[Regular Paper]

Development of Normalized Entropy Based Convergence Standards in Iterative Latin Hypercube Sampling Applied for CO₂ Geological Storage

Kei TANAKA* and Kozo SATO

Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, Hongo 7-3-1, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, JAPAN

(Received May 28, 2015)

A criterion using the average amount of information, entropy of primary variables is developed in order to determine convergence of optimization calculations by the iterative Latin hypercube sampling (ILHS) as the multi-point search. In the ILHS, lengths of sample spaces are decreased as the process of optimal solution search advances. In this research, convergence of the optimization process is evaluated by calculating entropy of sample space length. Specifically the difference between normalized entropy and binary entropy function (BEF), “ $d\eta$ ” is calculated and evaluated. The criterion is validated by well placement optimization problems about CO₂ geological storage. The number of function evaluations is decreased by 70 to 80 %, keeping optimal solutions after the criterion is applied. Additionally, the criterion is available for problems including both continuous and dummy variables, which have a different convergence behavior.

Keywords

Reservoir simulation, Carbon dioxide geological storage, Metaheuristics, Iterative Latin hypercube sampling, Convergence criterion

1. 緒 言

坑井配置の最適化や生産履歴のヒストリーマッチングは、石油工学における代表的な最適化問題である。過去には、浸透率や孔隙率等のパラメーターを個別に変化させる最適化が一般的であったものの、近年の計算機の性能向上や並列化計算の普及に伴い、複数のパラメーターを同時に変化させる大域的最適化アルゴリズムの利用が進んでいる¹⁾。

坑井配置の最適化問題を例にとれば、坑井配置を示すグリッドナンバーは離散変数、流体の生産レートおよび圧入レートは連続変数である。したがって、坑井配置の最適化問題は混合変数の非線形計画問題 (MINLP: Mixed Integer Nonlinear Problem) に帰着され、最適解の導出には多くの場合、メタヒューリスティクス²⁾が用いられる。

メタヒューリスティクスの適用例は、自動車や橋梁 (りょう) の構造計算や製造工程のスケジューリング問題で多く見られ、石油開発においてもその利用が進んでいる。しかしながら、計算機性能が向上しているとはいえ、貯留層シミュレーションは比較的長い時間を要することから、得られた最適解の評価が不十分なまま、現実的な評価回数で計算が打ち切られることが多い。また、仮に時間の制約がなく、十分な数値計算が可能であったとしても、大域的最適解の探索が十分に行われたかどうかを判断する指標は限られている。

本研究ではまず、2章で貯留層シミュレーションに適したメタヒューリスティクスについて考察した後、3章で筆者らが提案するエントロピー、および2値エントロピー関数を指標とした収束判定基準について述べる。最後に、4章でCO₂地中貯留における坑井配置の最適化問題に対して提案指標を適用し、提案法の有効性を示す。

2. 貯留層シミュレーションに適したメタヒューリスティクス**2.1. メタヒューリスティクスの概要**

メタヒューリスティクスとは、最適化問題を解くための経験的手法を結合させたものである²⁾。全ての手法が必ずしも数学的な検証を経ているわけではないものの、少ない評価回数で大域的最適解、もしくは準最適解を求めることが可能であり、多くの工学分野において用いられている。

貯留層工学に関わる最適化問題では、メタヒューリスティクスの中でも遺伝的アルゴリズム (GA: Genetic Algorithm) が利用される場合が多い³⁾。しかしながら、GAはその適用範囲が広い反面、必ずしも解探索の性能が高いわけではなく、問題に応じたアルゴリズムの変更が必要とされる場合が多い。GA以外では、焼きなまし法 (SA: Simulated Annealing) や粒子群最適化 (PSO: Particle Swarm Optimization) といった手法の適用例が報告されている (たとえば Beckner *et al.*, 1995⁴⁾, Onwunali *et al.*, 2011⁵⁾)。前者は Hill Climbing を基にした代表的な局所探索法の一つであり、大域的最適解が得られることが数学的に保証されているものの、問題の次元によっては実行時間が膨大になる。後者は一度に複数のサンプル点を生成し、各点の目的関

DOI: dx.doi.org/10.1627/jpi.58.384

* To whom correspondence should be addressed.

