

マルチエージェントによる二酸化炭素ガスの溶解・沈降に関する大規模シミュレーション

日大生産工(院) 田村 顕人 日大生産工 西 恭一 日大生産工 辻 智也
日大生産工 三井 和男 日大生産工 日秋 俊彦 海技研 川越 陽一
海技研 中島 康晴

1. 緒言

近年、二酸化炭素(以下:CO₂)による地球温暖化現象が問題となっており、温室効果ガスの代表であるCO₂を抑制する試みとして排出場所で直接捕獲・貯留し、大気中に放出しないような工夫が求められている。その手法として、CO₂気泡(以下:CO₂ガス)の直接溶解・拡散方式、CO₂ハイドレートの深海底貯留方式が提案されている。前者のパイプを用いた直接溶解・拡散方式は安価ではあるが放出する深度によっては海中へ溶け込まず大気中へ逆戻りし効果が得られない恐れがある。また、後者の深海底貯留方式はCO₂削減の堅実な方法であるがハイドレートが生成される深度までパイプを伸ばすことは難しいと考えられており、シミュレーションを含む事前研究が重要であると考えられる。現在、CO₂溶解浮上シミュレーションはCO₂をパイプより放出することで海水に希釈し、海水の影響を見るためのシミュレーション^{1) 2)}が多く、パイプより放出されたCO₂単一粒子の挙動に関するシミュレーションはほとんど見られない。

そこで、実際にCO₂ガスをパイプで放出させる事前研究として、海中に放出されたCO₂ガス、CO₂ハイドレートの挙動に着目したコンピュータによるシミュレーションを行う。パイプより放出されたCO₂ガスは海中で溶解していく際に、気泡同士の衝突により吸収、反発する可能性がある。CO₂ハイドレートもCO₂ガス同様に海中を沈降していく際に衝突するものと考えられる。また、CO₂ガスは何万、何十万個と生成、放出されると考えられるため1台のコンピュータでは計算が困難である。そこで、クラスタシステムによる並列計算を行う必要もあるため、IBM社東京基礎研究所が開発したAglets³⁾へ本シミュレータの実装を行う。

本報告ではCO₂ガス、CO₂ハイドレートそれぞれの海中での挙動に視点を置き、海中での衝突による吸収、反発を呈するエージェントによるシミュレータを構築し、そのシミュレーション結果について述べる。さらに、Agletsへポーティングした本シミュレータの動作テストとして5台のクラスタシステムを用いて計算した結果についても述べる。

2. 基礎式

ここでは、海中に放出されたCO₂に関する一般的な式を挙げるが、溶解シミュレーションにおいてはCO₂単一粒子

の気泡球、沈降シミュレーションにおいては液体CO₂をハイドレート膜で覆ってある完全な球であると仮定する。また、海面をX, Y方向、深度をZ方向とする。

2.1 速度式

溶解・沈降シミュレーションのCO₂ガス、CO₂ハイドレートの直径[m]をD_pとしたときの速度U[m/s]は、

$$U = \sqrt{\frac{4g(\rho_c - \rho_D)D_p}{3C_D\rho_c}} \quad \dots(1)$$

で表される⁴⁾。ここで、(ρ_c - ρ_D)は海水とCO₂の密度差、gは重力加速度[m/s²]とする。

抵抗係数C_Dはレイノルズ数Reに依存し、一般化されている対数関数のグラフ⁵⁾から最小二乗法で近似した式(2)を用いて算出する。また、Reはパイプより放出されるとき初速度U=0.01[m/s]とし、海水の粘度μ_cを考慮した式(3)に代入することで算出する。

$$C_D = e^{(-2.1652 \times 10^2 \times \log(\text{Re})^2 - 7.4567 \times 10^{-1} \times \log(\text{Re}) + 3.0177)} \quad \dots(2)$$

$$\text{Re} = \frac{D_p U \rho_c}{\mu_c} \quad \dots(3)$$

2.2 CO₂ガスの海水への溶解量

CO₂の海水に対するヘンリー一定数Hは、

$$\ln\left(\frac{H}{H_0}\right) = A\left(1 - \frac{T_0}{T}\right) + B \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) + C\left(\frac{T}{T_0} - 1\right) \quad \dots(4)$$

