



ハイブリッドモデリング: AIと専門知識の 組み合わせでアセットを最適化

本書では、この新しいテクノロジーが解決するビジネス課題、アスペンテックが市場に投入する3種類のハイブリッドモデル、それらのモデルが直接価値を生む領域、そして、このテクノロジーの新たな波をリードしてプロセス産業が不安定で不確実な時期を乗り切れるよう支援することのできるアスペンテック独自の能力についてまとめています。

エグゼクティブサマリー

アスペンテクノロジー (アスペンテック) は、第一原理に基づくプロセスシミュレーションモデルと専門知識をAIおよびアナリティクスアルゴリズムと統合するための手法を考案しました。その結果生まれたアプリケーションソフトウェアは、第一原理モデリングだけ、あるいはAIだけの場合よりも多くのことを達成できるハイブリッドモデリングシステムです。

第一原理モデルは、化学プロセスや炭化水素プロセスの正確なモデリングのために確立されたものです。世界トップクラスの化学プロセスシミュレーションシステムであるAspen Plus®とAspen HYSYS®は、40年以上にわたり業界、研究者、科学者によって使用されるなかで検証され、信頼され、改良されてきた精度と予測機能を備えています。これらのモデルと第一原理の関係は、世界最高峰のプロセスエンジニアやオペレータによる数百年にわたる経験に基づき、アスペンテックの研究開発チーム、Aspen Academyの大学研究者のほか、ご意見やご貢献をいただいたお客様の専門知識から成ります。



これらのモデルから残り数パーセントの精度を引き出すために、プラントデータを活用してプラントの状態とパフォーマンスを観察するための第一原理モデルの調整を行っています。アスペンテックが幾度もワークフロー自動化の改善を重ねてきたとはいえ、効果的にモデルの調整を行うには相当の専門知識と経験が必要になります。

AIと機械学習は、第一原理モデルの調整だけでなく、事象やプロセスのデータに基づくモデルの作成においても、プラントデータを活用する能力を大幅に高めることのできるツールとして急速に台頭しています。AIにはプロセスシステムのモデリングに向けて専門知識のハードルを下げる可能性があります。安全で信頼できる、直感的な機能を実現するための現実的なガードレールを築くには、専門知識と組み合わせる必要があります。

ハイブリッドモデルでは、専門知識をそれほど必要とせず包括的で精度の高いモデルをより速く提供できるように、AI、第一原理、および専門知識を組み合わせます。機械学習を利用することで、シミュレーションやプラント、またはパイロットプラントのデータを活かしてモデルを作成できるようにする一方で、第一原理やエンジニアリング上の制約を含む専門知識を取り入れることで、ユーザーがプロセスに関する深い専門知識を持つ必要やAIに精通する必要なく、高度なモデルを構築できるようにします。このような次世代のソリューションによって、ハイブリッドモデルにおけるAIのアプリケーションを大衆化して、装置の設計、運転、保守を最適化することで、オンラインやエッジへの展開が可能になります。

AIと機械学習により、モデルの予測に高度なデータサイエンス手法を利用しながらも、より幅広いデータを分析するモデルを構築できるようになります。そして、エンジニアリングに関する原理や専門知識と組み合わせれば、ユーザーの専門知識をそれほど必要とせず、従来手法よりもモデルの構築や保守を迅速化できます。



ハイブリッドモデルを採用することで、ユーザーは第一原理だけでは容易にモデリングできない以下のようなプロセスや装置をモデリングできるようになります。

- バリエーションが多すぎて体系的にモデリングできないようなバッチプロセス
- 複雑な化学的挙動や流体挙動を伴う流動層プロセス
- バイオプロセスの反応器や発酵槽
- 複雑な精製ユニット

AIと専門知識の相乗効果によって経験的モデルの精度と第一原理モデルの長所が得られるため、より予測的なモデルをこれまでより迅速に、かつ少ない経験で作成できます。

プラントをより正確に表現できるハイブリッドモデルなら、その適合性がより長期間保たれます。その結果、必要な専門知識と労力が減るため、装置の最適化にモデリングを取り入れるハードルが下がります。モデルを導入することでこれまでの作業から解放された人員は、より付加価値の高い戦略的業務に従事できるようになります。