* E-mail: tanaka@kelly.t.u-tokyo.ac.jp

数値を計算する多点探索法の一つであり、近年その適用例が増加している。ほかにも多点探索法では、差分進化法 (DE: Differential Evolution) の適用例が挙げられる (たとえば Nwankwor *et al.*, 2013⁶⁾)。

貯留層シミュレーションを伴う最適化問題の特徴として、第一に評価回数に制約があることが挙げられる。有限要素法による構造計算や工業製品製造のスケジューリング問題と比較したとき、数万以上のグリッドを対象とする貯留層シミュレーションは、目的関数の評価に比較的長い時間を要するため、少ない評価回数で大域的最適解を得られる多点探索法を用いるのが現実的である。

第二に、目的関数の非線形性に着目する。油ガス田開発や CO₂ 地中貯留における坑井配置の最適化問題では、油ガスの累積生産量や CO₂ の累積圧入量、トラップ量を最大化するような目的関数が設定される。これらの目的関数は坑井の位置 (グリッドナンバー) や生産・圧入レートに対して非線形であり、複数の局所的最適解が存在する。一般に、目的関数の非線形性が低ければ局所探索法が、高ければ多点探索法が適していると言われている⁷⁾。このことから、貯留層工学における最適化問題では、局所探索法よりも多点探索法が適していると言える。

本研究では、メタヒューリスティクスとして、多点探索法の一つである繰り返しラテン超方格法 (ILHS: Iterative Latin Hypercube Sampling)⁸⁾ を用いる。ILHS は、PSO や DE と比較して、少ない評価回数で大域的最適解を求められることが示されており⁹⁾、CO₂ 地中貯留や石油開発における坑井配置の最適化においてもその有効性が確認されている^{8),9)}。

2.2. 繰り返しラテン超方格法の概要

繰り返しラテン超方格法 (ILHS: Iterative Latin Hypercube Sampling) は、計算機支援実験計画法の一つであるラテン超方格法 (LHS: Latin Hypercube Sampling) (Mckay *et al.*, 1979)¹⁰⁾ に基づくメタヒューリスティクスである。本節では ILHS の概要、およびその特徴について説明する。

いま、 d 個の主変数 (入力パラメーター) を持つ目的関数 $g(X)$ の最適化を考える。サンプル数は n 個とし、各パラメーター $x_j (j=1, \dots, d)$ は互いに独立した累積分布関数 $F_j(x_j)$ に従っているものとする。LHS では、各パラメーターの累積確率 $[0, 1]$ を n 等分し、各区分から 1 回ずつランダムにサンプリングする。得られた n 個のサンプルはランダムな順序に並べ替えられ、 d 個の入力パラメーターを組み合わせることで主変数の組 (入力パラメーターセット) を構成する。変数 x_j に対する i 番目のサンプルを x_{ij} とすれば、

$$x_{ij} = F_j^{-1}\left(\frac{\pi_{ij} - U_{ij}}{n}\right) = \frac{\pi_{ij} - 1}{n} + \frac{U_{ij}}{n} \quad (1)$$

と表される。ここで、 U_{ij} は $U(0,1)$ の一様乱数であり、 $\{\pi_{ij}, \dots, \pi_{nj}\}$ は $\{1, \dots, n\}$ のランダムな並び替えである。

LHS で発生させた主変数の組それぞれに対して目的関数を計算し、各主変数の累積分布関数を更新することを一つのステップとする。ILHS では、このステップを複数回繰り返すことで最適解の探索を行う。Fig. 1 に $d=2, n=5$ とした場合の ILHS の概念図を示す⁹⁾。 t 回目のステップにおいて、二つの主変数 x_1 と x_2 の累積分布関数から分割点 $F_j^{-1}(i/n)$ ($i=0, \dots, n$)、ならびに主変数の組 $X_i = \{x_{i1}, \dots, x_{id}\}$ ($i=0, \dots, n$) を得る (Fig. 1 左

Fig. 1 Schematic of Iterative Latin Hypercube Sampling⁹⁾

上)。 X_i は $\pi_{j=1}^d [x_{ij}^-, x_{ij}^+]$ ($i=1, \dots, n$) で囲まれる超立方体の内部に存在する。ここで、区間の下限 x_{ij}^- と上限 x_{ij}^+ は、

$$x_{ij}^- = F_j^{-1}\left(\frac{\pi_{ij}-1}{n}\right), x_{ij}^+ = F_j^{-1}\left(\frac{\pi_{ij}}{n}\right) \quad (2)$$

