

論文の内容の要旨

論文題目 二酸化炭素地中貯留を対象とした大域的最適化の実用性向上

氏 名 田中 啓

気候変動を抑制する上で、温室効果ガスの削減は喫緊の課題である。IEA による、2050 年時点での温度上昇を現在の 2°C 以内に抑えるシナリオでは、CO₂ の回収・貯留 (CCS: CO₂ Capture and Storage) が全体の削減量に寄与する割合は 13% と高い。CCS の中でも CO₂ 地中貯留は実効性の高い手段であり、現在、世界で 55 の大規模プロジェクトが進行している。しかしながら、IEA のシナリオ達成には、100 以上の大規模プロジェクトが必要とされる。

地中貯留 CO₂ の地下での挙動予測には、貯留層シミュレータを用いる。貯留層シミュレータは本来、石油・天然ガス開発のために用いられるもので、簡単なグリッドモデルでも 1 回の計算に数時間を要する。また、CO₂ 地中貯留は油ガス田開発と異なり膨大なコストをかけることが難しいため、得られる観測データは不確実性を多く含む。

CO₂ 地中貯留や油ガス田開発では、計画の効率化や貯留層データの持つ不確実性低減を目的として、貯留層シミュレーションを伴う最適化計算が必要となる。CO₂ 圧入・油ガス生産開始前は坑井配置の最適化、開始後はヒストリーマッチング (HM) が行われる。前者では、物理探査等によって構築された貯留層モデルを最適化問題の入力データとし、CO₂ の圧入量や油ガス生産量を出力する。後者は、貯留層の圧力履歴や生産履歴から貯留層モデルの浸透率や孔隙率といったパラメータを逆推定するものである。特に HM は最適化するパラメータ、つまり問題の次元が大きくなるため、多くの時間と計算資源を必要とする。

本研究では、貯留層シミュレーションに適した、実用性の高い大域的最適化手法の開発を目的とする。具体的には、

1. 貯留層シミュレーションに適した最適化アルゴリズムの開発
2. シミュレータの高速化
3. 目的関数の適切な設定

である。開発した手法を実際の最適化問題に適用し、その有効性を検証する。

坑井配置の最適化問題を例にとれば、井戸の位置を示すグリッドナンバーは離散変数であり、CO₂圧入・油ガス生産レートは連続変数である。全体として混合変数非線形計画問題 (MINLP) を解くことになり、多くの場合、メタ戦略が利用される。メタ戦略はサンプリング法の特徴に基づき、局所探索法と多点探索法に大別することができる。貯留層シミュレーションが比較的長い計算時間を要すること、目的関数が非線形となることを考慮すると、坑井配置の最適化や HM には多点探索法が適しているといえる。本研究では、多点探索法の中でも、探索性能が高く、入力パラメータの少ない繰り返しラテン超方格法 (ILHS: Iterative Latin Hypercube Sampling) を用いる。ILHS は実験計画法の 1 つ、ラテン超方格法 (LHS: Latin Hypercube Sampling) を基に開発されたもので、目的関数の値の順位から、累積分布関数を更新し、次のサンプル点を決定、目的関数の再計算という一連のプロセスを繰り返すことで、最適解を求めるというものである。

ここで、大域的最適化において、最適化計算は一般に以下の条件を満たした場合に終了する。

- I. 繰り返し計算の回数が指定した回数に達したとき
- II. 繰り返し計算において、目的関数の値が改善しなくなったとき
- III. 数学的な最適性の条件を満足したとき

基準 I は、解探索の収束だけでなく、計算環境にも依存して設定される基準であることから、収束判定の基準としては適当ではない。基準 II については、大域的最適解は未知であるため、目的関数の値がある点以降更新されるかどうかを判断することは難しい。結果として、基準 III のように数学的な最適性の条件を設定することが望ましいものの、統一的な基準が存在するわけではない。

本研究では、解探索の進展にともない、解探索プロセスが大域的探索から局所的探索に変化する点に注目し、正規化エントロピーによる収束判定基準を提案する。

ここで、主変数の累積分布関数の正規化エントロピーを定義する。解探索が十分に進み、主変数が収束したと仮定すれば、エントロピーは 2 値エントロピー関数 (BEF) で表すことができる。本研究では、全ての主変数について正規化エントロピーと BEF との差を計算し、それがある閾値に到達したとき、解探索が収束したとみなし、最適化計算を打ち切ることとする。

次に、最適化手法のロバスト性向上について検討した。工学的問題において、目的関数の評価回数には多くの場合制限があり、各独立試行の計算結果はばらつくことがある。本研究では、このばらつきを低減させることを目指して、最適化計算で用いる乱数に変更を加えた。具体的には、各試行で発生させる乱数に、正規コピュラに基づく依存関係を持たせた。コピュラ (接合分布関数) とは多次元分布と 1 次元周辺分布の関係を表した分布関数であり、LHS を発展させた Latin Hypercube Sampling with Dependence (LHSD) において用