アスペンテックは、モデルアライアンスアプローチによって自社の既存ソフトウェアスイート全体にハイブリッドモデリング機能を展開します。このアプローチは、安全性、信頼性、持続可能性、および収益性の高い装置の運転に必要なさまざまな機能分野で目的に適したモデルを同期させるというものです。モデルアライアンスには、例えば、プランニング、動的最適化、機器のオンライン監視における次数低減ユニットモデルの利用が挙げられます。これらはすべて同じ精製ユニットの運転データセットおよびシミュレーションモデルから導き出し、閉ループ生産最適化を実現できます。



プロセス産業がかつてない不確実性とマクロ経済の脅威にさらされ、業界リーダーは各自のビジネスのあらゆる局面で前例のない不安定性に直面しています。炭化水素価格の混乱やリモートワークのニーズにおける変化、サプライチェーンの断絶といった外的要因により、プロセス製造企業は、最小限の規模から最大でグローバル規模まで、改革を余儀なくされています。原料の価格や需要の変動から、社会の持続可能性に向けた動きまで、組織が幅広い課題に対処するには、複雑なトレードオフをはかりにかけする必要があります。ソフトウェアテクノロジー、とりわけAIは、こうした課題を抱える組織が成功を収めるために備えることができる主なツールの1つとして一般に認識されています。

市場の不安定性とエネルギーの転換

3つの外的要因により、世界中のエネルギー企業や化学企業は不安定性と混乱が続く事態に陥っています。世界市場での需給ショックと景気回復の段階に入りつつあること、エネルギーの転換や二酸化炭素排出量ゼロ産業に向けた社会の動き、そして犠牲者ゼロ、環境インシデントゼロを推進する社会契約、これらすべてが業界の経営陣の考えに多大な影響を及ぼしています。

プロセス産業の企業は、予測不可能な稼働率で、保守間隔を延ばし、生産高、営業利益率を高めて生産の回復力を向上させる柔軟性と戦略に固執しています。こうした目標の達成に必要な重要課題に対しては、主要な経済ユニットまたはサイト全体の問題を速やかに解決でき、プラントの運転状況に合わせてより適切に調整される、より迅速なモデルが答えとなります。ハイブリッドモデリングなら、動的な市場原理と装置の状態に対応するために、素早く、しかもリモートから、モデリングと展開を行うことが可能です。このようなモデルが、将来の自己最適化プラントによる運転の変革において重要な要素となります。

消えゆくエキスパート

エキスパート世代が退職すると同時に、プロセス産業の組織は、不可欠な知識とその重要な専門知識を身に付けていない新世代の従業員とのギャップに直面することになります。AIが組み込まれているハイブリッドモデルは、そうしたギャップに対処して、組織と装置に対する価値を即座に生み出します。十分なリソースを有する企業を除くどの企業にも、希少かつコストのかかるエキスパートがいなくてもハイブリッドモデルを構築して展開できる能力が必要です。



持続可能性のプレッシャー

業界全体に及ぶ手強い脱炭素目標は、現在の景気循環を脱してもなくなることはありません。また、循環型経済への移行に対するプレッシャーも、イノベーションにおける多くの課題を生み出しています。ハイブリッドモデルなら、幅広い装置範囲全体でオプションリティを最適化して評価することで、これらの目標を達成するための最善の戦略を選択できます。企業は現在、運転と戦略に関する意思決定において、持続可能性のプレッシャーがもたらす複雑さに取り組む必要に迫られています。



プロセス産業でのハイブリッドモデリングに関するアスペンテックのビジョン



アセットや企業の規模にかかわらず、強力かつ正確なモデルへのアクセスを大衆化することは、特定のプロセスが予期しない変化に対してどのような挙動と反応を見せるかを理解するうえで極めて重要なステップです。プラントやそのシステムの複雑性が増すなかで、このようなモデルが運転に欠かせないものとなっています。

ハイブリッドモデルでは、専門知識をそれほど必要とせずに包括的で精度の高いモデルをより速く提供できるように、AI、第一原理、および専門知識を組み合わせます。機械学習を利用することで、シミュレーションやプラントのデータを活かしてモデルを作成できるようにする一方で、第一原理やエンジニアリング上の制約を含む専門知識を取り入れることで、ユーザーはプロセスに関する深い専門知識やAIに精通する必要がなく、高度なモデルを構築できるようにします。