で表される。次に、各パラメーターセットに対して目的関数を計算する。目的関数を g_j とすれば、

$$g_j = g(X_i) \quad (3)$$

である。このとき、小さな目的関数の値を持つ区間ほど、最適解が存在する可能性が高いと考えられる。そこで、目的関数の値の大小に応じて各主変数の組が存在する領域 $\pi_{j=1}^d [x_{ij}^-, x_{ij}^+]$ ($i=1, \dots, n$) の重み付けを行い、 $(t+1)$ 回目のステップでの累積分布関数を更新する (Fig. 1 右下)。重み付けには次の Zipf の法則を用いる。

$$\omega_i = \frac{1}{Z} r_i^{-\gamma} \quad (4)$$

r_i は n 個の目的関数の値の中における g_i の順位を表している。 γ は $(0, 1)$ の任意の値をとる重み付け指数で、 γ の値が 1 に近いほど最適化計算の収束は速くなる。 Z は正規化定数であり、

$$Z = \sum_{i=1}^n r_i^{-\gamma} \quad (5)$$

によって計算される。Eq. (4) により、目的関数の順位 r_i の小さい領域ほど大きい重みを与えられることになる。また ω_i は目的関数の大小関係にのみ依存し、そのスケールには依存しない。そのため ILHS では、各 g_i 間の差が小さい場合でも、最適解への収束性が担保される。

メタヒューリスティクスの解探索の過程は、解探索の集中化と多様化という過程に分けてとらえることができる。前者は、それまでの解探索によって得られた局所的最適解の近傍を集中的に探索することを指し、後者は局所的最適解近傍よりもより広い領域を大域的に探索することを指す。これら二つのプロセ

スとはトレード・オフの関係にあり、メタヒューリスティクスの解探索戦略において、両者のバランスをとることが重要であるとされる。過度の多様化は最適解への収束を阻害する一方で、過度の集中化は局所解への収束を引き起こしやすい。ILHS においては、LHS に基づくランダムサンプリングが多様化、累積分布関数の更新によるサンプル領域の設定が集中化に相当する。

多点探索法では、解探索の多様化プロセスを何らかの乱数を用いて表現することが多い。したがって、1 回の独立試行内で繰り返し計算の回数を増加させたとしても、大域的最適解が得られるという保証はなく、解の探索には初期条件の異なる複数の独立試行が必要である。このことは評価回数の増大を意味するため、計算時間の制約がある場合には十分な解探索が行われないまま解探索が終了する可能性がある。

2.3. 情報の定量的尺度としてのエントロピー

本節では、3 章で述べる収束判定基準を設定するのに必要なエントロピーと2値エントロピー関数 (BEF: Binary Entropy Function) について概説する。

まず、ある事象 A の起こりうる確率を p とし、事象 A の自己情報量 $I(A)$ について Eq. (6) で定義する:

$$I(A) = -\log_2 p \quad (6)$$

自己情報量の特徴として、独立な事象 A と B が同時に起きた場合の自己情報量 $I(AB)$ は、それぞれの自己情報量の和となる (情報量の加法性):

$$I(AB) = I(A) + I(B) \quad (7)$$

次に、有限集合 U 上の値を取る離散確率変数 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ が、確率分布 $P = (p_1, p_2, \dots, p_n)$ に従う場合、自己情報量の期待値は以下のように与えられる:

$$H(X) = -\sum_{x \in U} P(X) \log P(X) = -\sum_{i=1}^n p_i \log_2 p_i \quad (8)$$

$H(X)$ を平均情報量、もしくはエントロピーと呼ぶ。ただし、 $0 \log_2 0 = 0$ とする。 $H(X)$ は全ての i について p_i が等しいとき最大となる。また、 $n=2$ のときのエントロピーを特に2値エントロピー関数と呼ぶ:

$$H_b(p) = -p \log_2 p - (1-p) \log_2 (1-p) \quad (9)$$

次章では、上記のエントロピーと BEF を用いて、多点探索法の収束判定法を提案する。

3. 多点探索法の収束判定

3.1. 最適化手法の収束判定基準

最適化手法による解探索の収束は、一般に以下の三つの基準により判定される。

- 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。加えて、解の探索が十分に行われ、指定した回数以前に大域的最適解が得られた場合には、それ以降の計算は計算

効率の低下を招く。基準 II については、大域的最適解は未知であるため、目的関数の値がそれ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。

