

ニューラルネットの化学工学への応用

大江 修 造

(東京理科大学)

ニューラルネットの化学工学への応用

大江 修 造*

1. ニューラルネットとは

これまでの人工知能の手法とは異なったニューラルネット(neural network: 神経回路網)による方法が最近注目を浴びている。従来の人工知能の手法は、記号処理を中心とした逐次直列情報処理と言われる手法である。その手法では人間の論理的な思考の過程(判断)を、言語による情報の記号化を用いて、記号の組合せを規則としてコンピュータ上に構築している。

人間は、逐次直列型の記号により情報処理を実現しているが、それはその背後で莫大な量の並列情報処理が意識下で進行しているからである。人間が言語によりその概念を理解できるのは、単にその言語を同定しているのみならず、その内容も同時に理解していることによる。すなわち、人間は情報を逐次直列型と並列学習型の二つの方法で処理している¹⁾。

並列学習を実現するニューロコンピュータは、現実の脳の機能を解明した上で並列学習そのものの情報原理の追求により開発される方向にある。現状ではニューロコンピュータの開発は未だその途上にあり、並列学習の概念をニューラルネットとして現有のコンピュータ上でシミュレートしている段階にある。

2. ニューロンの働き

ニューロン(神経細胞)における情報の伝達は電気信号により行われることが解明されている。このことがコンピュータ上にニューラルネットを構築する上で大きな説得力になっている。一つのニューロン(神経細胞)は細胞体(本体)、樹状突起(入力部)、軸索(出力部)から構成される情報処理素子である。軸索は何本にも分岐して多数の他のニューロンに結合してニューラルネットを構成している。この結合部をシナプス(synapse)と呼ぶ。ニューロンは、 -70mV の電位を有しているが、 -55mV (しきい値)を越える入力信号により 30mV まで電位が上がり、その結果約 1ms 間 100mV のパルスを出す。これをニューロンが興奮したと言う。これが軸索を通して他のニューロンのシナプスに達し、入力信号となる²⁾。脳内の特定部所のニューロンは特定の機能を有しているから、特定部所のニューロンの興奮により特定の機能が実現される。例えば画像の認識などである。

ニューロンのモデル化はマッカロおよびピッツにより1943年に既に提出されている。ニューロンへの入力信号の総和がしきい値を越えると興奮して信号1を出力し、非興奮状態では0を出力するというモデルである。今日のニューロンのモデルの基本形である。1949年にはヘップがシナプス強化則を提案した。これはシナプスの結合強度は一樣ではなく、信号を伝えたシナプス結合の強度が

* Shuzo Ohe 東京理科大学工学部経営工学科 教授 工学博士

増し、認識・記憶の基となっている法則である。現在の学習則の基本となっている。

3. バックプロパゲーション法

ニューロンを最初に具体的な問題に適用したのは、ローゼンブラットの画像の認識に利用したパーセプトロンである(1962)。パーセプトロンは3層のニューロンで構成されている。多数の受光素子からなるS層(sensory unit)、やはり多数のニューロンからなるA層(association unit)および1個のニューロンからなるR層(response unit)で構成されている。A層およびR層の各ニューロンは一層前のニューロンの出力を強度による総和を行い、しきい値判定により0か1を出力する。この出力を検証して強度の修正を行い、正しい認識が得られるようにする。これを教師付き学習と呼ぶ。しかし、パーセプトロンは非線形分離能力を有さない複雑な図形認識には対応できない。

パーセプトロンにおける非線形分離問題を解決する方法として登場したのが、ルメルハートらにより1986年に提案されたバックプロパゲーションである。現在、最も広く用いられているニューラルネットにおける学習アルゴリズムである。バックプロパゲーションは、多層のニューラルネットにおいてパーセプトロンとは別の教師付き学習法を提案した方法である。

