

# ディープラーニングによる化学反応速度近似モデルの構築と 計算量削減に関する研究

芝 世式<sup>1†</sup><sup>1</sup>岡山県立大学情報工学部

## A Study of Approximate Model of Chemical Reaction Rate with Deep Learning And Computational Complexity Reduction

Seiji SHIBA<sup>\*†</sup><sup>\*</sup>Okayama Prefectural University

### Abstract

An approximate model of chemical reaction rate l by deep learning was performed for a future application on combustion simulation in this study. All model have good reconstruction error on this evaluation, even if it required a lot of calculation cost. In the future, DL model of chemical reaction rate may be a useful choice if the computational complexity of DL model comes even low.

**Keywords:** Approximate Model, Chemical Reaction Rate, Deep Learning, Computational Complexity

## 1. 緒言

人工知能技術の発展により車の自動運転や対人応答の自動化など機械学習分野の実社会での応用が目覚ましい限りである。本研究ではこの機械学習の手法を燃焼解析の手段として何かしら応用できないかと取り組むものである。基本的なアイデアとしてはデータ量が増加の一途を辿る数値解析において人間の手に負えなくなった部分の自動化や膨大となった計算量の削減技術などへの手がかりになるのではないかと考えている。

近年の研究において燃焼モデルを教師なし学習モデルにより解析することにより機械学習モデルの燃焼現象解析への適用度を確認したが比較的線形に近いモデルで非常によい一致を確認した。本研究ではより具体的に反応モデルを教師として与え反応速度定数の算出をより低コストの演算量で行えるのではないかとこの前述の後者に当たる試みを行った。三好<sup>[1]</sup>によると既に数理モデルがあるものに対してブラックボックス的なアプローチを行うことは不合理と一蹴しているが、近年の SIMD 演算器やニューラルネットワークに最適化された計算機ハードウェアの導入を考えると一考の余地があると考え試みるものである。

## 2. 解析対象

本研究の対象とする反応モデルは Cantera<sup>[2]</sup>に付属するメタン総括一段反応モデルおよび H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> の 9 化学種 28 反応モデルを用いた。

本計算には python のライブラリである Cantera および chainer<sup>[3]</sup>などを用いた。解析対象はそれぞれの拡張アレニウス型の化学反応速度係数とした。

表 1

| 反応式                                                                    | A        | n    | E       |
|------------------------------------------------------------------------|----------|------|---------|
| メタン一段                                                                  | 1.10E+10 | 0.0  | 20000.0 |
| H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> - 1 式<br>2O+M⇌O <sub>2</sub> +M          | 1.20E+17 | -1.0 | 0.0     |
| H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> - 3 式<br>O+H <sub>2</sub> ⇌H+OH          | 3.87E+4  | 2.7  | 6260.0  |
| H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> - 14 式<br>H+OH+M ⇌<br>H <sub>2</sub> O+M | 2.20E+22 | -2.0 | 0.0     |

<sup>†</sup> E-mail address of corresponding author: shiba@cse.oka-pu.ac.jp

### 3. 解析手法

上記の化学反応速度係数を温度のみの関数として教師あり学習を行う。つまり拡張アレニウス型の関数に対し、ブラックボックスとしてニューラルネットワーク型の関数近似を行う。温度範囲は 300~3000K とし入力温度はニューラルネットワーク入力時に 0~1 スケールに無次元化して導入した。

### 4. 学習結果

図 1 および図 2 にアレニウス型の総括一段反応を用いて深層学習したものを示す。幾つかの試みを繰り返した結果、比較的良好な解が得られた。最適化アルゴリズムについては Adam, AdaGrad, RMSprop のうち RMSprop が収束性に優れており、約 10000 ステップで比較的良好な収束が得られた。これは他の深層学習モデルとはやや異なる傾向である。サンプル数は多い方が良いが本件では 100 点とした。図 2 に青星でプロットしてある。