いられている。

改良したアルゴリズムを 19 のベンチマーク関数に対して適用した。収束判定基準は、最適解への収束と解探索の進展を同時に表現でき、収束判定基準として有効である。また、LHSD を用いたロバスト性の向上では、目的関数値の平均値及び変動係数を比較した。相関係数 $\rho = 0.3$ のとき、最適解の平均値は大きく変化していないものの、その変動係数はほとんどの関数で低下する。従って、相関のある乱数を用いることで、最適解の値を維持しつつ、ロバスト性を向上することが可能である。

本研究では貯留層シミュレータとして、Lawrence Berkeley 国立研究所で開発された多次元多成分系シミュレータ TOUGH2, 及びそのモジュール ECO2N を利用した。過去の研究において、アルゴリズムの一部が既に GPU 化されており、25000 グリッドの貯留層モデルで、最大で 18.5 倍の高速化を達成している。プログラミング言語には CUDA Fortran を使用している。TOUGH2/ECO2N に以下の改良を施し、約 2 倍の高速化と収束性向上を実現した。

- タイムステップ幅の更新方法の変更（収束性の向上、高速化）
- GPU 用アルゴリズムの改良（汎用化、高速化）
- ソルバーの改良（高速化）

多点探索法では、各サンプルセットに対する目的関数の計算は独立であるため、MPI を用いた並列化を行うことで、計算時間の大幅な短縮が可能である。MPI 並列と GPU を同時に用いた場合の高速化率では、並列数が 14 のとき、最大で約 12 倍の高速化を達成した。更なる高速化には、CPU や GPU の処理速度よりも、メモリ転送性能に着目した改良を行うべきという知見が得られた。

最後に、2 つの工学的問題に開発した手法を適用し、開発手法の有効性を検討する。CO₂ 地中貯留を対象とした坑井配置の最適化とヒストリーマッチングを行った。まず、坑井配置の最適化では、地下深部塩水層への 2 本の垂直坑井からの CO₂ 圧入と 2 本の水平坑井からの CO₂ 圧入について最適化計算を行う。目的関数は圧入開始 100 年後における可動 CO₂ の質量割合とし、繰り返し計算回数 of 最大値に到達するか、収束判定指標が 0.01 以下となったとき解探索を終了する。

2 つの最適化問題それぞれに対して、5 回の独立試行を行い、うち 3 回で収束判定基準を満たした。結果として、最適解を維持しつつ、関数評価回数を約 30% 削減することができしており、正規化エントロピーを用いた収束基準は、十分な解探索が行われたかを判断する指標として有効である。加えて、提案基準は 2 値変数を含む最適化についても適用可能である。また、CO₂ のトラップ量を見ると、垂直坑井よりも水平坑井が CO₂ のトラップ量を増加させることが示された。

最後に、ヒストリーマッチングについて述べる。本研究では、新潟県南長岡で行われた岩野原実証試験に対するHMを行った。同試験は国内初のCO₂地中貯留の実証試験である。2003年7月から2005年1月の期間に1本の垂直坑井(IW-1)から1万tのCO₂が圧入され、3本の観測井(OB-2~4)によるモニタリングが継続的に行われている。観測項目は主に、IW-1, OB-4の坑底圧、OB-2, 3, 4のCO₂飽和度である。

目的関数は圧入井と観測井の坑底圧、観測井へのCO₂到達時間、CO₂が到達していない観測井OB-3に限ってはCO₂飽和度とした。本研究では、孔隙率を観測データとして浸透率を最適化させる問題、浸透率と孔隙率を同時に最適化する問題を取り扱った。浸透率と孔隙率には第2章で述べたLHSDによって、その相関関係を表現した。

前章と同様に、正規化エントロピーは最適解への収束を判断する指標となりえるものの、収束が起こるまでの関数評価回数が非常に多いため、計算終了までに全ての変数について正規化エントロピーの値が閾値を下回ることはなかった。

浸透率の最適化問題では、圧入井の坑底圧は精度よく再現できるものの、観測井に関しては実測値を大きく下回る結果となり、浸透率のみの最適化が不十分であるといえる。一方、浸透率と孔隙率の最適化問題では、目的関数の値は浸透率だけの最適化と比較して1/2以下に向上し、観測データの再現性も向上した。加えて、浸透率、孔隙率分布をより細かく最適化することで、データの再現性はより向上する。また、観測井OB-3のCO₂飽和度を目的関数に加える事で、収束挙動が速くなることが確かめられ、適切な目的関数を設定することは最適化計算の収束の上で重要であるという知見を得た。