

カーボンニュートラルおよびエネルギー転換に向けた地下ガス貯蔵のための マルチフィジックス情報活用型機械学習フレームワークの開発

研究代表者 VO, Thanh Hung
(理工学術院総合研究所 次席研究員)

1. 研究課題

既存の貯留層シミュレーションソフトウェア（例：CMG）を活用し、CO₂および水素ガスの地下貯蔵を対象としたデータ駆動型の数値シミュレーションモデルを構築した。まず、国内外の先行研究、レビュー論文、公開データセットを体系的に調査・整理し、対象層の代表的な地質条件、貯留層物性、流体物性、ならびに貯蔵メカニズム（溶解、残留、構造トラップ等）に関する知見をモデル設計へ反映した。次に、コア分析、室内実験、既存フィールドデータ等から得られる実験データ（孔隙率・浸透率・圧縮率、相対浸透率、毛管圧、残留ガス飽和、PVT／相挙動、必要に応じてコアフラッドおよび圧力応答データ）を収集・整備し、文献値との整合性を確認した上で入力パラメータの妥当範囲を定義した。

その上で、地質モデル（層構造・不均質性・断層の有無、格子設計）および運用条件（坑井配置、注入・生産制御、スケジュール、境界条件）を設定し、CMG上で多相流シミュレーションを実施した。得られたCMGの出力データ（圧力分布と時間変化、飽和度およびブルーム形状、注入性／供給能力、トラップ形態別の貯蔵量、マスバランス等）を解析し、実験データおよび観測・文献に基づく期待挙動と比較することで、ヒストリーマッチングおよびキャリブレーションを行った。さらに、相対浸透率端点、毛管圧、地層連結性、断層透過性、スキン等の不確実性が結果に与える影響を感度解析およびアンサンブル評価により定量化し、貯蔵容量、圧力上昇、漏洩リスク指標、運用制約（最大許容圧、圧力管理）に関する再現性と信頼性を高めた検証済みモデルとして整理した。

2. 主な研究成果

本研究では、実験データおよび文献知見に基づくデータベース整備と、機械学習・深層学習にメタヒューリスティクス最適化や不確実性評価（適用領域判定、再現性評価、解釈性解析）を統合することで、地下貯留層における状態推定・物性推定・プロセス性能予測を高精度化した。とくに、CO₂地中貯留に関する近年の機械学習応用動向を踏まえ、実験データから圧力・温度・塩分等の非線形関係を学習して重要パラメータ推定を高速化する方向性、さらにシミュレーション代替（サロゲート）による計算負荷低減の必要性を明確化した（図1）。