バックプロパゲーション法におけるニューラルネットを図1に示す。入力層と出力層の間に隠れ層と呼ばれる中間層を置く。中間層の数は複数に

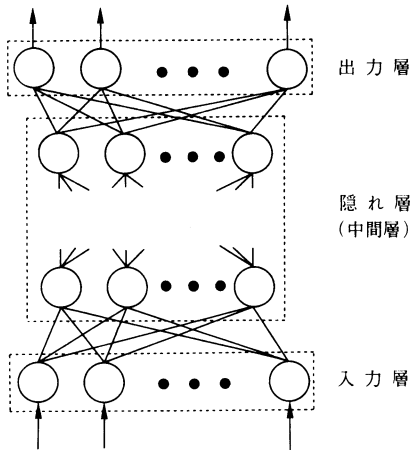


図1 典型的なニューラルネットの構造

する場合もある。各ユニットの出力には微分可能なシグモイド関数によるしきい値が使われる。入力層、中間層、出力層からなる3層の場合における学習法を述べる。学習は出力ユニットにおける出力値と真値との誤差により各層間の結合強度(重み)を修正する。修正は出力層と中間層との間の結合強度(重み)を修正し、さらに中間層と入力層との間の結合強度(重み)を修正する。各層間の学習において、学習の収束が保証されている二乗誤差を最小にする一般化デルタルールである最急降下法を用いる。

バックプロパゲーション法の重要な機能に連想機能がある。ここで連想機能とは、入力パターンに対する出力パターンを想起する能力である。入力パターンが不完全な場合でも近似的な出力パターンが得られるという点は利用価値が大きく、ニューラルネットをしてプログラムレスプログラムと言わしめる所似である。

4. バックプロパゲーションのアルゴリズム³⁾

ニューラルネットにおける第j番目のユニットへの全入力値 net_{pj} は(1)式に示すように、そのユニットに連結される全てのユニットの出力値に対応する重みを乗じた値の総和としきい値(θ_j)とにより得られる(図2参照)。

$$net_{pj} = \sum_i w_{ji} o_{pi} + \theta_j \tag{1}$$

ここに、 w_{ji} はi, j番目ユニット間の結合の重みの値であり、 o_i はユニットiの出力値である。

(2)式はシグモイド関数と呼ばれ、j番目のユニットの出力パターンを計算する伝達関数である(図3参照)。

$$o_{pj} = f(net_{pj}) = \frac{1}{1 + e^{-Bnet_{pj}}} \tag{2}$$

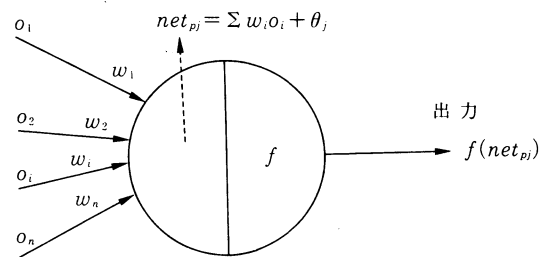


図2 ニューロンのモデル化(ユニット)

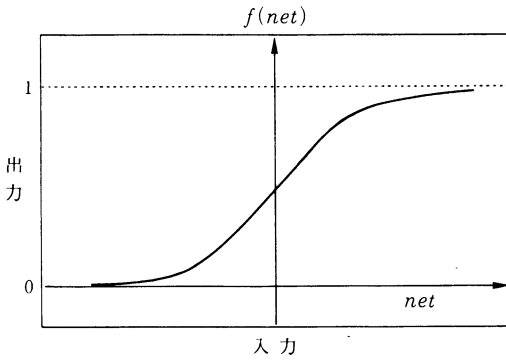


図3 しきい値関数(ジグモイド関数)

