

ニューラルネットワークを用いた 水素発酵のモデル化

徳田 誠*・宮岡 まこと**・伊藤 武志***

Modeling of the Hydrogen Ferment by Neural Networks

Makoto TOKUDA*, Makoto MIYAOKA** and Takeshi ITO***

Abstract

Recently, much attention has been paid to how to produce energy, using active sludge through methane-hydrogen fermentation. Since hydrogen produces only water when it is used as energy, it is hoped that hydrogen will become more popular among various industries as a kind of next-generation energy. In this study, I tried creating the hydrogen generation mechanism modeling, using the neural networks as a step to realize my final purpose, that is, to mass-produce hydrogen efficiently. By using neural networks and modeling a process in which hydrogen is produced from the mixture of the waste and the active sludge, our method might lead to the reduction in the cost and time for the experiment. It is expected that we will be able to make good use of a large amount of food waste, too.

1. 背景と概要

1. 1 現代のごみ問題

現在、大量生産・大量消費により、毎年多くの廃棄物が世界各地で発生している。特に日本では、外国から年間500万tもの食品を輸入しているが、大量の食品廃棄物が問題となっている。大型スーパーマーケットやコンビニエンスストアの普及により我々の生活は便利で豊かになっているが、その一方で、毎日大量の食品を余らせて廃棄している現状がある。これら日本で廃棄となる食品は食品関連事業者、一般家庭と合わせて年間約1700万tにも及び、このうち500~800万tの食品はまだ食べることができるものである[1]。これは「食品ロス」とよばれ、日本で発生する食品ロスは世界全体の食料援助量の約2倍になることが分かっている。

これら解決方法として、1700万tのうち約2万4000tは家畜の飼料やコンポスト化による肥料として利用されている[2]。また、近年のエネルギー問題に伴い、活性汚泥を用いたメタン・水素発酵といったエネルギー生産への利用が注目されている[3]。

1. 2 燃料エネルギーとしての水素利用

近年の経済発展に伴い、人々の生活には大量のエネル

ギーが必要となっており、多くの資源が求められている。東日本大震災以降、日本では、使用するほとんどのエネルギーを化石燃料でまかなっており、環境破壊や資源の枯渇などが問題とされ、水素、メタン、バイオエタノールといった原子力や化石燃料に依存しないエネルギーが注目を集めている。特に水素は、エネルギーとして使用しても水しか生成しないクリーンエネルギーであり、電気エネルギーとは異なり、貯蔵することができる。燃料電池の開発に伴い、日本の自動車メーカーでは水素エネルギーで走る自動車が次々に開発され、航空機、船舶などの輸送業界、燃料や電池などの発電業界にも大きな影響を与える次世代のエネルギーとして、今後の普及が期待されている。

水素の製造方法には、大きく分けて物理化学的手法と生物学的手法の2種類がある。物理化学的手法には水の電気分解以外に、アルコールやメタン、天然ガスなどの化石燃料の改質が挙げられる[4][5]。物理化学的手法は大量生産に向いているが、特殊な機器が必要になり、初期費用だけでなく設備の維持にも費用がかかる。また、莫大なエネルギー消費や薬品の使用による二酸化炭素の排出、使用済み薬品の処理などの問題がある。一方、生物学的手法はエネルギーや薬品の消費が少なく二酸化炭素の排出も少ないため、水素を得るのに適している。

* 情報工学科

** 専攻科生産システム工学専攻

*** 総合教育科

しかし、生化学的手法は、反応速度が遅く、大量生産を実現するためには作業の効率化が必要である。一般廃棄物中の食品廃棄物は含水率が高いため焼却処分には向いておらず、埋め立て処理が主となっている。しかし埋め立て費用は 1.2~2 万円/t となっており、費用面の他、埋め立て地の問題がある[6]。そうした中、食品廃棄物からのメタン、水素発酵は、埋め立て問題の低減、削減やエネルギー回収による利益が期待でき、多方面から研究されている[7]。

1. 3 ニューラルネットワーク

工学分野におけるニューラルネットワークは人間の神経回路網の仕組みを模した情報処理手法のことで、コンピュータに学習能力や汎化能力をもたせることにより、数式での記述が困難な複雑なパターンを有する諸問題の解決が図られている。例えば、画像認識や画像解析の分野において顔認証システムや指紋認証システムへの適用事例が挙げられる[8]。生物学や神経科学と区別して、生体情報処理の手法を示すときは人工ニューラルネットワーク（人工神経回路網）ともよばれる。