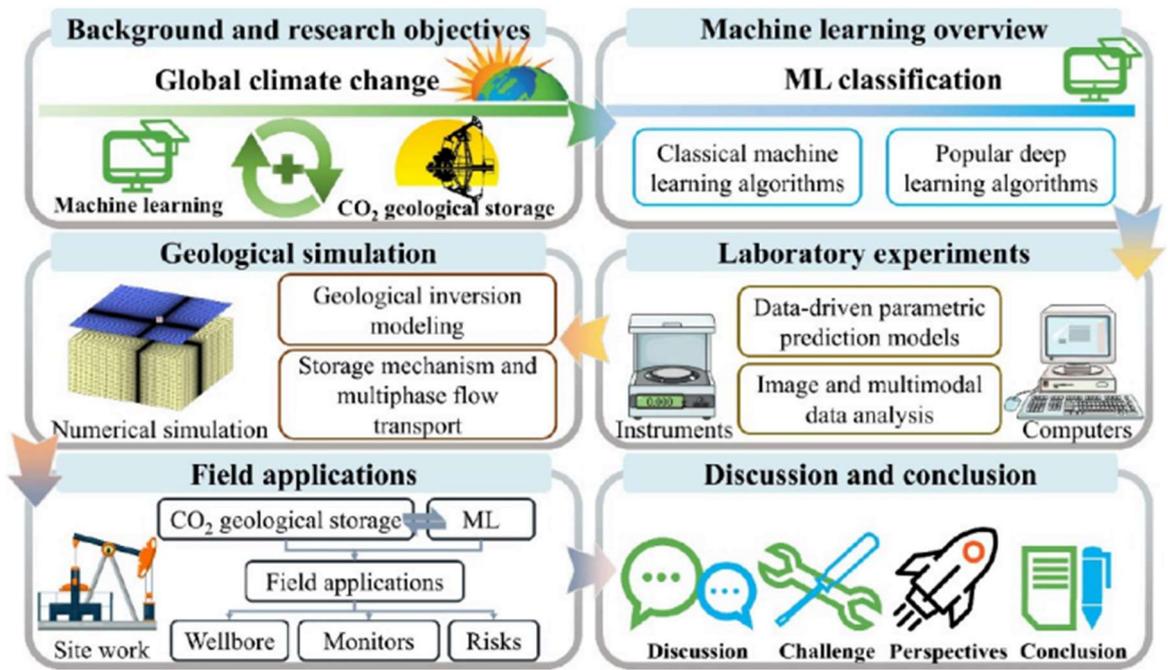


図1 機械学習駆動型CO₂地中貯留研究の全体像を示す概念図

第一に、地下貯留層の孔隙圧変化予測では、実験由来の岩石力学データを用い、LSSVM および MLPNN を単体モデルとして構築した上で、PSO および COA によりハイパーパラメータ最適化したハイブリッド枠組みを確立した。入力変数間の強い線形相関に対しては PCA を導入し、寄与の大きい主成分のみを採用することでモデルを簡素化しつつ汎化性能を確保した。さらに、学習データの分割（訓練・検証・テスト）を明示したうえで、最良モデル（LSSVM-COA）が RMSE を大幅に低減し、訓練・検証・テストの各フェーズで高い性能を示すことを確認した（図2）。

また、Williams プロットにより 99.58%が適用領域内であることを示し、外挿リスクを可視化した。

加えて、SHAP および Sobol 感度解析により、応力-ひずみデカップリングに対応する主成分（PC2）が予測分散の 100%を説明することを定量的に示し、モデルの“当たり方”を力学的解釈へ接続した。

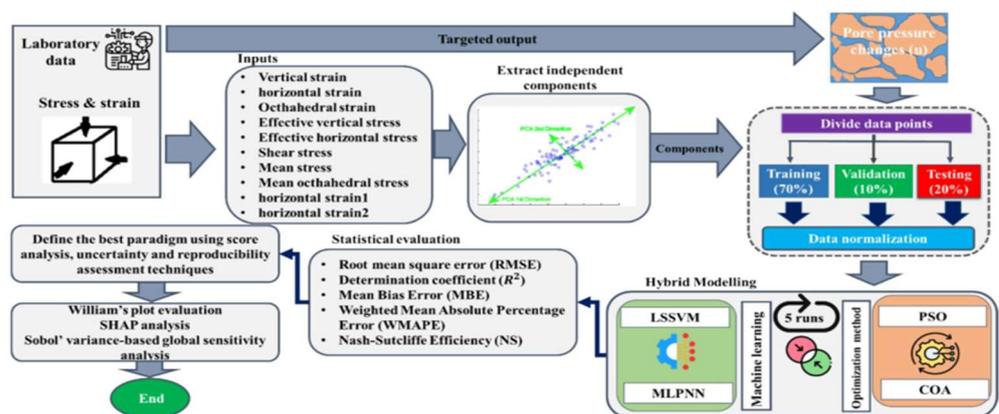


図2 孔隙圧変化 (u) 推定のためのハイブリッド機械学習×最適化フレームワーク

第二に、複雑系物性の高精度推定として、水活量 (Ionic liquid 系) および CO₂溶解度 (多様な塩水系) に対し、実験データを体系化し、ハイブリッド学習モデルを構築した。水活量推定では、データの相関構造 (相関ヒートマップ・ペアプロット) を整理しつつ、段階的なワークフロー (データ収集→前処理→モデル開発→評価) を確立し、ハイブリッド MELM-PSO が最良性能 (RMSE : train 0.0020, val 0.0028, test 0.0038) を達成した。

さらに SHAP により、MIL (ionic liquid のモル濃度) が最重要因子であることを示し、予測の解釈性を担保した。

CO₂溶解度推定では、3501 点の実験データを用い、LSTM と複数の最適化手法を統合した枠組みを提案し、前処理 (外れ値検出・データ分割・正規化) と再現性評価 (各アルゴリズムの複数回実行) を組み込んだ。

また、手法全体の流れ

(入力 : 温度・圧力・9 種塩の濃度→学習→不確実性評価→SHAP) を明示し、最良モデル (LSTM-COA) について SHAP に基づく因子寄与の可視化も行った。