で求められる⁶⁾。ここで、A, B, Cはそれぞれ定数(詳細は省略)であり、T₀は298.15[K]、H₀はT₀におけるCO₂の海水に対するヘンリー一定数である。

また、二重境界膜理論における気相側境界膜物質移動係数をk_y、液相側境界膜物質移動係数をk_xとすると、液相境界膜基準の総括物質移動係数K_xは、

$$\frac{1}{K_x} = \frac{1}{m k_y} + \frac{1}{k_x} \quad \left(m = \frac{H}{P}\right) \quad \dots(5)$$

で表される。さらに、物質移動流束N_Aは、液相中のモル分率をx、気相中のモル分率と平衡な仮想的液相中のモル分率をx*とすると、

$$N_A = K_x(x^* - x) \quad \dots(6)$$

となるが気泡の回りを簡単な理論で見積もると、気泡に限りなく近いところのCO₂濃度を100[%]、気泡より少しでも離れた場所は溶媒(海)が限りなくあると考えCO₂濃度は

0[%]とすると $x=0$, $x^*=1$ となり, 近似式(6) は $N_A=K_x$ となる。ゆえに, CO_2 の海水への溶解量は, CO_2 単一粒子の表面積を S とすると, $S \cdot N_A$ で計算できる⁷⁾。この値を CO_2 ガスの体積より差し引くことによって直径が初期値から刻々と減少していく。

2.3 CO_2 ハイドレートの体積圧縮率

CO_2 ハイドレートは海中を沈降していく際, 何千メートルという深度に達するため水圧による体積圧縮が生じると考えられる。沈降によって生じた液体 CO_2 の密度差 d , 現在の液体 CO_2 の密度, 沈降により生じた圧力差 dp とすると体積圧縮率 は式(7)で表される。

$$\beta = \frac{d \rho}{\rho \times dp} \left(= - \frac{d Vol}{Vol \times dp} \right) \quad \dots(7)$$

また, β は体積 Vol を用いると式(7)の括弧内の式でも表すことができるため, この式を用いて水圧によって変化した体積 $dVol$ を算出し, 元の体積から引くことで水圧による影響を考慮した CO_2 ハイドレートの体積を求めることができる。

2.4 CO_2 同士の衝突による吸収, 反発

溶解シミュレーションの場合, CO_2 を放出するパイプの径により, 実際に放出される CO_2 の直径にばらつきが生じ, ゆっくりと海中を上昇する気泡と速く上昇する気泡が現れ, 気泡同士の衝突が発生すると考えられる。本研究では, このような衝突が生じた際には, 大きいガスの直径で小さいガスの直径を割り 100 をかけた値と判定係数 (後述 3.3) を比較し, 大きければ反発が起こり, 小さければ吸収が起こるとする。なお, 吸収と判断された場合には, 小さい気泡が大きい気泡に吸収され吸収されることで小さい気泡は消滅, 瞬間的に, 大きい気泡の体積が吸収分増えるとする。また, 反発と判断された場合は(8)式を用い, X, Y, Z 方向にそれぞれ反発による速度を算出し, その速度を考慮したうえで CO_2 の移動計算を行う。ここで, 2球の質量[kg]をそれぞれ m, M , 両球間のはね返り係数 e , 衝突前の速度[m/s]を v_0, V_0 , 衝突後の速度[m/s]を v, V とする。

$$v = \frac{(m - Me)v_0 + M(1 + e)V_0}{m + M} \quad \dots(8)$$

$$V = \frac{m(1 + e)v_0 + (M - em)V_0}{m + M}$$

沈降シミュレーションの場合も溶解シミュレーションと同様に考えることができるが, 実際の放出間隔 (約 20[sec]) を考えると衝突は生じにくいと考えられるため, ここでは割愛する。