1. 4 研究の概要

本研究では、生物学的手法を用いて、効率よく水素を大量生産させることを最終的な目標とするが、今回は、その基礎部分として水素の発生メカニズムをニューラルネットワークを用いて表現することを試みた。水素発酵試験を廃棄物と活性汚泥の混合比や培養温度といった条件下で行い、水素の生成量のデータを収集することで、廃棄物と活性汚泥の混合物から水素が生成される過程をニューラルネットワークでモデル化する。これにより、実際にかかる費用や時間の問題の軽減だけでなく、埋め立てを必要としている大量の食品廃棄物の有効活用も期待できる。

2. 実験方法

2. 1 廃棄物と活性汚泥

本研究では食品廃棄物を想定し、ドッグフードを流動状に細かくしたものを使用した。表1にドッグフードの成分を示す。この原材料は、肉類、菜類、小麦粉、ビタミン類などで構成されている。活性汚泥は、弓削浄化センター（愛媛県上島町）から提供していただいた下水消化汚泥を用いた[9]。本来、汚泥の成分は、季節、地域等に左右されるが、本研究では、これらの条件を問わず、下水消化汚泥の成分や状態が全て一様であると仮定した。

表1 ドッグフードの成分

成分	含有率
タンパク質	6.0%
脂質	3.5%
食物繊維	0.5%
炭水化物	4.0%
水分	82.5%
その他	3.5%

2. 2 データ収集

今回生成する水素の量は、汚泥と廃棄物の配合比、および培養温度に依存している。そこで、ニューラルネットワークで使用するデータ収集のために、サンプルを作成して発酵試験を行った。サンプルの作成手順は次の通りである。

- ① 汚泥と廃棄物の合計を 50g とし、表 2 に示す配合比で混合した。
- ② 作成した混合物を 100ml バイアル瓶に入れ、約 20 分間湯せんした後、窒素を注入することで嫌気状態にした[10]。

培養温度は、予備実験において効率良く水素を生成した 50°C と 60°C に設定した。初期 pH は 6.0~7.0 の範囲の混合物を使用し、pH の調整はせず、嫌気培養を 90 日間行った。

表2 汚泥と廃棄物の配合比

汚泥[g]	廃棄物[g]	配合比
0	50	0 : 1
10	40	1 : 4
17	33	1 : 2
25	25	1 : 1
33	17	2 : 1
50	0	1 : 0

2. 3 データ分析

生成した水素、メタン、二酸化炭素は、ガスクロマトグラフ (SHIMADZU GC-8A) を用いて分析した。表 3 に、ガスクロマトグラフの設定を示す。ガス量は水上置換法を用いて測定した。

この実験により、12 組のデータセットを取得した。作成したサンプルは 1 つの温度と配合比につき 3 サンプルを用意した。そのため、データセットの数値は 3 サンプルの平均値をとったものである。表 4 にその数値を示す。

表3 ガスクロマトグラフの設定

カラム	ステンレススチールカラム
キャリアーガス	アルゴンガス
電流	60mA
カラム温度	110°C
INJ/DET温度	140°C

表4 取得したデータ

データNo.	汚泥(g)	廃棄物(g)	温度(deg)	水素(mol)
1	0	50	50	1.44
2	10	40	50	20.79
3	17	33	50	21.65
4	25	25	50	9.64
5	33	17	50	19.21
6	50	0	50	3.89
7	0	50	60	2.63
8	10	40	60	19.21
9	17	33	60	10.90
10	25	25	60	7.40
11	33	17	60	8.82
12	50	0	60	1.21

3. ニューラルネットワーク

3.1 生体ニューロン

脳は、140億個以上の脳細胞で構成されており、この脳細胞のことをニューロンという。ただし、後述する工学分野におけるものとの誤解を避けるため、生体ニューロンや人工ニューロンなどと区別することもある。1つのニューロンは、平均で数百から数万ものニューロンと相互に結合して信号をやりとりしている。つまり、脳はニューロンとそれらの結合から構成される、ネットワークによって情報処理を行っている。個々のニューロンは単純な仕組みのため、高度な処理能力をもっていない。しかし、個々のニューロンが結合してネットワークを構成することで、高度な学習能力と汎化能力を有するようになる。

