

情報サービスセンター長 伊藤 大知 (東京大学)

化工誌編集委員会

委員長 内藤 清嗣 (三井化学)

副委員長 中垣 隆雄 (早稲田大学)

委員 秋月 信 (東京大学) ◎
 伊里 友一郎 (横浜国立大学)
 江口 潤 (DIC)
 岡田 信彦 (花王)
 貝出 絢 (山口大学)
 河崎 悠 (ライオン)
 河野 充宏 (ダイセル)
 小西 剛嗣 (日本製鉄)
 柴崎 敏和 (千代田化工建設)
 高橋 誠 (日揮ホールディングス)
 田中 祐圭 (東京科学大学)
 中川 究也 (九州大学)
 永宮 祐子 (三菱ケミカル)
 西川 昌輝 (東京大学)
 野田 玲治 (群馬大学)
 藤木 淳平 (群馬大学)
 文 亮太 (三菱重工業)
 町田 洋 (名古屋大学)
 三友 信夫 (日本大学) ◎
 吉岡 茂男 (出光興産)
 吉田 誠一郎 (北海道立総合研究機構)
 若杉 玲子 (熊本高等専門学校)

熱海 良輔 (長岡工業高等専門学校)
 稲垣 奈都子 (東京大学)
 大野 肇 (東北大学)
 小野 巧 (産業技術総合研究所)
 笠高 宏洋 (電力中央研究所)
 久保 優 (広島大学)
 小玉 聡 (東京科学大学)
 笹倉 啓佑 (東洋エンジニアリング)
 白石 重則 (住友化学)
 田口 智将 (千代田化工建設)
 豊田 俱透 (カネカ) ◎
 長澤 寛規 (広島大学)
 夏山 和都 (千代田化工建設)
 西村 顕 (三重大学)
 平川 秀彦 (筑波大学)
 藤原 武 (JNC石油化学)
 堀江 孝史 (大阪公立大学)
 松本 卓也 (三井化学)
 森 伸介 (東京科学大学)
 吉川 晃平 (JFE スチール)
 吉村 彰大 (千葉大学)
 渡邊 貴一 (岡山大学)

学生委員 立花 桜子 (早稲田大学)
 藤森 美夢 (東京科学大学)

◎ …… 各分科会主査

化学工学誌アンケートのお願い

本誌「化学工学」では、今後の企画・編集に役立てるため、読者アンケートを実施しております。このアンケートは、各著者の評価を目的としたものではなく、今後一層読者に愛される会誌を目指すためのものです。そうした趣旨をご理解いただき、ぜひアンケートにご協力をお願いいたします。

【アンケートはこちら】 <https://www0.scej.org/kakoushi/enquete/>

個人会員マイページについて

本会個人会員のみなさまは、マイページで住所などの登録情報を変更できます。また、マイページ内の電子図書館では、「化学工学」バックナンバーや当会刊行書籍を閲覧できます。



ユーザー ID：各個人の会員番号

パスワード：入会時に送付したもの、もしくは自身で変更したもの

【マイページはこちら】 <https://service.kktcs.co.jp/smms2/loginmember/scej?l=ja>

化学工学会 本部Webサイト
<https://www.scej.org>

最新のイベント・講座情報をはじめ、求人案内や動画コンテンツなど「化学工学のポータルサイト」を目指して情報発信に力を入れています。是非ご活用ください。



複写について

本誌に掲載された著作物を複写したい方は、(公社)日本複製権センターと包括複写許諾契約を締結されている企業の方でない限り、著作権者から複写権等の行使の委託をうけている次の団体から許諾を受けて下さい。著作物の転載・翻訳のような複写以外の許諾は、直接本会へご連絡下さい。

〒107-0052 東京都港区赤坂9-6-41乃木坂ビル (一社) 学術著作権協会
 TEL 03-3475-5618 / FAX 03-3475-5619 / E-mail jaacc@mtd.biglobe.ne.jp

ただし、アメリカ合衆国における複写については、次に連絡して下さい。

Copyright Clearance Center, Inc. 222 Rosewood Drive, Danvers, MA 01293 USA
 Phone 1-978-750-8400 / Fax 1-978-646-8600

Notice about photocopying

In order to photocopy any work from this publication, you or your organization must obtain permission from the following organization which has been delegated for copyright clearance by the copyright owner of this publication.