3. マルチエージェントによるモデル化⁸⁾

3.1 エージェント指向

「エージェント」は次のように定義される。「エージェントは, 置かれた領域に対して, 知識として蓄えているルールに従い自律的に行動を選択し実行する。また, 同じ

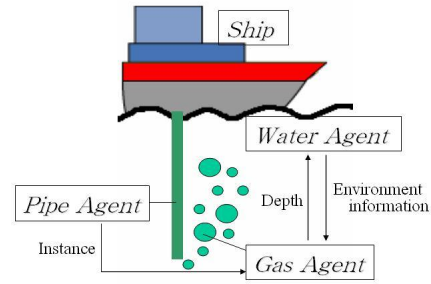


Fig.1 Agent Model

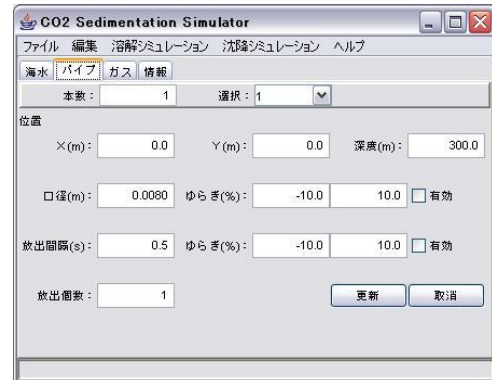


Fig.2 Parameter Dialog of Pipe

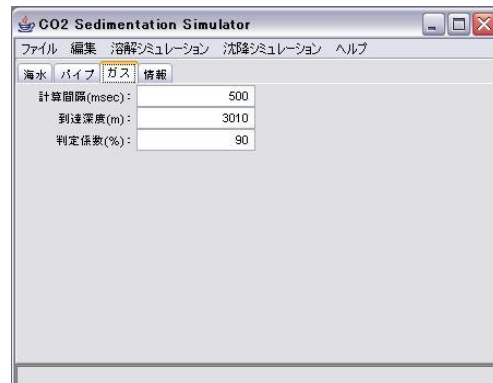


Fig.3 Parameter Dialog of Gas

領域内にエージェントが複数存在する場合(マルチエージェント), 各エージェントは自律的に行動するため, 結果として得られる全体的な挙動は創発的なものとなる。」⁹⁾

3.2 エージェント化

Fig.1 に示すように CO_2 の単一粒子を現すガスエージェントと CO_2 にとっては環境情報源となる海水エージェント, さらに, CO_2 はパイプから放出されるためパイプエージェントを定義する。ガスエージェントのインスタンス化は, 本システムの実行と同時に動作を開始するパイプエージェントより繰り返し自律的に行われる。なお, これらのクラスはすべて, 独自開発の汎用エージェントライブラリにおける並列動作が可能なエージェントインターフェースのサブクラスとして定義される。

3.3 GUI (Graphical User Interface) の実装

Fig.2, 3 にシミュレータの概要図を示す。Fig.2 はパイプの設定を行うダイアログであり, パイプの本数, パイプの

位置, パイプの口径, CO₂の放出間隔, 放出する CO₂の個数の設定等が行える. Fig.3はCO₂の設定を行うダイアログであり, CO₂の計算間隔, 沈降シミュレーションで計算終了のトリガーとなる到達深度, 衝突が生じた際に反発, 吸収を決定する判定係数の設定が行える. また, このシミュレータで沈降・溶解シミュレーションの双方が可能である.