次に、ニューロンの仕組みについて述べる。1つの生体ニューロンは、図1のように、細胞体とよばれる本体の部分、本体から枝分かれしている樹状突起とよばれる部分、本体から1本だけ出て末端で多数に枝分かれしている軸索とよばれる部分の3つから構成されている。このように、生体ニューロンどうしが軸索と樹状突起によって結合しているため、

ある生体ニューロンが信号を出すと、次々と他の生体ニューロンへそれが伝播していく[11]。

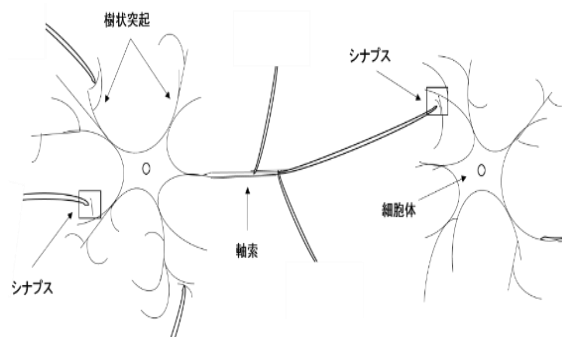


図1 生体ニューロン

3.2 ニューラルネットワークの仕組み

本研究で使用したニューラルネットワークは3層からなる階層型で、その様子を図2に示す[11]。

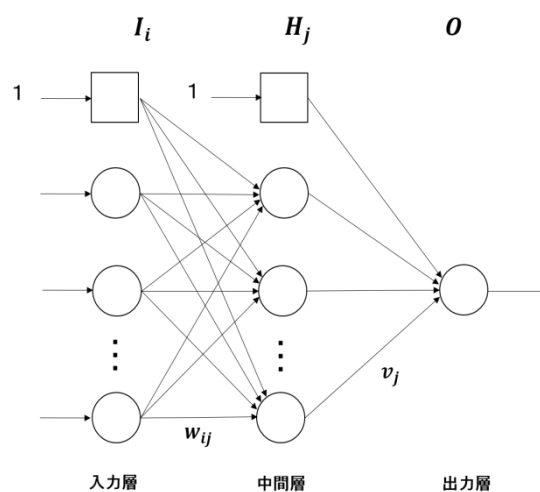


図2 階層型ニューラルネットワーク

図2の各記号の意味は、以下の通りである。

I_i : 第 i 入力層ユニットからの出力。ただし、 $i = 0, 1, \dots, n$ であり、閾値ユニット $I_0 = 1$ とする。

H_j : 第 j 中間層ユニットからの出力。ただし、

$j = 0, 1, \dots, m$ であり、閾値ユニット $H_0 = 1$ とする。

O : 出力層ユニットからの出力。

w_{ij} : 第 i 入力層ユニットと第 j 中間層ユニット間の
荷重係数。

v_j : 第 j 中間層ユニットと出力層ユニット間の荷重
係数。

ここで、 O は次式で与えられる。

$$O = \frac{2\alpha}{1+\exp(-S)} - \alpha \quad \dots (1)$$

$$S = \sum_{j=0}^m v_j H_j \quad \dots (2)$$

(1) 式はニューラルネットワークからの出力で、シグモイド関数を用いて非線形性を与えている。(2) 式は、中間層ユニットからの各出力 H_j に対して荷重係数 v_j による重み付けが行われている。荷重係数の更新方法については 3. 3 にて記述する。また、中間層のユニット数 m は、後述の評価関数に基づいて調整されるパラメータである。ここで、 H_j は次式で与えられる。

$$H_j = \frac{1}{1+\exp(-R_j)} \quad \dots (3)$$

$$R_j = \sum_{i=0}^n w_{ij} I_i \quad \dots (4)$$

つまり、入力層ユニットからの各出力に荷重係数による重み付けを行った後、シグモイド関数で処理されている。

3. 3 ニューラルネットワークの学習

ここでは、前節で説明したニューラルネットワークの学習の流れを説明する。まず、ニューラルネットワークは、次式の評価関数の最小化に基づいて学習される[11]。

$$J = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^p (T_k - O)^2 \quad \dots (5)$$

式中の T_k は第 k パターンにおける教師信号であり、 $k = 0, 1, \dots, p$ とする。ニューラルネットワークからの出力 O がこれに近いほど学習が良好に行われているといえる。

次に、荷重係数の更新則について記述する。入力層ユニットからの出力に対する荷重係数は次式で更新される。

$$w_{ij}^{new} = w_{ij}^{old} - \eta \frac{\partial J}{\partial w_{ij}} \quad \dots (6)$$