ここに、 B は $net_{pj}=0$ におけるシグモイド関数の傾きを示す定数項である。出力値 o_{pj} は次の層の各ユニットへの入力値となる。

ルメルハートは、入・出力のペア p における各結合の重みの修正は誤差信号 δ と出力信号 o との積に比例するとした。これを一般化デルタルールと言う。すなわち、

$$\Delta_p w_{ji} = \eta \delta_{pj} o_{pi} \quad (3)$$

ここに、 $\Delta_p w_{ji}$ は入・出力ペア p における j 番目から i 番目のユニット間の重みの変化量である。 $\delta_{pj} = t_{pj} - o_{pj}$ であり、 t_{pj} はパターン p における j 番目の教師信号である。 o_{pi} は入・出力ペア p における i 番目の出力パターンである。 η は定数である。

誤差信号の決定は出力ユニットから再帰的に行う。出力層の誤差信号は標準デルタルールに極めて似た形で(4)式により得られる。

$$\delta_{pj} = o_{pj} (1 - o_{pj}) (t_{pj} - o_{pj}) \quad (4)$$

隠れ層に対しては教師信号はないが、隠れ層の誤差信号は δ_{pj} 、隠れ層に結合している出力ユニットの誤差信号 δ_{pk} と重み w_{kj} を再帰的に用いて(5)式により決定する。

$$\delta_{pj} = o_{pj} (1 - o_{pj}) \sum \delta_{pk} w_{kj} \quad (5)$$

以上はバックプロパゲーション法の原理であるが、実際の学習に際しての計算法を次に示す。学習回数 n 回目から $(n+1)$ 回目の重みの変化量は(6)式による。

$$\Delta w_{ji}(n+1) = \eta \delta_{pj} o_{pi} + \alpha \Delta w_{ji}(n) \quad (6)$$

ここに、 η は既に(3)式の定数であることを示したが、学習効率と言われる。 α は過去加重に関する定数と呼ぶ。 η は学習における収束の速さに関係し、 α は収束の振動を抑える機能を有している。ここで、 $0 < \alpha < 1$ の実数値をとる。

5. 化学工学におけるニューラルネットの応用

ニューラルネットの有用性が次第に理解されて化学工学の各分野に応用されるようになった。以下に故障診断システムへの応用例2例と物性推算システムへの応用例1例を示して、化学工学の各分野への応用の可能性を示したい。

5.1 反応器の故障診断システム⁴⁾

反応器(図4参照)における故障箇所を制御器信号、反応器加熱器の温度、反応生成物の濃度を用いて診断するシステムである。故障箇所としては、1:触媒の劣化、2:反応器加熱器の汚れ、3:熱交換器の汚れ、4:原料供給ポンプ、5:加熱器用ポンプ、を取り上げている。反応器は制御器

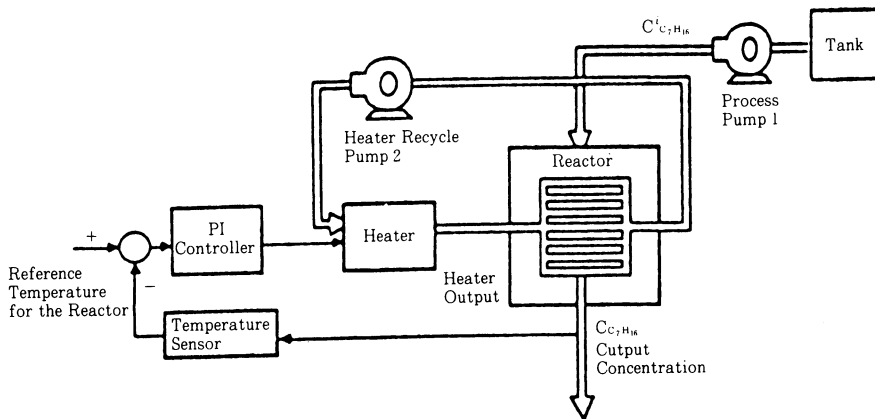


図4 反応プロセス⁴⁾

表1 反応器故障診断システムの学習用データ

故障 番号	入力パターン			出力パターン
	制御器 信号 [mV]	加熱器 温度 [K]	生成物 濃度 [gmol/m ³]	故障番号
1	219	885	498	1 0 0 0 0
2	240	906	524	0 1 0 0 0
3	248	889	524	0 0 1 0 0
4	212	878	550	0 0 0 1 0
5	201	889	524	0 0 0 0 1
(正常)	223	889	524	0 0 0 0 0