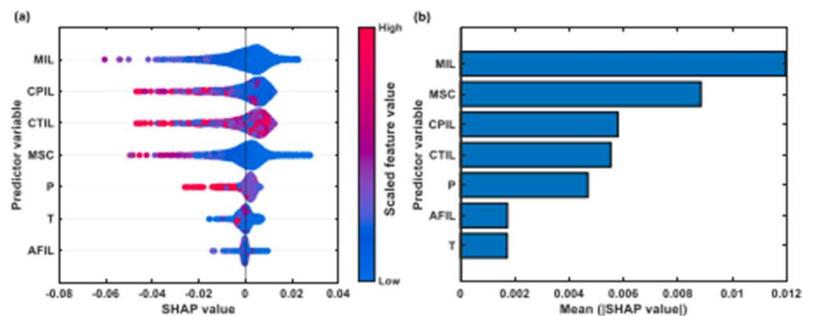


図 3 水活量予測モデルに対する SHAP 解析結果

第三に、地下構造の不確実性低減に向け、遺伝的アルゴリズム (GA) と深層学習 (DL) を逐次統合した多次元フラクチャネットワーク同定フレームワークを構築した。本枠組みでは、GA で生成した候補ネットワークを DL により追加学習・修正することで、GA 由来の確率的ばらつきを抑制し、2D ケースでは MSE 損失を初期状態に対して 61.3%低減し、その後 DL で 89%まで低減した。3D ケースでも、GA で 37.1%、DL で 68.3%の低減を達成し、同定の精度向上と不確実性縮減を両立させた。

さらに、現場データ由来の 2D/3D ケース適用、段階ごとの MSE 推移 (図 4) や観測井に沿ったアンサンブル分布 (Fig. 10) により、推定の改善プロセスを可視化した。