学習係数 η は、 $0 < \eta \leq 1$ で与えられる設計パラメータである。

(6) 式の右辺第 2 項における偏微分は、次の計算に

基づいて処理される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial w_{ij}} &= \frac{\partial J}{\partial O} \cdot \frac{\partial O}{\partial S} \cdot \frac{\partial S}{\partial H_j} \cdot \frac{\partial H_j}{\partial R_j} \cdot \frac{\partial R_j}{\partial w_{ij}} \\ &= -(T_k - O) \frac{1}{2} (\alpha^2 - O^2) v_j H_j (1 - H_j) I_i \\ &\dots (7) \end{aligned}$$

次に、中間層ユニットからの出力に対する荷重係数の更新について示す。

$$v_j^{new} = v_j^{old} - \eta \frac{\partial J}{\partial v_j} \quad \dots (8)$$

ただし、

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial v_j} &= \frac{\partial J}{\partial O} \cdot \frac{\partial O}{\partial S} \cdot \frac{\partial S}{\partial v_j} \\ &= -(T_k - O) \frac{1}{2} (\alpha^2 - O^2) H_j \quad \dots (9) \end{aligned}$$

以上のような計算を、学習のパターンごとに繰り返すことにより、評価関数の最小化が行える。図 3 に処理の流れをフローチャートで示す。

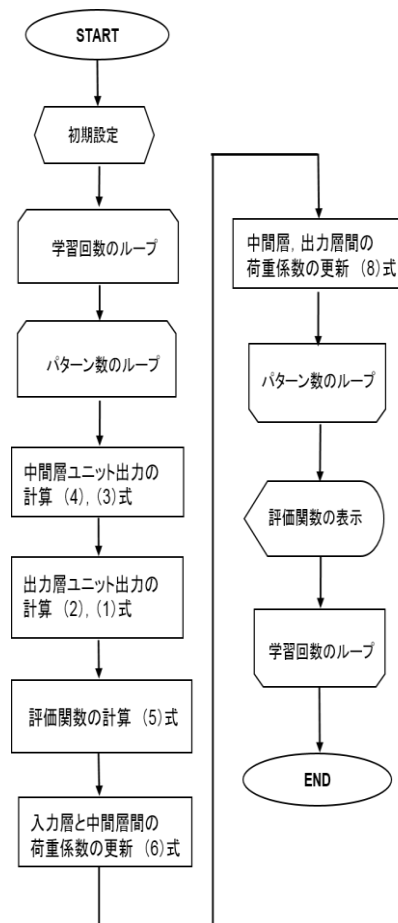


図 3 処理の流れ

4. 適用事例

ここでは、水素の発酵モデルとしてニューラルネットワークを学習させた結果について述べる。ニューラルネットワークの入力には、汚泥、廃棄物、温度の合計3つを用いるため、入力層ユニット数は、閾値ユニットと合わせて4つ($n = 3$)となる。また、出力は水素の生成量である。この様子を図4に示す。

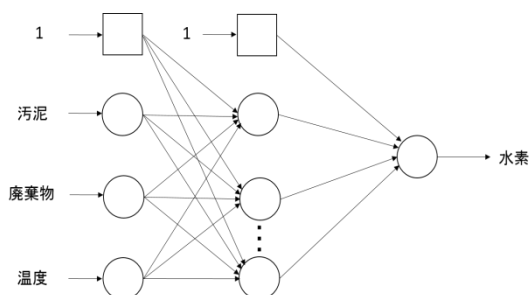


図4 ニューラルネットワークの構成

採取したデータセット12個のうち10個 ($p = 9$) を学習に使用し、残りの2個は汎化能力の確認用とした。具体的には、表3におけるデータNo.6と8の2セットを学習用データセットから除外した。なお、この2セットは無作為に抽出したものである。荷重係数 w_{ij} と v_j の初期値は-1~1の範囲の乱数で与え、その他の設計パラメータは、 $\eta = 0.00001$, $m = 20$, $\alpha = 22.0$ とした。図5に学習の様子を示す。