3.4 計算間隔の決定

本システムの動作検証として 深度300[m]に放出径8[mm]のパイプから計算間隔 100[msec]~400[msec]まで 100[msec]間隔で変化させ, ガス一つずつ放出したときの深度と時間の関係を Fig.4 に示す. この図より計算間隔が短くなるほどガスが溶解するまでの距離が長くなることがわかる. 今回用いている速度式(1)は, 球状の剛体の終端速度であり, 浮力と抵抗力が均衡して等速運動に達した際の状態を仮定している. 実際には, 均衡する時間まで加速度を伴い, 形状も変形するため(1)では厳密に表現ができないため, 計算間隔を短くすれば平均の変化量が大きくなることから速度の相違も大きくなり, 逆に長くすれば等速運動になるまでの時間に猶予を与えることになるため, 速度が合致する方向に向かう. そのため, 適切な計算間隔を決定する必要があるため, 今回は簡単な実験と比較した結果により, 300[msec]を採用する.

3.5 シミュレーション結果

ここでは例として, CO₂の溶解浮上に関するシミュレーション結果について述べる. 潮流: X方向に1.1[m/s]ゆらぎあり, パイプ: 1本, ガス個数: 20個, 放出間隔: 0.5[sec]ゆらぎあり, パイプ口径: 0.008[m]ゆらぎあり, 計算間隔: 300[msec], 判定係数: 60[%](正確な値は計測されていない)でシミュレーションを行ったときの結果を Fig.5, Fig.6 に示す.

Fig.5より, 図の 部分で衝突による反発が生じ, 4つ目のCO₂ガスが3つ目のCO₂ガスに押されることで速度が増加し, 浮上距離の増加が確認でき, また分かりづらいが3つ目は押したことによって速度が減少し, 浮上距離が減少していることが確認できる. さらに, Fig.6より, 部分で4つ目のCO₂ガスが2つ目のCO₂ガスを吸収し体積が増加したことにより直径が増加し, 2つ目のガスは吸収により消滅していることも確認できる. したがって, CO₂同士の判定係数が判明すれば, それを代入することでより現実に近いシミュレーションができると考えられる.

4. Aglets への実装

4.1 Aglets とは

Aglets とは, IBM 社東京基礎研究所が開発した「Aglets Workbench」¹⁰⁾と呼ぶ移動エージェントの開発, 実行環境であり, Java 言語を用いて開発されたものである. この環境を相互に通信可能な計算機上にインストールすることにより, Java のオブジェクトがこれらの計算機間を移動しながら, 自