信号=223 mV, 反応器加熱器の温度=889K, 反応生成物の濃度=524gmol/m³である時, 正常な状態に有るとしている. 3層のニューラルネットにおいて, 入力パターン(3)として異常状態を, 出力パターン(5)として故障箇所を用いて学習を行わせている(表1参照). 中間層のユニット数は4であり, 学習回数は6000回である.

この学習の結果を応用して故障箇所の推定に対して適用して良好な結果を得ている. 次に同じニ

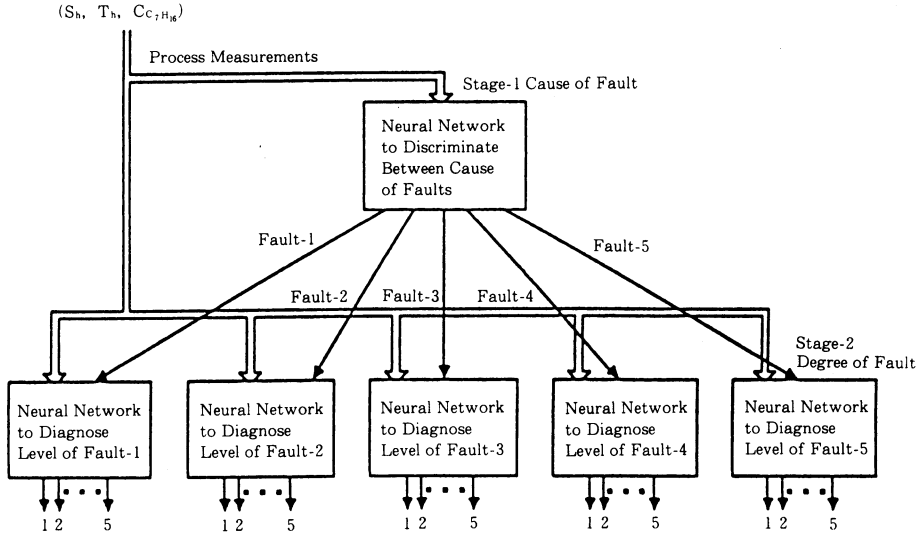


図5 ニューラルネットによる故障診断システム⁴⁾

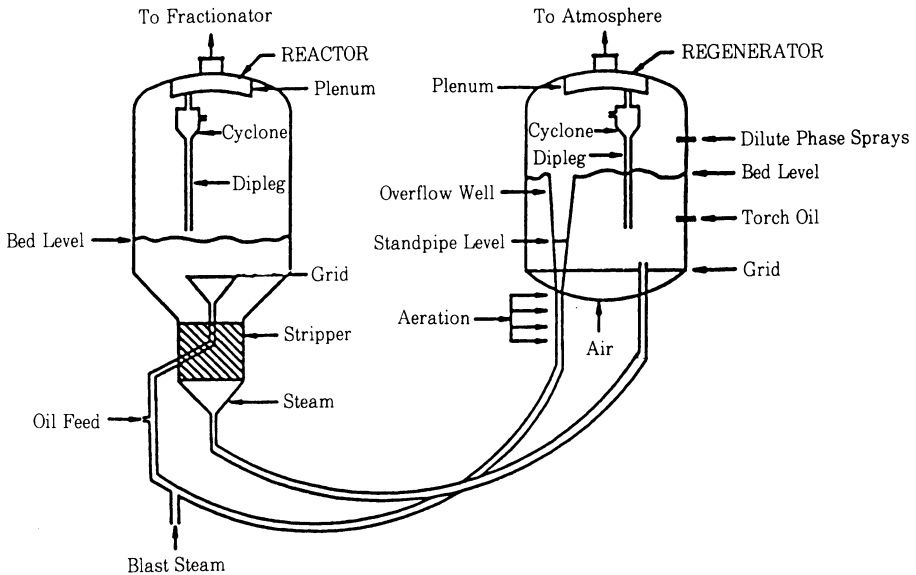


図6 流動接触分解装置⁵⁾

ニューラルネット構造を用いて、5段階の故障のレベルを学習させて良好な結果を得ている(図5参照).

