巻頭言

グレーボックスモデリングと化学工学

Graybox Modeling and Chemical Engineering

山下 善之

Yoshiyuki YAMASHITA（正会員）
1982年　東北大学工学部卒業，1987年 同 博士課程修了　工学博士
1987年　東北大学 助手，1992年 同 助教授，2007年 東京農工大学 教授
2025年　東京農工大学 名誉教授，国際環境研究協会 プログラムオフィサー，アレテープロセス 代表
現在に至る
E-mail　yama_pse@cc.tuat.ac.jp

モデルは現象を説明し，挙動を予測し，最適化を図るための道具である。化学工学におけるモデルは単に現象を記述するだけでなく，モデル化（Modeling），シミュレーション（Simulation），最適化（Optimization）からなるMSOパラダイムの中核をなすものである。モデル化によって得られたモデルは，様々な条件下での挙動を予測するためのシミュレーションに用いられ，その結果を基に最適化することで目標の達成に貢献する。化学工学の分野では，これまで多岐にわたるモデルが作られてきた。物質収支や熱収支に基づくモデルや運動方程式，反応速度式，状態方程式などの物理モデル（ホワイトボックスモデル）が最も代表的なモデルの形態である。また，レイノルズ数やヌッセルト数などの無次元数を用いた相関モデルも古くから多く作られてきた。さらに，最近では機械学習の発展に伴い，実験データなどに基づくデータ駆動型モデル（ブラックボックスモデル）が大きな注目を浴びている。

物理モデルは基本的な物理法則に基づいて現象を定式化しているため，一般性が高く，現象の本質的理解やスケールアップ時の予測精度に優れている。しかし，複雑な対象に対しては十分な物理モデルを構築することが困難であり，実験的に決めなければいけないパラメータを含む場合も少なくない。一方，データ駆動型モデルは，複雑な挙動を精度よく再現できるものの，データの範囲を超えた状況に対しては精度が著しく低下してしまう。また，物理的解釈性が低いという課題やモデルの学習には大量のデータを必要とするといった課題をもっている。

こうした物理モデルとデータ駆動型モデルのそれぞれの課題を補完するものとして，グレーボックスモデルが化学工学におけるモデリング手法として重要な位置を占めるようになっている。両者を適切に組み合わせることによって，物理モデルの一般性や解釈性を保持しながら，データ駆動型モデルの柔軟性や精度をもたせることが可能となっている。ハイブリッドモデルという呼び方もあるが，離散モデルと連続モデルの組み合わせやマルチスケールモデルなどさまざまなハイブリッドがあるため，ホワイトボックスモデルとブラックモデルボックスの組み合わせはグレーボックスモデルと呼ぶほうが誤解が少ない。

無次元数を用いた相関モデルは，まさにこのグレーボックスモデルの精神を先取りしたものといえる。多くの無次元数は，当初は実験データや次元解析などに基づいて経験的に得られたものであったが，収支式や運動方程式などの物理法則の係数としても自然に導出されることも知られている。すなわち，無次元数を用いた相関モデルは，物理モデルに基づいた構造をもつ無次元数に，データに基づくパラメータ推定を加えた典型的なグレーボックスモデルであるということができる。

さらに近年では，計算流体力学（CFD）や分子動力学（MD）など計算コストの高いモデルと機械学習を組み合わせたサロゲートモデルも注目されており，これもまたグレーボックスモデルの一種として位置づけられる。第一原理モデルに基づく高精度なシミュレーションには膨大な計算時間を要するが，サロゲートモデルを用いることでその入出力関係を機械学習で近似し，高速かつ高精度な予測が可能となる。

グレーボックスモデルには，物理モデルとデータ駆動型モデルの組み合わせ方によって，無次元数やサロゲートモデルの他にも様々なアプローチが存在する。物理モデルの予測誤差をデータ駆動型モデルで補正する方法，物理モデル内のパラメータをデータ駆動型モデルで推定する方法，対象の異なる部分をそれぞれ物理モデルとデータ駆動型モデルで記述して連結する方法などが代表例である。対象の複雑性，モデリングに利用可能なデータの量と質，モデルに要求される精度や解釈性などに応じて，適切なタイプのグレーボックスモデルを使い分ける必要がある。

化学工学においては，無次元数を起源とするグレーボックスモデルが古くから構築され活用されてきた。機械学習の発展とともにブラックボックスモデルが脚光を浴びているが，化学工学の深い知識を生かしたグレーボックスモデルを新たに構築し活用することによって，それぞれのモデルだけでは到達しえない，より高度で実践的なモデリングの発展を期待する。

著作権法により無断での転載等は禁止されています