[Except in the USA]
 Japan Academic Association for Copyright Clearance, Inc.
 (JAACC) 6-41 Akasaka 9-chome, Minato-ku, Tokyo 107-0052 Japan
 Phone 81-3-3475-5618 / FAX 81-3-3475-5619 / E-mail jaacc@mtd.biglobe.ne.jp

[In the USA]
 Copyright Clearance Center, Inc. 222 Rosewood Drive, Danvers, MA 01293 USA
 Phone 1-978-750-8400 / Fax 1-978-646-8600

「会誌『化学工学』 ご協力企業」



Contents

443	巻頭言	グレーボックスモデリングと化学工学	山下善之
444	特集	ハイブリッドシミュレーション技術の動向	
445		物理モデルと機械学習：深層学習時代の展開	武石 直也
449		第一原理計算を活用した分子触媒設計におけるデータ統合・利活用	山口 滋
453		第一原理計算と反応速度論による触媒パフォーマンスの理論的予測	石川 敦之
457		汎用原子レベルシミュレータ：Matlantisが加速する次世代の材料開発	橋本 一彦
461		燃料電池システムの多用途展開と先端研究の加速へ向けた統合システム シミュレーター「FC-DynaMo」の開発	長谷川 茂樹・金 尚弘・影山 美帆・河瀬 元明
465		プラントO&M分野におけるハイブリッドシミュレーション技術の現在地	松澤 樹
469		機械学習と確率モデルを組み合わせたハイブリッド粉体混合シミュレーション	仲村 英也・岸田 尚樹
473	連載	材料開発者のためのMI(マテリアルズ・インフォマティクス)初級講座〔第12回〕	高原 渉
478	研究室紹介	宇都宮大学工学部基盤工学科応用化学コース膜反応工学研究室	佐藤 剛史
479	学生会員の声	伝えることから広がる、わたしの研究の世界	樋本 京香
480	トピックス	低圧下形成ガスハイドレート利用分離技術	多島 秀男
		プロセス安全とサイバーセキュリティの融合を目指して：SPSM研究会の取り組み	田邊 雅幸
482	本会の動き	フィリピン化学工学会とのMOU締結について	関口 秀俊・馬越 大・神谷 秀博
484		次号予告	

443	Foreword	Graybox Modeling and Chemical Engineering	Yoshiyuki YAMASHITA
444	Special Issue	Recent Hybrid-Simulation Technology	
445		Physics Models and Machine Learning : Development in Deep Learning Era	Naoya TAKEISHI
449		Data Integration and Utilization for Molecular Catalyst Design Based on <i>ab initio</i> Calculations.....	Shigeru YAMAGUCHI
453		Catalyst Performance Prediction with First-Principle Based Chemical Kinetics	Atsushi ISHIKAWA
457		Versatile Atomistic Simulator : Matlantis Accelerates Next-Generation Material Developments	Ichihiko HASHIMOTO
461		Integrated FC System Simulator "FC-DynaMo" for Acceleration of Multi-Purpose Application and Advanced Research	Shigeki HASEGAWA, Sanghong KIM, Miho KAGEYAMA, Motoaki KAWASE
465		The Current State of Hybrid Simulation Technology for Plant O&M Field	Tatsuki MATSUZAWA
469		Hybrid Powder Mixing Simulation by Machine Learning with Stochastic Random Model.....	Hideya NAKAMURA, Naoki KISHIDA

『化学工学』は、内閣府に認可された学術団体である公益社団法人 化学工学会の会誌で、化学工学ならびに関連分野における最新技術の解説を中心に、時代に適した貴重な技術情報を提供するものです。本誌は、著者の意向を尊重し、なるべく原稿そのままの掲載につとめており、必ずしも本会そのものの意見、主張ではないことをお断りいたします。

Chemical Engineering of Japan is the magazine published by the Society of Chemical Engineers, Japan (SCEJ), an academic organization approved by the Cabinet Office of Japan. The magazine provides valuable technical information appropriate to the times, focusing on the latest and state-of-art technologies in chemical engineering and related fields. It respects each author's wishes and has tried to publish their manuscripts as it is, and its publications do not necessarily represent the view or opinion of SCEJ itself.