多点探索法において、基準 III が設定されることは少ないものの、PSO に限ればサンプル点の変動係数を用いた基準が提案されている (楨野ら, 2013)¹¹⁾。多点探索法では、始めに大域的探索が行われるが、解探索の進展に伴い局所的探索が支配的となる。特に、PSO では解探索の収束に伴ってサンプル点の運動量が低下するため、徐々に最適解近傍でのみ探索が行われることになる。楨野らの基準は、目的関数の値からではなく、サンプル点の分布から収束を判定する点で多点探索法の解探索の特徴を反映しており、基準 II のような目的関数の値から収束を判断する基準よりも合理的であると言える。

3.2. 正規化エントロピーを用いた収束判定法

ILHS では、最適化計算が進むに従って、Eq. (4) に基づき順位 r_i の低い区間の距離は減少し、逆に高い区間で増加する。ただし、各区間から LHS に基づくサンプリングを行うため、PSO や DE といった他の多点探索法のように、全てのサンプル点が最適解近傍に集中するということはない。したがって、前述の基準のように、サンプル点間の変動係数の変化から最適化計算の収束を判断することは難しい。

多点探索法の一つ、蟻コロニー最適化手法 (ACO: Ant Colony Optimization) では、解探索にエントロピーを用いている。ACO は、巡回セールスマン問題等に有効な最適化手法であり、フェロモン濃度という探索結果の評価値を更新することで過去の探索情報を蓄積していく。その際、フェロモン濃度の分布状況を評価する指標として正規化エントロピーが用いられる。

この正規化エントロピーの概念を ILHS についても設定する。ILHS ではサンプル区間の距離が過去の目的関数の値を反映していることから、区間距離が ACO におけるフェロモンに相当する役割を担っていると考えられる。ここで、主変数の累積分布関数の正規化エントロピーを Eq. (10) で定義する:

$$\eta(n, j) = -\sum_{i=1}^n \frac{l_{ij} \log_2 l_{ij}}{\log_2 n} \quad (10)$$

l_{ij} は区間 $[x_{ij}^-, x_{ij}^+]$ の距離である。Eq. (10) はエントロピーを $\log_2 n$ で除することで値の正規化を行っている。

解探索初期は l_{ij} の値が各区間で等しいため、 $\eta(n, j)$ は最大値 1 をとる。解の探索が進むに従い、正規化エントロピーの値は減少し一定値に収束すると考えられる。ここで、

$$\lim_{x \rightarrow 0} x \log x = 0 \quad (11)$$

より、解探索が十分に進み、主変数 x_j が $x_j = x_{j, \text{opt}}$ に収束したと仮定すれば、エントロピーは前述の BEF で表すことができる。

$$H_b(x_{j, \text{opt}}) = -x_{j, \text{opt}} \log_2 x_{j, \text{opt}} - (1 - x_{j, \text{opt}}) \log_2 (1 - x_{j, \text{opt}}) \quad (12)$$

これを正規化すれば、

$$\eta_b(n, j) = \frac{H_b(x_{j, \text{opt}})}{\log_2 n} \quad (13)$$

となる。**Fig. 2** に $x_{j, \text{opt}}$ を変化させたときの η_b の値を示す。図中の n_{pop} はサンプルサイズを意味し、サンプルサイズが大きく

なるほど、 η_b の値は小さくなる事が分かる。 $n=2$ のとき η_b は BEF に等しく、 $x_{opt}=(1-x_{opt})$ 、すなわち $x_{opt}=0.5$ のとき、BEF は最大値 1 をとる。

ここで、正規化エントロピーと正規化された BEF との差 $d\eta(n, j)$ を定義する。

$$d\eta(n, j) = \eta(n, j) - \eta_b(n, j) \quad (14)$$

解探索が進むに従って、 $\eta(n, j)$ は $\eta_b(n, j)$ に近づく。つまり、 $d\eta(n, j)$ は 0 に収束する。本研究では、全ての主変数 x_j について $d\eta(n, j)$ を計算し、 $d\eta(n, j)$ がある閾値 (いきち) $d\eta_{min}(n, j)$ に到達したとき、解探索が収束したとみなして、最適化計算を打ち切ることとする。本基準は ILHS での利用を念頭に置いたものであるものの、サンプル区間の設定がないような他の多点探索法でも、サンプル点間の中点を分割点とすることで適用が可能である。