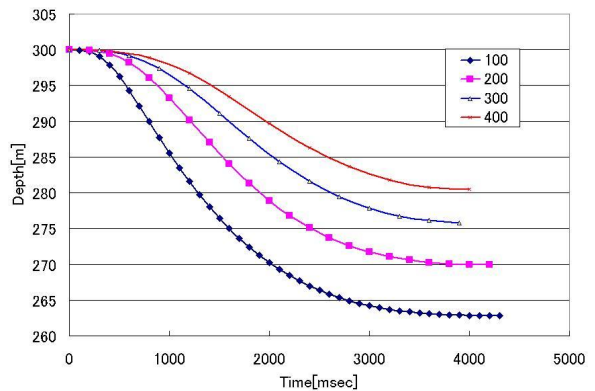


Fig.4 Comparison of Calculation Intervals of CO₂

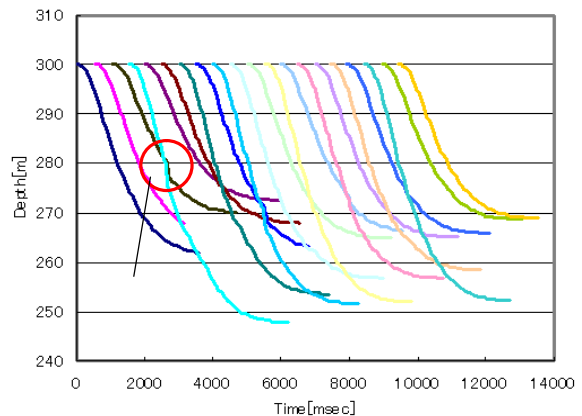


Fig.5 Position of CO₂

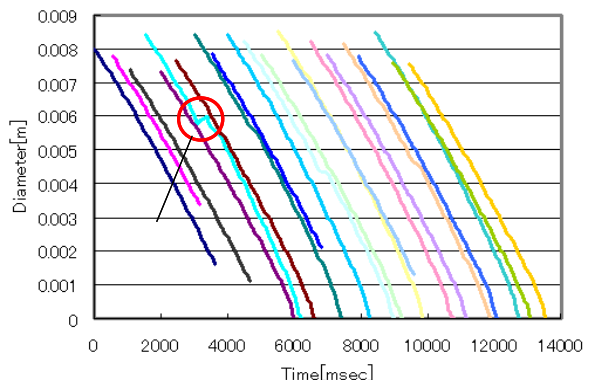


Fig.6 Diameter of CO₂

立性と一貫性を持ったまま作業を実行することを目的としたライブラリである Aglets の主な特徴は, TCP/IP 通信が可能, 同期, 非同期実行が可能, デフォルトで GUI が実装されているなどが上げられる.

以下に Aglets の基本仕様を示す.

- Aglet: 自分自身がスレッドであり, 移動した後も自分自身から動き出すため自律的であり, メッセージに対して反応することができるので反応的でもある Java オブジェクト.
- AgletProxy: AgletProxy は Aglet の代理である. Aglet へのダイレクトなアクセスから Aglet を保護する.
- AgletContext: Aglet の workspace である. 基本的に, 一つの AgletServer に対し, 一つの AgletContext がある. (一つの AgletServer に複数の AgletContext を存在させることも可能)

- Message : Aglet 間で交換される Java オブジェクト .
- AgletID : Aglet に与えられた一意の ID を表現する .

4.2 クラスタシステムについて

学術フロンティア研究棟に設置されている 120 台のクライアント(DELL 社製 PowerEdge1650[CPU: Pentium III 1.4GHz × 2, Memory: 1GB, Diskless])と 3 台のサーバ(DELL 社製 PowerEdge2650[CPU: Xeon 2.0GHz × 2, Memory: 3GB, OS:RedHatLinux9])を全てギガビットイーサネットで接続したクラスタシステム環境のうち、今回は動作検証として 4 台のクライアントマシン, 1 台のサーバマシン, 計 5 台を用いる .

4.3 Aglets へのポーティング

構築したシミュレータ同様, Fig.1 のように CO₂ 単一粒子を現す GasAglet と CO₂ にとっては環境情報源となる WaterAglet, GasAglet をパイプから放出するための PipeAglet, それに加え, 衝突判定のための AgletID を保持する ListAglet を定義する . すべてのクラスは Aglet クラスのサブクラスとして定義することで Aglet の機能を簡単に持たせることができる .

4.4 シミュレーション結果

クラスタシステムを用いて, 潮流 : なし, パイプ : 1 本, ガス個数 : 5 個, 放出間隔 : 0.5[sec]ゆらぎなし, パイプ口径 : 0.008[m]ゆらぎあり, 計算間隔 : 300[msec], で溶解シミュレーションを行った際の結果を Fig.8, Fig.9 に示す . なお, クラスタシステムへの振り分けは 1 台につき 1 個の GasAglet を生成し, 簡単に動作検証を行うため 2.4 節のように吸収, 反発ではなく, 吸収のみを考慮している .

Fig.9 の より, 溶解浮上していく際に衝突・吸収が生じ, 体積が増加し直径が増加していることがわかる . なお, 衝突により 4 番目の GasAglet は消滅するため Fig.8 の の点で動作が停止していることもわかる . このような結果から既存シミュレータから Aglets へ移行しても同様のシミュレーションが行えることが明らかである .