図 2 の赤線が学習後の深層学習モデルの予測値であるが、全域にわたり良い一致を見せていることが分かる。本件の損失係数は二乗和で算出している。

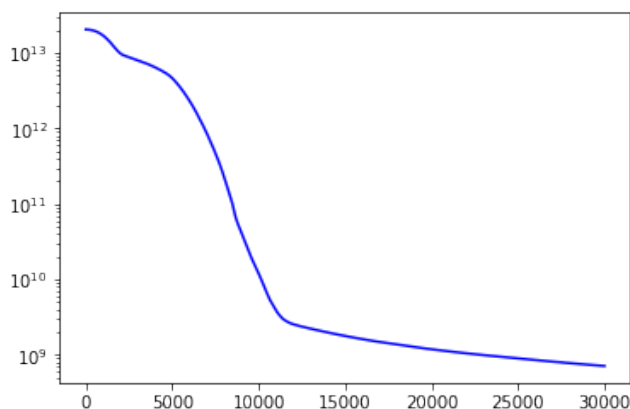


図 1 総括一段反応条件の損失係数

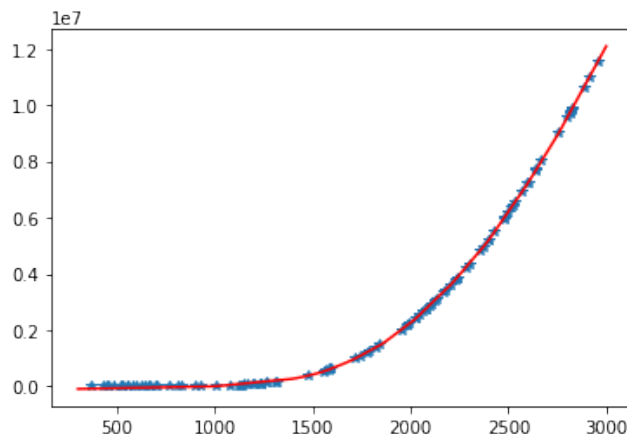
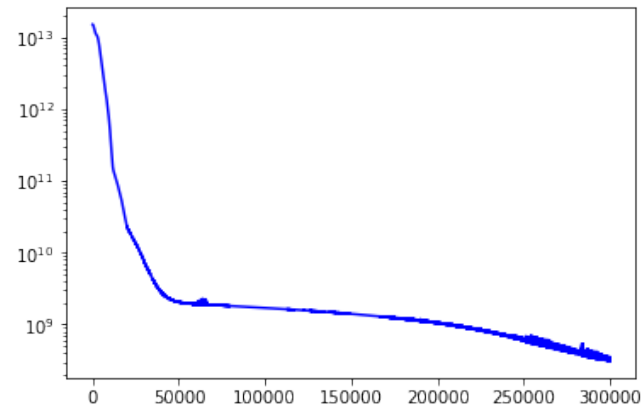
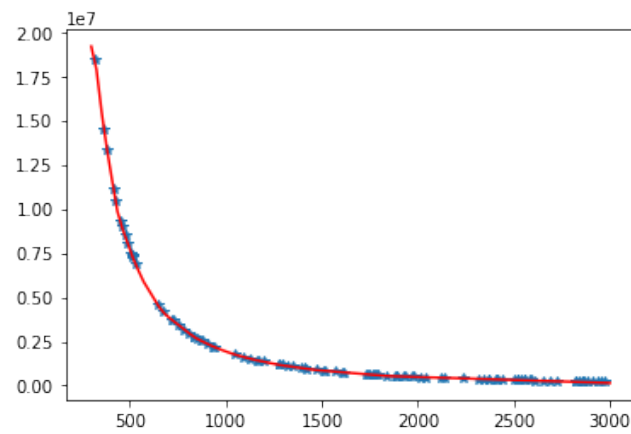