Fig. 2 Normalized Binary Entropy Function

4. ILHS を用いた坑井配置の最適化

正規化エントロピーに着目した提案法の効果を、二つ (ケース 1, 2) の CO_2 地中貯留における坑井配置の最適化問題によって検証する。

4.1. 問題設定

二つの最適化問題に共通する事項を以下に述べる。地層モデルは上下を不透水層に囲まれた不均質な地層を設定した (Fig. 3)。水平方向に $2 \text{ km} \times 2 \text{ km}$ 、深度 $800 \sim 1300 \text{ m}$ の領域に年間 78.8 万 t の CO_2 を 30 年間圧入する。水平境界は圧力が一定とし、領域外への CO_2 の流出は許す。坑底圧が設定した最大値に達した場合、 CO_2 の圧入を停止する。孔隙率は 0.3 で一定、浸透率は不均質とし、平均浸透率が 100 md となるように設定した。相対浸透率は、Drainage 過程では van Genuchten モデル¹²⁾、Imbibition 過程では Land モデル¹³⁾ に従うものとし、不動水飽和率を 0.20、臨界ガス飽和率を 0.05、モデル乗数 0.88、最大残留ガス飽和率を 0.30 とした。

目的関数は圧入開始 100 年後における可動 CO_2 の質量割合とする。

$$g = \frac{m_{\text{movable}}}{m_{\text{total}}} = 1 - \left(\frac{m_{\text{residual}} + m_{\text{dissolved}}}{m_{\text{total}}} \right) \quad (15)$$

m_{total} は設定された圧入総量であり、 m_{movable} 、 m_{residual} 、 $m_{\text{dissolved}}$ はそれぞれ圧入から 100 年後の可動 CO_2 、残留トラップ CO_2 、溶解トラップ CO_2 の質量を表す。坑底圧の制限により圧入されなかった CO_2 、および領域外に流出した CO_2 は可動 CO_2 として計算する。

貯留層シミュレーションには、TOUGH2/ECO2N (Pruess *et al.*, 1999¹⁴⁾, Pruess, 2005¹⁵⁾) を用いた。計算コードは一部 GPU を使用するように改良されており、CPU のみを用いる場合よりも短時間での計算が可能である (Ishizawa *et al.*, 2013)¹⁶⁾。

TOUGH2/ECO2N では、各タイムステップで収束までに要した計算回数を基に、次のタイムステップ幅を変更するアルゴリズムが用いられている。このアルゴリズムを、圧力やガス飽和度といった主変数の変化量に応じて、変更できるように修正した。この修正により、主変数の変化量が大きい圧入開始直後で

Fig. 3 Over Head View of Reservoir Model

は収束性の向上が、変化量の小さい圧入終了後は計算時間の短縮が可能となっている¹⁷⁾。

各計算ステップにおいて $d\eta(n, j)$ を求め、解探索の収束を評価する。ここで、 n は ILHS によって発生させるサンプル数 n_{pop} に等しい。本計算例における解探索の収束判定基準を以下に示す。

- i. 繰り返し計算の回数 n_{iter} が $n_{\text{iter, max}}$ に達したとき
- ii. 全ての主変数 x_i に対して、 $d\eta(n, j) \leq d\eta_{\text{min}}(n, j)$ を満たすとき

基準 i は一般的に設定される基準で、基準 ii は本研究で新規に導入した基準であり、それぞれ 3. 1. での基準 I, III に相当する。本計算例では $n_{\text{iter, max}} = 100$ 、 $d\eta_{\text{min}}(n, j) = 0.01$ とした。水平坑井の方向は、1, 2 の 2 値で表されるダミー変数として扱う。ダミー変数は連続変数や離散変数とは異なる収束挙動を示すため、 $d\eta_{\text{min}}(n, j) = 0.05$ と設定している。次節以降では、基準 i のみを設定した場合と、基準 i に加えて基準 ii を設定した場合について目的関数の値を比較し、基準 ii を用いることの有効性を検証する。

4.2. 2坑井による CO₂ 圧入

ケース 1 では、2 本の垂直坑井から CO₂ を貯留層に圧入することを考える。主変数ベクトル X は、

$$X = [x_{w,1}, y_{w,1}, x_{w,2}, y_{w,2}, q_{\text{inj},1}]^T \quad (16)$$

と表される。ここで、 $x_{w,i}$, $y_{w,i}$ および $q_{\text{inj},i}$ はそれぞれ坑井 i の x , y 座標と CO₂ の圧入レートである。本計算例では坑底圧が設定した最大圧に達しない限り CO₂ 圧入量 $q_{\text{inj},\text{total}}$ は一定の値をとる。したがって、坑井 2 の圧入レート $q_{\text{inj},2}$ は、

$$q_{\text{inj},2} = q_{\text{inj},\text{total}} - q_{\text{inj},1} \quad (17)$$

で表される従属変数となる。

ILHS で発生させるサンプル数 n_{pop} は事前に行った感度分析から決定した。主変数 X の次元を d としたとき、サンプル数が d から $2d$ の間で効率的な解探索が行われたことから、本ケースでは $n_{\text{pop}} = 2d = 10$ としている。同様に感度分析から、Eq. (4) 中の重み付けの指数は $\gamma = 0.839$ を用いた。関数評価回数 $FES (= n_{\text{pop}} \times n_{\text{iter, max}})$ は最大で 1000 回である。