5.2 流動接触分解装置の故障診断システム⁵⁾

流動接触分解装置(FCCU, 図6参照)における故障箇所を異非状態から診断するシステムである。故障箇所として3種類13箇所を取り上げ、異常状態として18箇所を取り上げている。故障箇所に対して異常状態は木構造を形成している(図7参照)。したがって、1つの故障箇所に対して複数の異常状態が発生する。3層のニューラルネットにおいて、入力パターンとして異常状態を、出力パター

ンとして故障箇所を用いて学習を行わせている。中間層のユニット数を5から27まで換えて学習させているが、27の場合が最も良い結果となっている。学習回数は8000回である。

この学習の結果を複数の故障箇所に対応する異常状態の発生に対して適用して良好な結果を得ている。すなわち、ニューラルネットの連想能力が確認されている。

5.3 ニューラルネットによる臨界定数の推算⁶⁾

バックプロパゲーション法における関数の連続性の汎化能力を用いると複数の要因が影響を及ぼ

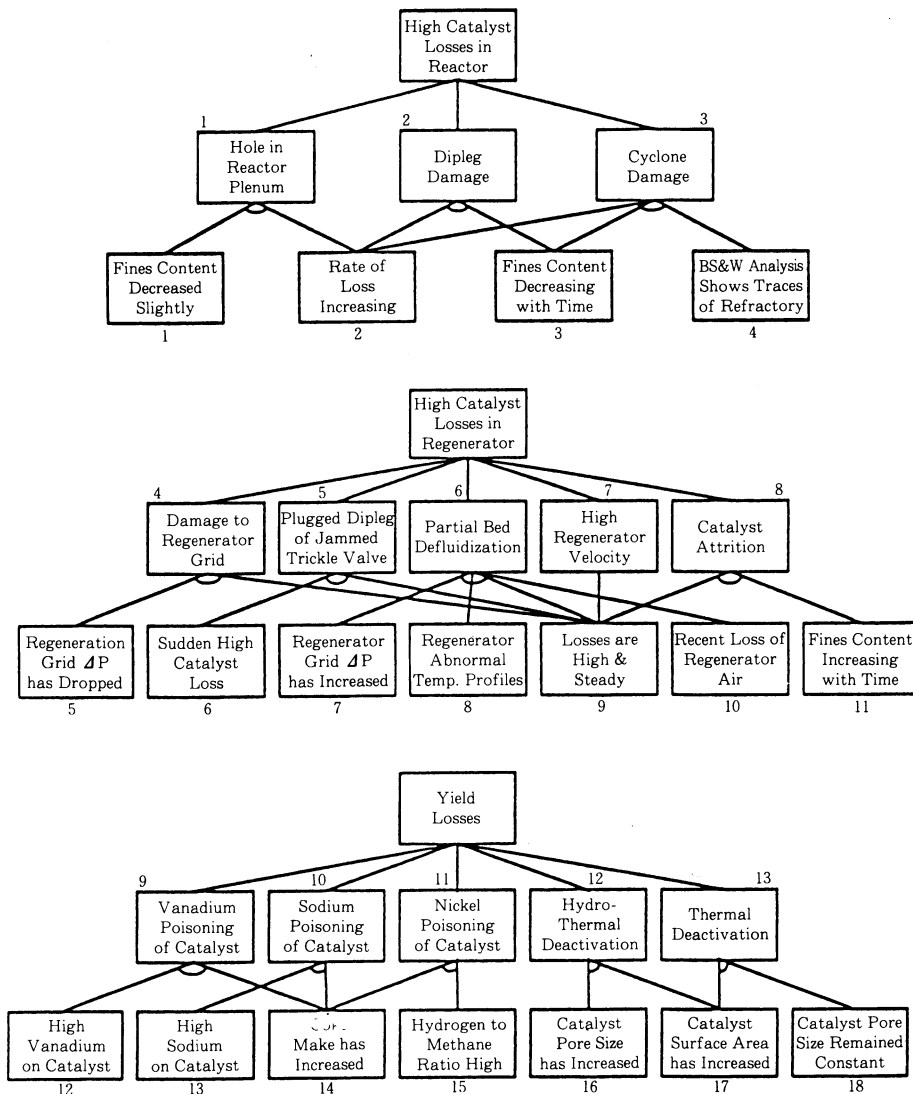


図7 流動接触分解装置における故障とその原因⁵⁾

す非線形の問題を解明することができるので、臨界温度の推算に応用できる。炭化水素の臨界温度と炭素数、分子量、沸点、偏心因子との間には相関関係のあることが知られている。そこで、推算に利用する物質の炭素数、分子量、沸点、偏心因子⁷⁾をニューラルネットの入力層に与え、臨界温度を出力層から得る。

バックプロパゲーション法を用いて臨界温度の推算法を確立する方法を以下に述べる。

- (1) 予め推算する物質を含むデータを用いて、ニューラルネットの中間層のユニット数を学習により決定する。
- (2) 推算する物質を除いたデータを用いて、(1)で決定した中間層のユニット数により誤差が十分に小さくなるまで学習する。
- (3) 学習の済んだニューラルネットの入力層に、推算する物質の炭素数、分子量、沸点、偏心因子を与え、出力層から臨界温度の推算値を得る。3層のニューラルネットを用いた。中間層におけるユニット数を2から9まで変えて学習させた結果、学習誤差および計算時間を考慮してユニット数としては4を採用した。学習効率および過去加重に関する定数は0.7および0.8とした。