5. 結言

本報告では, 海中に放出された CO₂ が衝突による吸収, 反発しながら, 浮上, 沈降する様子を捉えることができるシミュレータに関する考え方について述べ, ガス個数 20 個のシミュレーションを行い, 判定係数の設定により, より現実に近いシミュレーションができる可能性を見出した . また, 既存シミュレータを Aglets ライブラリに載せ替え, クラスタシステムを用いた並列計算の動作テストを行い, 既存シミュレータと同様のシミュレーションを行えることを確認した . 今後, 実際の実験より得られたデータとの比較を行い, クラスタシステム 120 台すべてを用いて何万, 何十万という数のガスエージェントを生成・実行を可能にするため, 更なるシミュレータの更新・改良を行う .

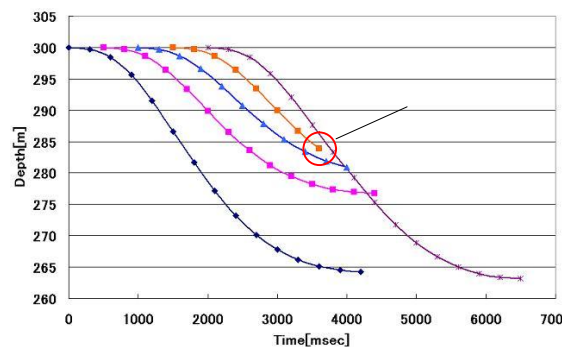


Fig.8 Position of CO₂ by using Aglets

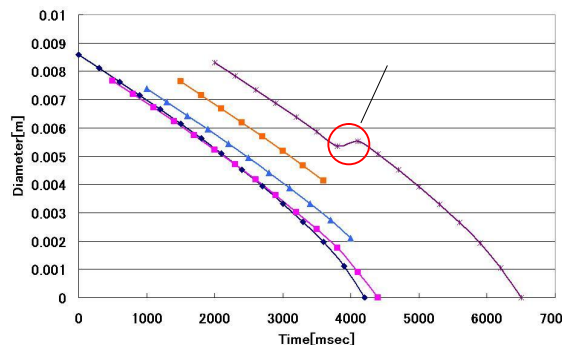


Fig.9 Diameter of CO₂ by using Aglets

【謝辞】 本研究は, 平成 16, 17 年度学術フロンティア推進事業共同研究プロジェクトの一部として行われた .

参考文献

- 1) 金井健, 武隈克義他, 船舶が輩出する二酸化炭素の海中溶解・固定に関する研究, 日本機械学会 2003 年度年次大会講演論文集(), 307-308
- 2) 平井秀一郎, 津島将司他, 海洋中層溶解法における CO₂ 希釈の評価, 日本機械学会 2003 年度年次大会講演論文集(), 317-318
- 3) <http://aglets.sourceforge.net/>
- 4) 化学工学会編, 化学工学便覧第 6 版, 丸善株式会社, 1999, 141-142
- 5) 化学工学会編, 化学工学便覧第 6 版, 丸善株式会社, 1999, 139
- 6) 化学工学会編, 化学工学便覧第 6 版, 丸善株式会社, 1999, 81
- 7) 化学工学会, 技術者のための化学工学の基礎と実践, 株式会社アグネ承風社, 1998, 152-153
- 8) 西 恭一, 田村 顕人, 辻 智也, 三井 和男, 日秋 俊彦, 川越 陽一, 中澤 公伯, マルチエージェントによる二酸化炭素ガスの潮流内溶解浮上に関するシミュレーション, 日本計算工学会論文集 2005 年号, 論文番号 20050023, 2005
- 9) 西 恭一, 大沼真也, ネットワーク環境における並列・分散マルチエージェントプラットフォームの開発, 日本計算工学会論文集, No.20020016, 2002 .
- 10) Aglets Workbench, <http://www.tri.ibm.co.jp/aglets/>