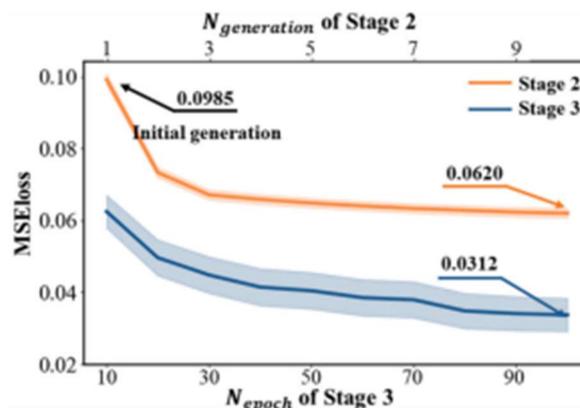


図 4 逐次フレームワーク (Stage 2 → Stage 3) におけるミスフィット (MSE Loss) の収束挙動

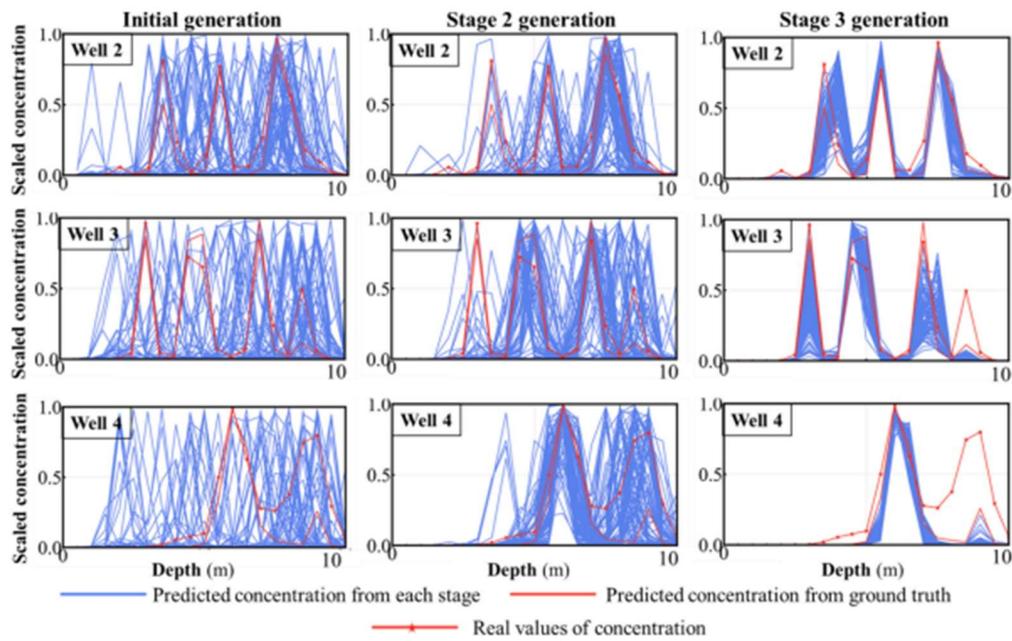


図5 観測井に沿った濃度分布アンサンブルの逐次改善

第四に、海洋ガスハイドレートにおけるCH₄回収率とCO₂貯留効率を対象として、文献由来の277件の実験レコードを品質管理（単位統一、重複排除、整合性チェック等）したうえで、CNN、LSTM、CNN-LSTMおよびアンサンブル学習器を比較するAI予測フレームワークを構築した。

その結果、CNN-LSTMが最良性能（R²>0.99、CH₄回収MSE≈0.230、CO₂貯留MSE≈0.449）を示し、CO₂貯留効率の推定でも高い精度を確認した。

さらに、CO₂貯留効率についてCNN-LSTMの訓練・試験RMSE/MAEおよびR²を整理し、最良モデルとして位置づけた。

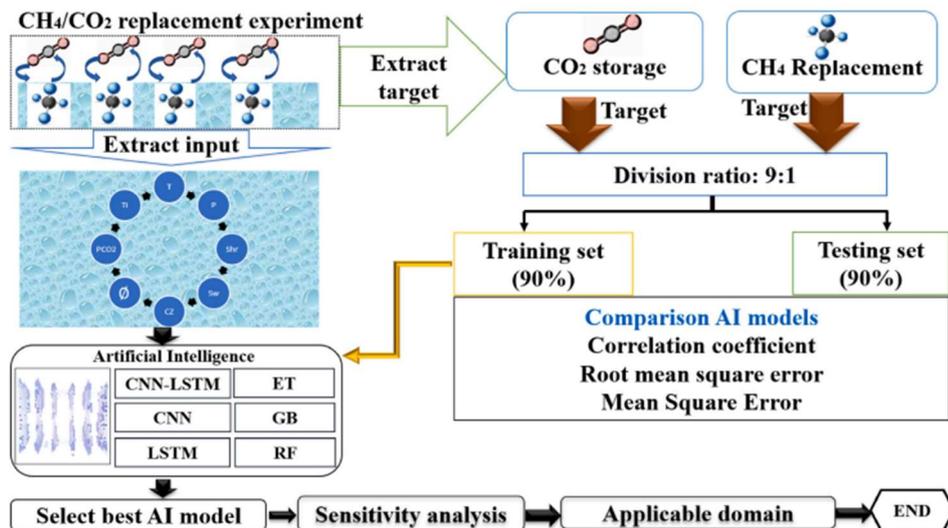


図6 CH₄/CO₂置換実験データに基づくCO₂貯留量およびCH₄置換（回収）予測のAIワークフロー概念図

感度解析では置換時間と初期メタンハイドレート飽和度が主要因子であることを示し、実験計画・運用設計へ直接つながる知見を提示した。

最後に、非在来型シェール貯留層のガス吸着（メタン吸着）に対して、352点の実験データに基づき、1D-CNNを中心とするデータ駆動モデルを構築し、 $R^2=0.9949$ 、 $RMSE=0.037$ （全データ）を達成した。

