学際大規模情報基盤共同利用·共同研究拠点 萌芽型共同研究 採択課題

10th Symposium

JHPC

EX18318(東京大学情報基盤センター推薦課題)

Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

曹 金栄(東京大学 工学系研究科)

シェールガス資源量評価を目的としたケロジェンナノ孔隙内のメタン吸着 挙動に関する分子動力学シミュレーション

研究背景及び目的

シェール岩石内に存在するメタンガス: シェール岩石内の隙間とケロジェンの微細孔隙内に存在



高水圧で人工的に割れ 目をつくり、ガスを採取



研究手法 ケロジェンの分子モデル 断面で見ると ケロジェン壁面 120個 内(赤色部)に も微小孔隙(青 $C_{175}H_{102}O_9N_4S_2$ 色部)が存在 ケロジェンの分子構造モデル (Ungerer et al., 2014) ケロジェン ケロジェン メタン ケロジェン壁面内 にメタンを配置し、 MDシミュレーショ ンで挙動を計算 孔隙サイズを決定 分子動力学(Molecular Dynamics)法

Following Newton's equation Coulomb interaction

孔壁面へメタンが吸着 Kerogen

また、シェールのナノ孔隙はケロジェン内部に多く存在しており(緑色)、ケ <u>ロジェン壁面が持つ壁面粗さが影響を及ぼす可能性あり</u>

メタン吸着等温線の予測 🗪 シェールガス資源量評価

吸着等温線の予測方法と実例



$m_{i} \frac{\partial^{2} r_{i}}{\partial t^{2}} = F_{i} = -\frac{\partial U(r)}{\partial r_{i}} \qquad U_{c} = \sum_{non-bonded} \frac{q_{i}q_{j}}{4\pi\varepsilon_{0}r_{ij}}$	Time step
$U = U_{LJ} + U_{C} + \Lambda \qquad \text{Lennard-Jones interaction} \\ U_{LJ} = \sum_{non-bonded} 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{6} \right] \qquad $	update. update update
シミュレーション結果と考察	





出。TOCはHeller et al.(2014)に示さ れているMarcellusの1.2%を使用

 $N_a(p) = \sum f_i n_{a,i(I'+II)}(p) + TOC \times \overline{n}_{a,(III)}(p)$

N_a (p): 総合吸着量 *f;: i-*nm孔隙の体積分数 *n_{a,i(l'+II)} (p): i*-nm孔隙内の吸着量 TOC: 有機物量の分数 *n_{a(III)}(p)*: 有機物内の吸収量

結論

- ▶ ケロジェンモデルを用いたMDシミュレーションにより、2-20 nm幅のケロジェン孔隙内のメタンガス吸着量を計算できた。 また、孔隙サイズが小さいほど単位体積当たりの吸着量が 大きいことが確認された。
- ▶ 本シミュレーションで得られたメタン吸着量は、多くの仮定を 設けた上で、Marcellusのシェールサンプルを用いた実験で 得られた吸着値と非常に近い値となった。今後シェールガス 資源量評価の為に、他のシェールサンプルを用いた、メタン 吸着等温線の計算を行なう期待される。

※本計算では20nm以下の孔隙がすべてケロジェン内にあると仮定

金栄・梁 云峰・増田 昌敬(東京大学) 古賀 大晃・田中 浩之・田村 浩平・高木 是(石油天然ガス・金属鉱物資源機構) **JHPCN** 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第10回シンポジウム

Japan High Performance Computing and Networking plus Large-scale Data Analyzing and Information Systems

2018年 7月12日,13日

THE GRAND HALL (品川)