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)

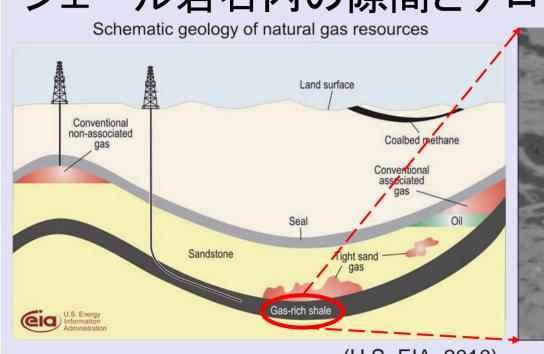
シェールガス資源量評価を目的としたケロジェンナノ孔隙内のメタン吸着挙動に関する分子動力学シミュレーション



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



Mineral grains

Pores

Mineral grains

Kerogen

Pyrite

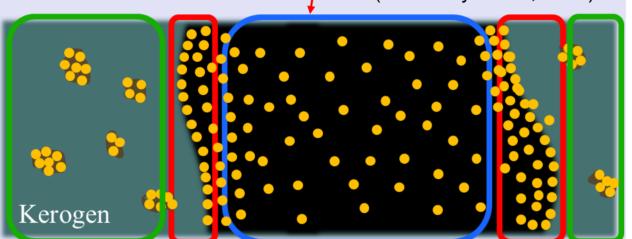
1 µm

Pyrite

(U.S. EIA, 2010)

シュール岩石のSEMイメージ (McCarthy et al., 2011)

シェールガスを含む頁岩層に水平にパイプを入れ、 高水圧で人工的に割れ目をつくり、ガスを採取



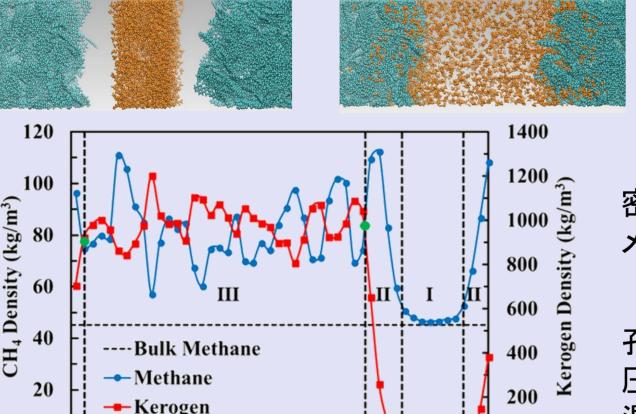
孔壁面へメタンが吸着 Kerogen

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

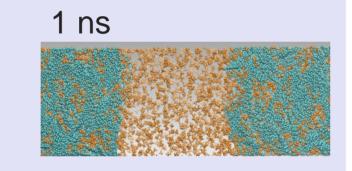
メタン吸着等温線の予測 ― シェールガス資源量評価

吸着等温線の予測方法と実例

シミュレーションのスナップショット 0 ns 0.1 ns



8 10 12 14 16 Box-Z (nm) 14



密度分布図から メタン吸着挙動の解明

孔隙サイズ:5 nm 圧力:5 MPa 温度:40℃

I : Free Gas Zone

II: Adsorption Zone

Ⅲ: Absorption Zone

Zone I および II 5 nm以上の孔隙サイズでの計算 結果と孔隙径分布を用いて吸着 量(SCE/Ton)を算出



Zone III

Zone IIIについてはTotal Organic Carbon (TOC)を用いて吸着量を算出。TOCはHeller et al.(2014)に示されているMarcellusの1.2%を使用