また、入力変数（圧力、TOC、水分、温度）を明示したワークフローを整備し、相関解析等を通じて水分とTOCが支配因子であることを示した。

これにより、吸着特性評価の効率化に加え、 CO_2 貯留サイト選定に資するスクリーニング指針を提示した。

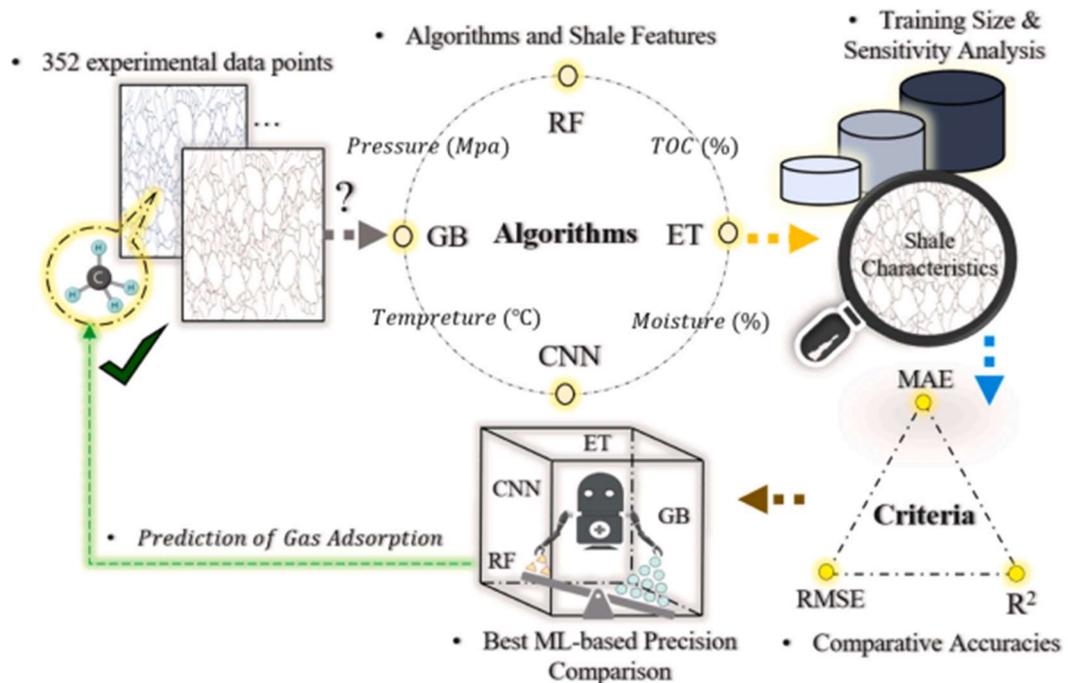


図7 シェール貯留層におけるガス吸着量予測のための機械学習フレームワーク概念図

3. 共同研究者

Professor Zhenxue Dai (Jilin University, China)

Professor Shahfar Davoodi (Tomsk Polytechnic University, Russia)

Professor Hemeng Zhang (Liaoning Technical University, China)

Professor Tao Zhang (Southwest Petroleum University, China)

4. 研究業績

4.1 学術論文

- (1) **Hung Vo Thanh***, Zhang, T., Dai, Z., Zhang, H., & Wang, Y. (2025). Artificial intelligence-driven forecast of methane recovery and CO_2 storage efficiency for carbon-neutral energy production from marine gas hydrates. *Energy*, 339. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.139141> (JCR Top 5% paper)

- (2) Davoodi, S., Longe, P. O., **Hung Vo Thanh**, Mehrad, M., Mohammadi, A. H., & Burnaev, E. (2025). Machine-learning models for predicting CO₂ solubility in various brine systems: implications for carbon geo-storage. *Journal of Molecular Liquids*, 435. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2025.128122>
- (3) Davoodi, S., **Hung Vo Thanh***, Vanovski, V., Wood, D. A., Al-Shargabi, M., & Mehrad, M. (2025). Hybrid machine-learning and optimization models for precise determination of pore pressure changes in subsurface reservoirs. *Computational Geosciences*, 29(6). <https://doi.org/10.1007/s10596-025-10387-1>
- (4) Davoodi, S., **Hung Vo Thanh***, Wood, D. A., Makarov, N., Mehrad, M., & Burnaev, E. (2025). Hybrid intelligent models for water activity prediction in complex ionic liquid systems. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 13(6). <https://doi.org/10.1016/j.jece.2025.120358>
- (5) Lin, K., Wei, N., Zhang, Y., Ali, M., Chen, Q., Wang, W., Song, Z., Yin, Y., & **Hung Vo Thanh**. (2025). Advances in Machine-Learning-Driven CO₂ Geological Storage: A Comprehensive Review and Outlook. In *Energy and Fuels* (Vol. 39, Number 28, pp. 13315–13343). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.5c02370>
- (6) Wang, Y., **Hung Vo Thanh***, Al-Mudhafar, W. J., Dai, Z., Hemeng, Z., Davoodi, S., & Zhang, T. (2025). Data driven based deep learning for optimizing carbon storage and methane adsorption in unconventional shale gas reservoirs. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 13(3). <https://doi.org/10.1016/j.jece.2025.116901>
- (7) Wang, Z., Dai, Z., Ling, H., Yin, S., Dong, S., Xia, Y., **Hung Vo Thanh***, Moeini, F., Soltanian, M. R., Ma, Y., & Wang, D. (2026). Sequential framework integrating genetic algorithm and deep learning for multi-dimension fracture network characterization and uncertainty reduction. *Journal of Hydrology*, 664. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2025.134530>