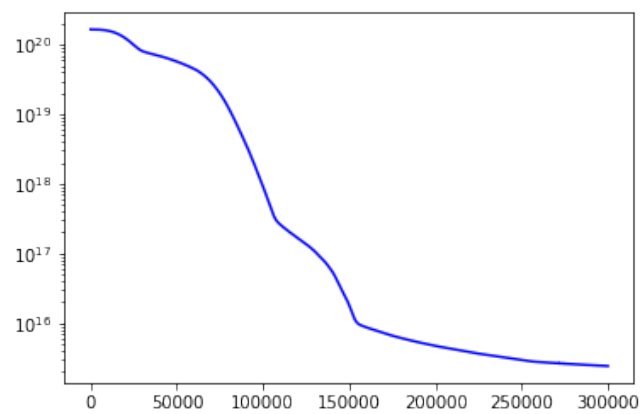
図 2 総括一段反応条件の学習結果

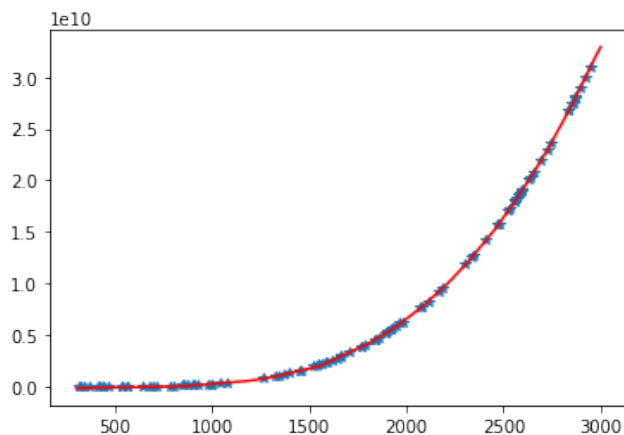
次に図 3 および図 4 に H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 反応の 1 式に適用した図を示す。図 3 を見ると前述のものと比較して収束に一桁大きなステップ数が必要となっていることが分かる。

これは温度のべき指数で与えられた強い温度の負の依存性に起因すると考えられる。しかしながら、収束後の解は図 4 を見る限りよい一致をみせていることが分かる。

図3 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 反応の1式の損失係数図4 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 反応の1式の学習結果

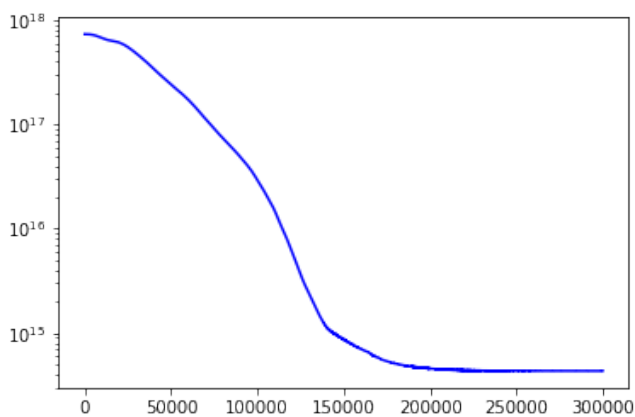
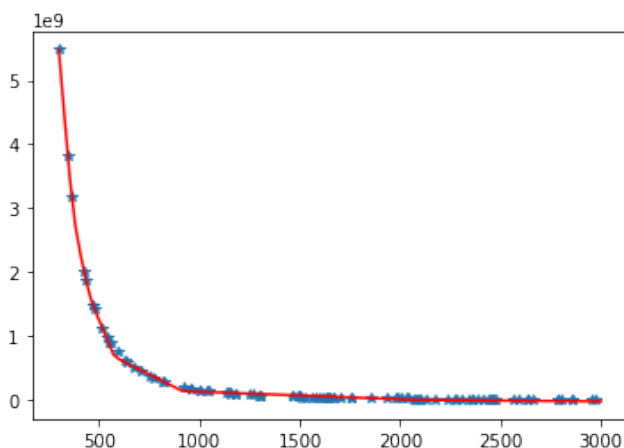
比較して温度に対してべき指数で強い正の依存性を示すのが3式であるが、これを図5および図6に示す。前述のものよりさらに収束性が悪いことがわかるが、これも学習後は非常によい一致をみせている。