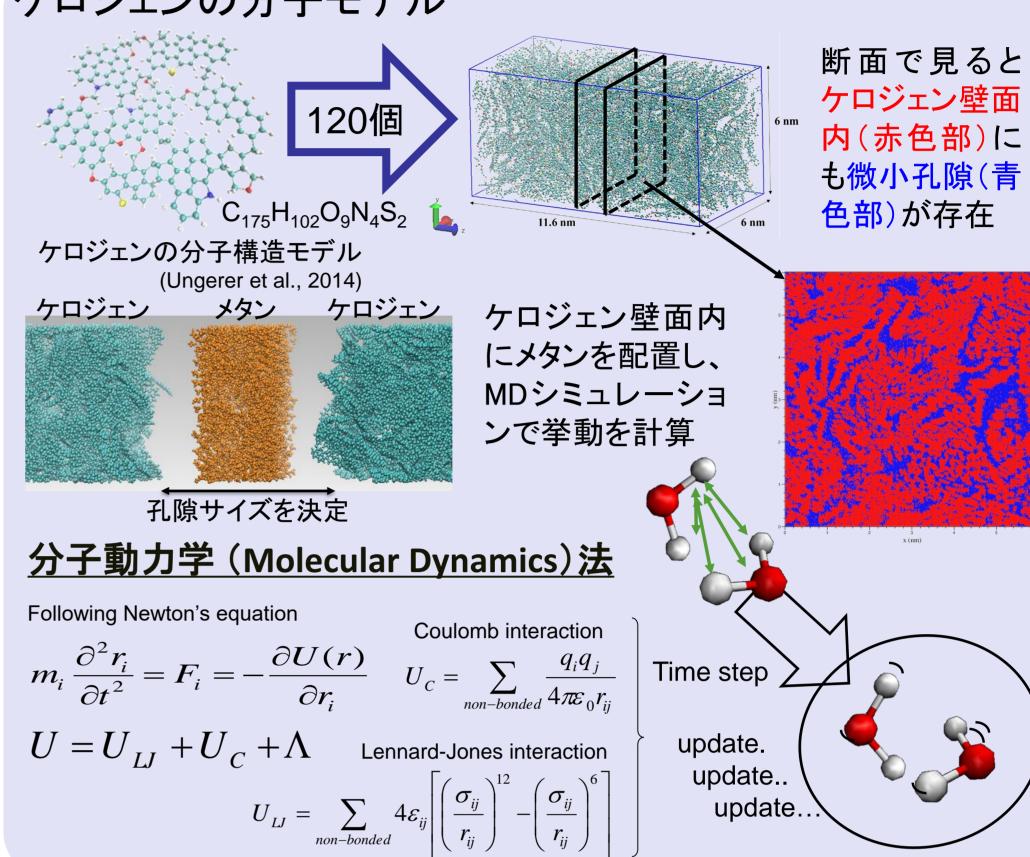
$$N_a(p) = \sum_i f_i n_{a,i(I'+II)}(p) + TOC \times \bar{n}_{a,(III)}(p)$$

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

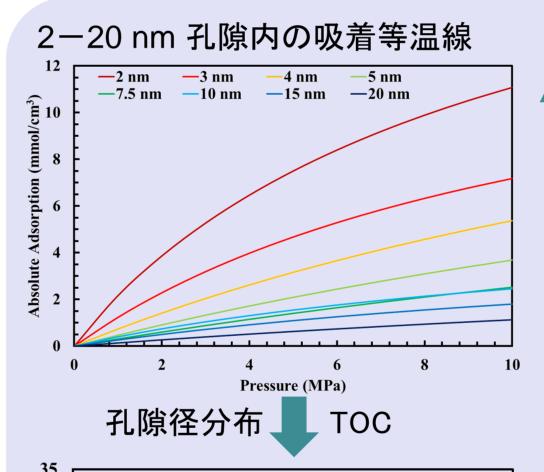
※本計算では20nm以下の孔隙がすべてケロジェン内にあると仮定

研究手法

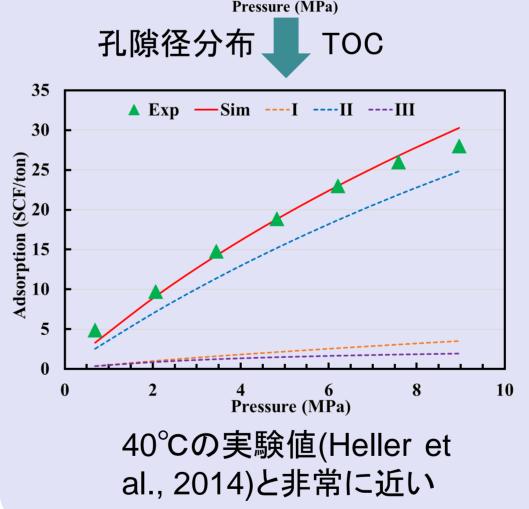
ケロジェンの分子モデル

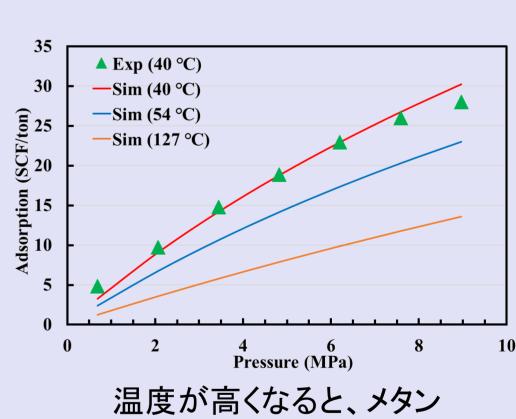


シミュレーション結果と考察



孔隙サイズが小さいほど単 位体積当たりの吸着量が 大きくなる





ガス吸着量が減少する

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。



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)

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