独立した 5 回の試行について、得られた目的関数の値の変化を Fig. 4 に示す。5 回の試行中 3 回で、条件 i よりも先に条件 ii を満たした (Fig. 4 の Run 2, 4, 5 上の × 印)。そのときの計算ステップ数は、試行 2, 4, 5 においてそれぞれ $n_{\text{iter}} = 70, 67, 61$ であった。試行 4, 5 では、基準 ii を満たして以降も計算終了まで目的関数の値は更新されていない。それに対して試行 2 では、エントロピーの収束以降に目的関数の値が更新されている。しかしながら、試行 2 では $n_{\text{iter}} = 100$ においても目的関数の値は五つの試行中で最も高いため、最適解を導く可能性は低く、逆に早い段階で最適解の候補から排除できているといえる。前述の通り、繰り返し計算の進行に伴い、解探索の集中化、つまり最適解近傍の局所探索が多く行われるようになる。ただし、ILHS はランダムサンプリングに基づく手法であるため、必ずしも効率的な局所探索が行われるわけではない。そのため、解探索が十分に進み、サンプル区間がほぼ固定化されていくに従い、目的関数の大幅な更新は徐々に難しくなる。結果として、

Fig. 4 Convergence Behavior of Objective Function Value with Criteria Depend on Normalized Entropy in Case 1

最適解となる可能性が低い試行は収束判定基準に則って打ち切り、異なる初期条件で新たな試行を行う方が全体として効率的である。

目的関数の値が最も小さい試行 4 について、正規化した主変数、および $d\eta(n, j)$ の値の変化を示す (Fig. 5)。 $d\eta(n, j)$ の値はサンプル区間の幅が変化することで大きく上下するため (Fig. 5(a)), 最小値のみを別に抽出した (Fig. 5(b))。繰り返し計算初期で $d\eta(n, j)$ は急激に減少し、 $n_{\text{iter}} = 30$ 以降は徐々に 0 に近い値に収束することが分かる。この傾向は他の試行でも同様であった。主変数 (Fig. 5(c)), および目的関数の値 (Fig. 4) に着目すると、 $n_{\text{iter}} \geq 67$ で一定値を保っていることが分かる。したがって、3. 1. で述べた収束判定条件 II のように、目的関数の値から解探索の収束を判定することが考えられる。しかしながら、目的関数の値は $n_{\text{iter}} < 67$ でも 10 ステップ以上更新されおらず、必ずしも解探索の収束の度合いを表しているとはいえないため、目的関数の値は収束判定の基準としてはやはり適切ではない。加えて、試行 4 に限って $n_{\text{iter}} = 300$ まで計算を行ったところ、これ以上の目的関数値の改善は見られなかった。このことから、正規化エントロピーが解探索の収束を判定する指標となり得ることが示唆される。

条件 ii 導入前後で、FES と目的関数の値の変化を Table 1 に示す。全体として計算回数は 80 % 程度まで減少し、得られた目的関数値の差は 1 % 未満であった。本ケースの計算結果から、提案した基準は最適化計算の収束を判定する際に有効であると言える。

4.3. 2坑井による CO₂ 圧入と塩水の生産

次に、2 本の水平坑井から貯留層に CO₂ を圧入し、1 本の垂直坑井から塩水を生産した場合の坑井配置の最適化問題について考える (ケース 2)。水平坑井と帯水層中の塩水を生産することで、貯留層内の圧力低減やトラップ量の増加が期待できる。主変数ベクトル X は、

$$X = [x_{w,1}, y_{w,1}, x_{w,2}, y_{w,2}, x_{wp}, y_{wp}, q_{\text{inj},1}, i_{\text{dir},1}, i_{\text{dir},2}]^T \quad (18)$$

Fig. 5 Convergence Behavior of Difference between Normalized Entropy and Normalized BEF for Five Primary Variables: (a) values in each iteration step, (b) minimum values in each iteration step and (c) normalized primary variables