図5 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 反応の3式の損失係数

図6 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 反応の3式の学習結果

本研究においては最も収束性の悪かったモデルが14式であるがこれは最も大きな負のべき指数を持つものであった。図7および図8に学習結果を示す。

しかしながら、これらも同様に学習後の予測値は非常に良い一致を示しており深層学習モデルの学習コストが許せば十分計算値を信頼してよいと考える。

図7 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 反応の14式の損失係数図8 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 反応の14式の学習結果

また、ここで簡単に計算コストを見積もっておく。拡張アレニウス型の計算式ではべき乗計算および対数計算が各1回ずつ出現する。これらの計算時間は通常の加算や乗算の50~200倍と言われている。比較して深層学習型の場合は今回の18要素の二層モデルで約400倍程度と考えられる。しかしながら昨今のSIMD

演算器や深層学習用ハードウェアをもってすれば十分に高速となる可能性があることが分かる。

以上のことを踏まえて表 1 に不掲載の全 28 式を加えたモデルを作成し、全反応速度を同時に求める試みを行った。ニューラルネットワークモデルも拡大の必要があると思われるため、一層目を 2 倍、二層目を 10 倍したモデルおよび一層目を 3 倍、二層目を 9 倍したモデルで学習を進めてみた。

両者とも似た傾向を示したため後者のみの結果を図 9 および図 10 に示す。

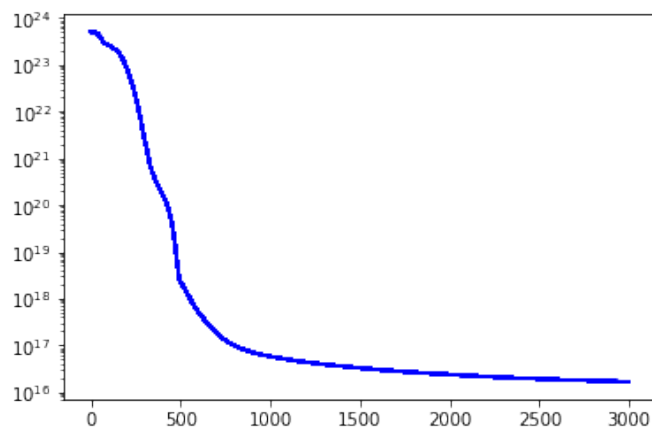


図 9 全 28 反応モデルの損失係数

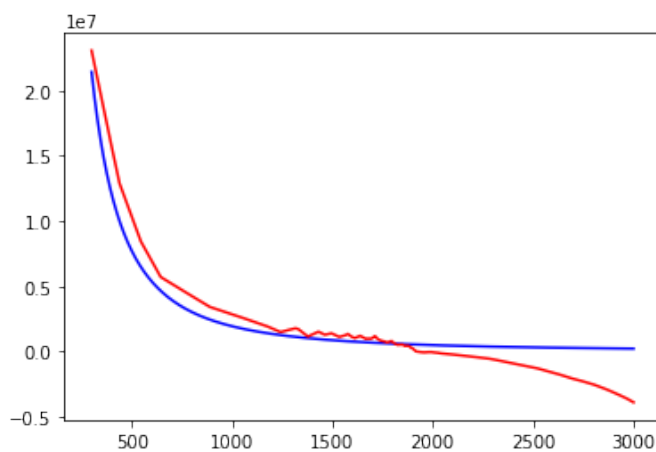


図 10 a 全 28 式モデルの 1 式の学習結果

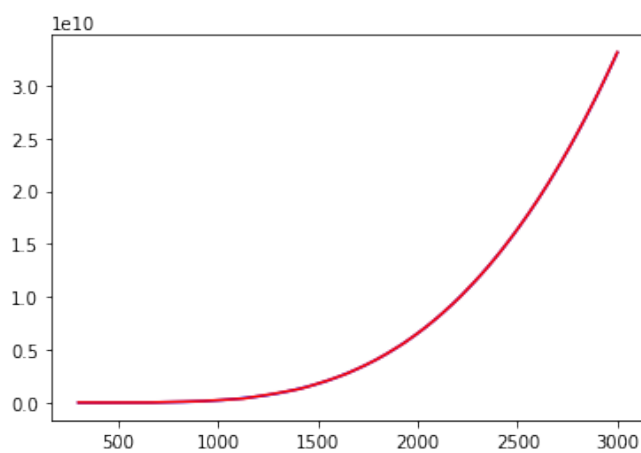


図 10 b 全 28 式モデルの 3 式の学習結果

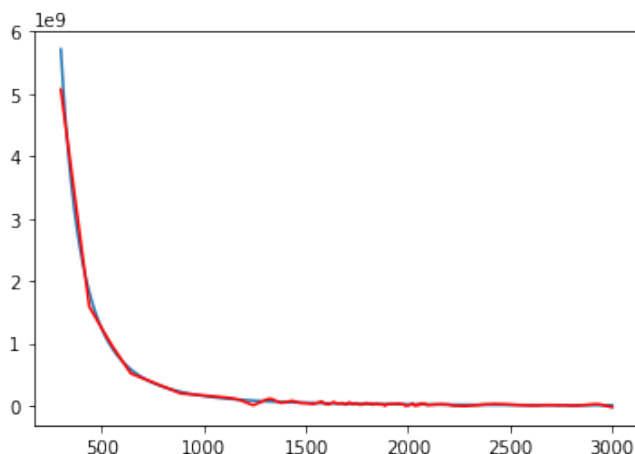


図 10 c 全 28 式モデルの 14 式の学習結果

