識や数値計算上の技術について, 助言をいただきました.

以上, 記して感謝いたします.

付録

本シミュレータは fortran を使って開発されました. 開発したシミュレータのコードは github を使って公開しております (<https://github.com/ShunsukeKobayashi/fuzzy-broccoli>). また,makefile を使うことのできる環境で使用されることを前提としております.