Table 1 The Number of Function Evaluations and Optimum with the Presence or Absence of Criterion II in Case 1

Run	Criterion I		Criterion I and II	
	FES	Optimum	FES	Optimum
1	1000	0.34409	1000	0.34409
2	1000	0.35293	700	0.36073
3	1000	0.33083	1000	0.33083
4	1000	0.32270	670	0.32290
5	1000	0.33582	610	0.33582
Total	5000	Best	3980	Best
		0.32270		0.32290

と表される。ここで、 $x_{wi,i}$, $y_{wi,i}$ は圧入井 i の始点の x, y 座標, x_{wp} , y_{wp} は生産井の x, y 座標, $i_{dir,i}$ は圧入井 i の方向である。 $i_{dir,i}$ は 1 または 2 の値を取る 2 値変数とし, それぞれ x, y 方向を意味する。サンプル数 $n_{pop}=2d=18$, $FES=1800$ とした。

前節と同様に, ILHS を用いて 5 回の独立試行について最適化計算を行った。目的関数の値の変化を Fig. 6, 条件 ii 導入前後での FES と目的関数値の変化を Table 2 に示す。Table 2 から, 70 % 程度の計算回数で最適解を得ることに成功している。加えて, Fig. 6 より, エントロピー収束後はそれ以上の目的関数の値は改善されておらず, エントロピーが解探索の収束をうまく表していると言える。

本ケースではケース 1 と比較して主変数の数が増加したものの, 連続変数について正規化エントロピーの挙動には大きな違いはなく, 提案手法は最適化問題の次元に関わらず有効である。また, 本ケースは二つの 2 値変数を含んでいる。2 値変数のエントロピーは, 連続変数のそれと比較して収束までに時間を要するものの, $d\eta_{\min}(n, j)$ を適切に設定すれば連続変数と同様に収束を判定することが可能である。

最後に, 得られた最適解に関して, CO_2 の状態別経時変化を Fig. 7 に示す。ケース 2 の目的関数の値はケース 1 の 20 % 程度であり, トラップ CO_2 量, 特に溶解トラップ量が増加した。これは水平坑井の導入により, CO_2 と地層水との接触面積が増加したことによるものと考えられる。したがって, 安定的な

Fig. 6 Convergence Behavior of Objective Function Value with Criteria Depend on Normalized Entropy in Case 2

Table 2 Number of Function Evaluations and Optimum with the Presence or Absence of Criterion II in Case 2

Run	Criterion I			Criterion I and II		
	<i>FES</i>		Optimum	<i>FES</i>		Optimum
1	1800		0.26664	1152		0.26664
2	1800		0.25647	1116		0.25657
3	1800		0.25227	486		0.25227
4	1800		0.25276	1800		0.25276
5	1800		0.26081	1800		0.26081
	Total	9000	Best 0.25227	Total	6354	Best 0.25227

Fig. 7 Time Series Data of CO₂ Amount in Cases 1 and 2

CO₂の地下貯留を目指す上で、水平坑井の利用は効果的だといえる。

5. 結 言

多点探索法の一つ、繰り返しラテン超方格法 (ILHS) を対象として、正規化エントロピー、および2値エントロピー関数を用いた収束の判定基準を提案し、CO₂地中貯留における坑井配置の最適化問題について提案基準を適用した。

最適化計算の結果から、目的関数の値を維持しつつ、計算回数を低減できることを示し、基準の有効性を確認した。提案基準により、目的関数の評価に時間を要する最適化計算を効率的に行うことができる。

また、水平坑井、および地層水の生産がトラップ CO₂ 量の増加に寄与するという知見を得た。提案基準は ILHS だけでなく、他の多点探索法に対しても適用できる可能性があり、今後の検討を要する。