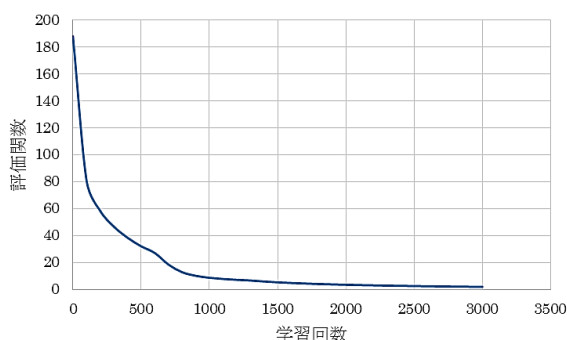


図5 学習の様子

表5に、3000回の学習時における、既学習と未学習のデータに対するニューラルネットワークの出力結果を示す。

表5 学習結果

データNo.	教師信号	出力	備考
1	1.42	1.44	
2	20.88	20.79	
3	21.77	21.65	
4	9.19	9.64	
5	19.65	19.21	
6	3.88	3.89	未学習
7	2.60	2.63	
8	13.46	19.21	未学習
9	10.94	10.90	
10	7.42	7.40	
11	8.83	8.82	
12	1.11	1.21	

5. 考察と今後の課題

前述の適用結果について考察する。まず、図5より、学習回数の前半では、評価関数が急激に減少していることがわかる。その後、緩やかに減少を続け、最終的には、0の付近で横這いに近い状態になっている。次に、表5における既学習のデータセットでは、いずれもほぼ教師信号と等しい出力が得られている。採取したデータにおいて、最も多く水素を生成したのは、No.3のデータセットであるが、ニューラルネットワークの出力においてもNo.3のデータセットに対するものが最大となっている。未学習のデータセットに対する出力ではNo.8のデータに、やや誤差がみられるが、No.6の結果は良好といえる。ちなみに、さらに学習を進めると既学習データの誤差は減少し、未学習データの誤差は大きくなり、過学習（オーバーフィッティング）の傾向がみられた。以上の結果を総合的に判断すると、ニューラルネットワークを用いることで、水素生成のメカニズムをコンピュータ上でほぼ再現できたと考えられる。

今後の課題として、以下の2点を挙げる。

- 学習用データの追加によるニューラルネットワークの汎化能力の向上
- 本モデルを用いた最適解の探索

未学習データの出力の1つに若干の誤差が残った理由として、学習データ数の不足が考えられる。今回の実験では、各データセットの取得に90日を要するため、一般的にニューラルネットワークで用いられるデータ数よりはるかに少ないデータ数で学習を行わざるを得なかった。学習データの追加により、ニューラルネットワークによるモデル化の精度が向上すれば、次のステップとして、遺伝的アルゴリズム (GA) [11]などにより、最適な汚泥と廃棄物の配

合比や培養温度の探索が期待できる。

参考文献

- [1] 農林水産省：「食品ロス削減に向けて～「もったいない」を取り戻そう！～」, (2013)
- [2] 環境省：「生ごみの飼料化・たい肥化の現状及び課題等について」,
https://www.env.go.jp/recycle/waste/conf_raw_g/04mat01.pdf#search
- [3] NPO 法人ネットワーク：「地球村」, 5 分でわかるエネルギー問題,
http://www.chikyumura.org/environmental/earth_problem/s/energy_srisis.html
- [4] 伊藤武志：「通気嫌気細菌による水素生産に関する研究」, 広島大学大学院博士論文, (2006)
- [5] JHFC 水素・燃料電池実証プロジェクト, 水素のはなし 第 9 回 水素のつくりかた,
<http://www.jari.or.jp/Portals/0/jhfc/column/story/09/index.html>
- [6] JICA 独立行政法人国際協力機構：「食べられなかった食べ物の行方「廃棄物 3R・再資源化」コース」,
<http://www.jica.go.jp/tokyo/enterprise/report/report71.html>
- [7] 宗綱洋人, 小村直樹, 玉井正弘：「食品廃棄物のバイオ水素化・バイオガス化に関する技術開発 (第 2 報) 水素発酵残渣の超臨界水ガス化技術の開発」, 広島県立総合技術研究所 西部工業技術センター研究報告, No. 52, (2009)
- [8] 直江健介, 田中秀和, 武藤佳恭：「ニューラルネットワークに基づくセキュリティ技術」, 人工知能学会誌, 21 巻 5 号, pp. B13/1-9, (2006)
- [9] 伊藤将吾, 「生分解性複合材の力学的性質と分解性」, 専攻科特別研究概要集第 3 号, pp. 17-22, (2010)
- [10] 「嫌気状態と無酸素状態の違い」,
<http://oo.spokon.net/seiki/master1/kaisetu/kenki.htm>
- [11] 田中雅博：「ソフトコンピューティング入門」, 科学技術出版, (1998)