直鎖の炭化水素19種、および二重結合を1つ含む炭化水素16種からなる35種の炭化水素に対する入力パターンを10万回ニューラルネットに呈示して学習させた結果、学習誤差の自乗の合計値は

0.090と良好であった。さらに詳細に見ると、35種の炭化水素に対して平均誤差は0.240%であった。19種のパラフィンについては0.182%であり、16種のオレフィンについては0.308%であった。

学習の済んだニューラルネットによる臨界温度の推算の結果は、35種の炭化水素について絶対誤差は最大、最小および平均で、それぞれ3.722, -0.011, 0.389%であった。これに対して、従来のライダーセンの方法により結果は、それぞれ-1.814, -0.055, 0.589%であり、従来の推算法に対してニューラルネットによる方法は遜色のない結果となった。

引用文献

- 1) 甘利俊一：CICSJ Bulletin, Vol. 9, No. 1, pp. 2 ~ 5 (1991)
- 2) 今堀宏三編：「ライフサイエンス入門」, pp. 42~48 (1983)
- 3) Rumelhart, D. E., McClelland, J. L., PDP Research Group : "Parallel Distributed Processing", Vol. 1, pp. 318~330, MIT Press, Cambridge (1986)
- 4) Watanabe, K., I. Matsuura, M. Abe, M. Kubota, D. M. Himmelblau : AICHE J., Vol. 35, pp. 1803 ~ 1811 (1989)
- 5) Venkatasubramanian, V., K. Chan : AICHE J., Vol. 35, pp. 1993~2002 (1989)
- 6) 大江修造：石油学会誌, Vol. 35, pp. 107 ~ 110 (1992)
- 7) 大江修造：「設計者のための物性定数推算法」, pp. 324~355 (1985)