Nomenclatures

d	: dimension of the objective function
$d\eta$	: difference between the normalized entropy and the normalized BEF
FES	: number of function evaluations
g_j	: objective function for the set of primary variables, X_i
H	: entropy
H_b	: binary entropy function (BEF)
I	: self-information
$i_{dir,i}$	: direction of the i -th injection well

l_{ij}	: length of the sample space
$m_{dissolved}$	: mass of dissolved CO ₂
$m_{movable}$	: mass of movable CO ₂
$m_{residual}$	: mass of residual CO ₂
m_{total}	: mass of CO ₂ planned to inject
n	: number of sample populations
n_{iter}	: number of iteration steps
n_{pop}	: number of sample populations
$q_{inj,i}$	: injection rate of the i -th well
r_i	: rank of the objective function, g_j
U_{ij}	: uniform random number
X_i	: i -th set of primary variables
x_j	: j -th primary variable
x_{ij}^-	: lower bound of the i -th sample for the j -th primary variable
x_{ij}^+	: upper bound of the i -th sample for the j -th primary variable
$x_{w,i}$ and $y_{w,i}$	: grid number of the i -th injection well
$x_{w,p}$ and $y_{w,p}$	: grid number of the i -th production well
Z	: normalizing constant
<Greeks>	
γ	: exponential constant for weights
η	: normalized entropy
η_b	: normalized binary entropy function
π_{ij}	: random permutation of $\{1, \dots, n\}$
ω_i	: weight of the i -th sample space

References

- 1) Oliver, D. S., Chen, Y., *Comput. Geosci.*, **15**, 185 (2011).
- 2) Kubo, M., Pedroso, J. P., "Metaheuristics: A Programming Guide," Kyoritsu Shuppan Co., Ltd., Tokyo (2009). 久保幹雄, J. P. ペドロソ, "メタヒューリスティクスの数理," 共立出版, 東京 (2009).
- 3) Kuramoto, D., *JOGMEC Oil and Gas Review*, **44**, (2), 61 (2010).
- 4) Beckner, B. L., Song, X., SPE Annual Conference and Exhibition, Dallas, Texas, 1995, Paper SPE 30650.
- 5) Onwunalu, J. E., Durllofsky, L. J., *Comput. Geosci.*, **14**, 183 (2009).
- 6) Nwankwor, E., Nager, A. K., Reid, D. C., *Comput. Geosci.*, **17**, 249 (2013).
- 7) Davidor, Y., *Foundations of Genetic Algorithms*, **1**, 23 (1991).
- 8) Goda, T., Sato, K., *J. Jpn. Assoc. Petrol. Tech.*, **76**, (3), 233 (2011).
- 9) Goda, T., Sato, K., *J. Petrol. Sci. Eng.*, **114**, 61 (2014).
- 10) McKay, M. D., Beckman, R. J., Conover, W. J., *Technometrics*, **21**, 239 (1979).
- 11) Makino, Y., Takahashi, T., Imai, J., Funabiki, S., *IEEE Trans. PE.*, **133**, (5), 488 (2013).
- 12) van Genuchten, M. T., *Soil. Sci. Soc.*, **44**, 892 (1980).
- 13) Land, C. S., *SPE J.*, **8**, 149 (1968).
- 14) Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G., TOUGH2 user's guide, version 2.0., Report LBNL-43134, Lawrence Berkley National Laboratory, Berkley (1999).

- 15) Pruess, K., ECO2N: A TOUGH2 Fluid property module for mixtures of water, NaCl and CO₂, Report LBNL-57952, Lawrence Berkley National Laboratory, Berkley (2005).
- 16) Ishizawa, Y., Matsumoto, K., Sato, K., Okatsu, K., Miyake, Y.,
Energy Procedia, **37**, 3764 (2013).
- 17) Tanaka, K., Jilcáez, J., Sato, K., *Energy Procedia*, **37**, 4591 (2013).

要 旨

繰り返しラテン超方格法における正規化エントロピーを利用した収束判定法の導入と CO₂地中貯留への適用

田中 啓, 佐藤 光三

東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻, 113-8656 東京都文京区本郷7-3-1

多点探索法の一つである繰り返しラテン超方格法 (ILHS) を対象として, 主変数の平均情報量 (エントロピー) を用いた収束判定基準を提案した。ILHS では解探索の進展に伴い, 主変数のサンプル区間の距離が最適解周辺で徐々に小さくなる。本研究ではこの特徴に着目し, サンプル区間のエントロピーを計算することで解探索の収束を評価した。具体的には, 正規化したエントロピーと2値エントロピー関数 (BEF) の差を計算

し, $d\eta$ が閾値 (いきち) を下回ったとき最適化計算を終了する。提案した収束判定基準を CO₂ 地中貯留における坑井配置の最適化問題に適用することで, その有効性を検証した。基準の導入により, 目的関数の値を維持しつつ, 評価回数を約 70 ~ 80 % まで低減することが可能となった。加えて, 収束挙動の異なる連続変数や2値変数を同時に含む最適化問題についても, 提案基準は有効であるという知見を得た。