図 9 および図 10 では計算ステップ数 1000 に対し 1 プロットしている。また、図 10 の教師データも 10 倍与えたためプロットではなく青曲線で引いている。つまり図 9 においてそれ以前よりさらに 10 倍の計算ステップを要している。しかしながら、図 9 を見る限り十分な収束が得られているようにみられる。図 10 をみると、a および c で近似関数に対して十分な近似が得られていないことが明白である。しかしながら b をみると十分な近似結果が得られている。これは反応式によっては十分近似されるが、十分近似されていない領域も存在するという事実である。計算コストの増大に対してさほど有意義な結論が得られていない。つまり、現時点では複数の反応速度を同時に近似する行為は学習においても、計算量削減においてもあまり有効ではないという結論となる。今後の課題として全ての式を対象とするのではなく、類似の反応速度をもつ数式のみを人為的に選別して同時学習を行うことで計算コスト削減が可能であるかどうかを検討したい。

## 5. 結言

本研究では拡張アレニウス型の化学反応速度モデルを深層学習型の近似関数を求める試みを行い以下の結言を得た。

- 本件で試みた全ての反応の近似は可能であった
- 温度のべき指数を持つ反応は学習時間がかかるが十分な時間をかけて収束させたものはよい近似解を示した
- 最も収束性の悪い反応式は温度のべき指数に絶対値の大きな負の値をもつものであった
- 収束に用いたアルゴリズムは **RMSprop** が優秀であった

今後の課題として大規模な反応モデルについても課題拡大を行い計算コストの算出を試みたい。また、流体モデルを含んだ複合モデルを高速度なハードウェア上で実装されることを望む。

## 参考文献

- [1] 三好明, “ 燃焼化学反応モデリングへの誘い ”, 日本燃焼学会誌第 50 巻 154 号(2008), pp. 325-330
- [2] Cantera User's Guide, <http://www.cerfacs.fr/cantera/description.php>
- [3] Chainer : A Powerful, Flexible, and Intuitive Framework for Neural Networks, <https://chainer.org/>
- [4] 芝 世式, “ 深層学習モデルを用いた化学反応速度モデルの簡略化に関する研究 ”, 第 56 回燃焼シンポジウム(2018)