4.2 総説・著書

なし

4.3 招待講演

なし

4.4 受賞・表彰

2025年09月 世界で最も引用されている科学者の上位2%

2025年11月 地球科学技術に関する国際シンポジウム2025 地質貯留層におけるCO₂貯留挙動の時空間予測のための機械学習



図8 国際会議における受賞実績 (Best Conference Paper)

4.5 学会および社会的活動

(1) **Society of Petroleum Engineers (SPE)**—presented a paper at top conference in the field of data science

Deep Learning Driven Reservoir Simulation for Mapping Performance of CO₂-EOR and Storage in Tight Oil Reservoir

SPE Annual Technical Conference and Exhibition (ATCE), Houston, USA, 2025年10月

(2) **World CCUS**—presented a paper

Machine learning-informed reservoir simulation for performance mapping of CO₂-EOR and storage in the SACROC field

World CCUS Conference, Bergen, Norway 2025年9月

5. 研究活動の課題と展望

本研究では、実験データ・文献知見・数値シミュレーション結果（例：CMG）を統合し、機械学習／深層学習に最適化と不確実性評価を組み合わせた枠組みを構築した。一方で、実運用・社会実装に向けては、データの偏りや外挿リスク、モデルの説明可能性、再現性、さらに物理法則との整合性といった課題が残った。以下に主要な課題と今後の展望を整理する。

まず課題として、学習データの多様性と品質が予測性能と汎化性を支配した。実験条件や測定系の違い、単位・前処理の差異、欠測・外れ値の扱いはモデル性能に直接影響し、公開データのみでは地質条件（不均質性、断層・フラクチャ、相対浸透率のヒステリシス等）を十分に代表できない場合があった。今後は、データ仕様（メタデータ、測定条件、前処理手順）を標準化し、異なるデータ源を統合可能な形で整備することが重要となる。加えて、適用領域（Applicable domain）を定量的に示し、外挿を避ける運用ルールを明確化することで、モデルの信頼性を高める必要がある。

次に、精度向上と同時に説明可能性・意思決定可能性を担保することが課題となった。SHAPや感度解析により重要因子の可視化は可能であったが、現場の設計変数（注入レート、BHP制約、坑井配置、圧力管理）へ直接つながる“設計指針”として提示するには、解釈結果を物理メカニズム（圧力伝播、多相流トラップ、溶解、吸着、断裂連結性）と整合させた整理が必要である。今後は、説明可能 AI (XAI) を単なるランキングに留めず、物理量の保存則や境界条件、因果関係の仮説検証と結び付けて、設計判断に耐える根拠として提示することが求められる。

さらに、シミュレーション代替（サロゲート）と物理モデルの役割分担も重要な論点となった。深層学習は高速推定に有効である一方、極端条件や未学習条件では不安定化し得る。今後は、(i) 物理拘束（PINN/PINO、保存則ペナルティ、単調性・非負性制約等）の導入、(ii) 不確実性定量化（アンサンブル、ベイズ推定、分位予測）、(iii) 重要シナリオを優先的に学習するアクティブラーニング、を組み合わせ、速度と頑健性を両立したハイブリッドなデジタルツインへ発展させることが有望である。特に CCS/UHS では安全側評価が不可欠であるた

め、点推定だけでなく P10/P50/P90 などの信頼区間提示と、リスク指標（圧力上昇、漏洩確率、断層安定性）との連動が望まれる。

最後に展望として、実験・文献・数値シミュレーションに加え、モニタリングデータ（圧力、井戸試験、4D 地震、微小地震、地表変位等）を統合した“多モーダル学習”を推進することで、貯留挙動推定と不確実性縮減をさらに進められる。これにより、CO₂貯留効率や封じ込めの長期安全性評価だけでなく、水素貯蔵の保持性・供給能力、圧力管理を含む運用最適化までを一体化した意思決定支援が可能となる。今後は、公開ベンチマークを活用した再現性の高い検証、現場データとの接続、そして“安全・効率・コスト”を同時に扱う最適化へ展開し、実装可能な研究成果として社会的インパクトを高めていく。