

特集 ハイブリッドシミュレーション技術の動向

現行の各種プロセスシミュレーション技術では、物理モデルや機械学習モデルが活発に利用されている。物理モデルはホワイトボックスモデルであり、数理モデルを物理的に説明可能なモデルである。対照的に、機械学習モデルはブラックボックスモデルであり、ビッグデータにより高い予測精度を示すポテンシャルを有しているが、因果関係を直接説明することはできない。一方、この物理モデルと機械学習モデルを融合させた、いわゆる「グレーボックスモデル」によるシミュレーション技術も利用されている。

グレーボックスモデルでは、例えば、プロセスシミュレーション技術、CFDシミュレーション（数値流体力学計算）、第一原理計算に対して機械学習モデルを組み合わせる例が考えられる。また、機械学習モデルだけではなく、統計モデルや確率論モデル（複雑系モデル）の組み合わせも有りうる。また、データドリブンなモデリング技術も登場しており、この分野における研究開発の重要性はいっそう高まっていると考える。

本企画は、このような、既存のホワイトボックスモデルに対して、ブラックボックスモデルを組み合わせた種々の新規ハイブリッドシミュレーション技術の手法について、分野横断的に特集するものである。また、物理モデルと機械学習モデルを組み合わせる手法に着目した、大学・研究機関・高専などのアカデミックな立場から、現場のビッグデータが入手容易な企業の立場まで、広く事例を紹介する。

（編集担当：熱海良輔）†

基礎

物理モデルと機械学習：深層学習時代の展開

武石 直也

第一原理計算＋機械学習

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

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

第一原理計算＋機械学習または基礎

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

プロセス

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

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

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

† Atsumi, R. 令和7・8年度化工誌編集委員 長岡工業高等専門学校