ハイブリッドモデルを採用することで、ユーザーは第一原理だけでは容易にモデリングできないプロセスや装置をモデリングできるようになります。AIと専門知識の相乗効果によって経験的モデルの精度と第一原理モデルの長所が得られるため、より予測的なモデルを作成できます。

アスペンテックは、40年以上にわたり培った専門知識を活かしてAIをプロセス産業に適用できるようにすることで、産業用AIを実現するための独自の体制を確立しています。以下は、当社がまとめて提供する3つの基盤となる機能です。

- プロセス産業に関する安定した深い専門知識
- 接続された多数のセンサーから入手できる大量のデータの収集と分析を行うための優れた機能
- 機械学習とAIを産業用ソリューションへと転換する取り組みにおける革新的リーダーシップ

簡単な例

単純な機械学習とアスペンテックのハイブリッドモデリングアプローチの劇的な違いがわかる、ポリマー反応プロセスの簡単な例をご紹介します(下図参照)。

左側のグラフは、機械学習(ML)をポリマー反応器からのプラントデータに適用してモデルを構築することで得た相関を示しています。対して右側のグラフでは、第一原理のガイダンスを加えてハイブリッドモデリングアプローチをとることで結果が大幅に向上したことがわかります。



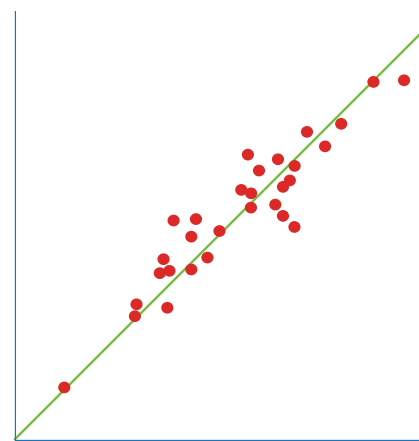
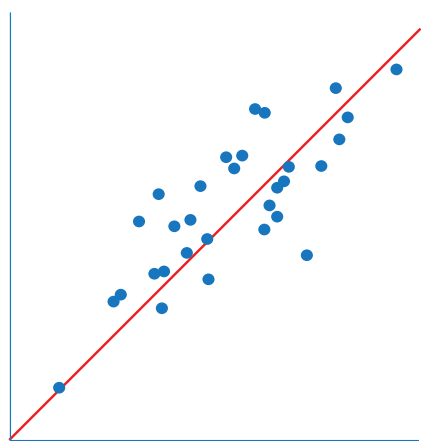
機械学習モデル
純粋にデータ主導

$R^2 = 0.71$
RMSE = 261.5

ハイブリッドモデル
機械学習 + 第一原理モデル

$R^2 = 0.95$
RMSE = 98.8

予測された分子量 (MWN)



測定された分子量 (MWN)

図1. ポリマー反応プロセスの機械学習モデルとハイブリッドモデルの比較

AI

アスペンテックが開発している3種類のハイブリッドモデリング



アスペンテックは、ハイブリッドモデルを作成するために組み合わせる重要な数種類のテクノロジーコンポーネントを開発しました。それには、プロセスエンジニアやプラントエンジニアが、データサイエンスを理解していなくてもプラントデータやシミュレーションデータを迅速にAIベースの機械学習モデルに転換できるツールが含まれているほか、第一原理の物理化学的知識とそれらのAIベースの経験的モデルや直感的な自動化されたワークフローを組み合わせ、運転アプリケーションとして展開するためのツールも含まれています。

3種類のハイブリッドモデルとして業界に提供されるこれらのコンポーネントは、どれも業界初のモデルとなります。詳細は以下のとおりです。

タイプ1: AI主導型ハイブリッドモデル

このアプローチでは、機械学習を利用してプラントデータまたは実験データに基づいて経験的モデルを作成し、第一原理(熱力学特性など)、制約(物質収支など)、および専門知識で拡張します。経験の浅いユーザーでもまったく新しい予測的でより高精度のモデルを素早く生成して、AIのアプリケーションを完全に大衆化できます。これにより、第一原理だけでは容易にモデリングできないプロセスや装置をモデリングできるようになります。例としては、複雑な反応ユニットの運転や、新しい材料プロセス、新しいテクノロジープロセスなどが挙げられます。

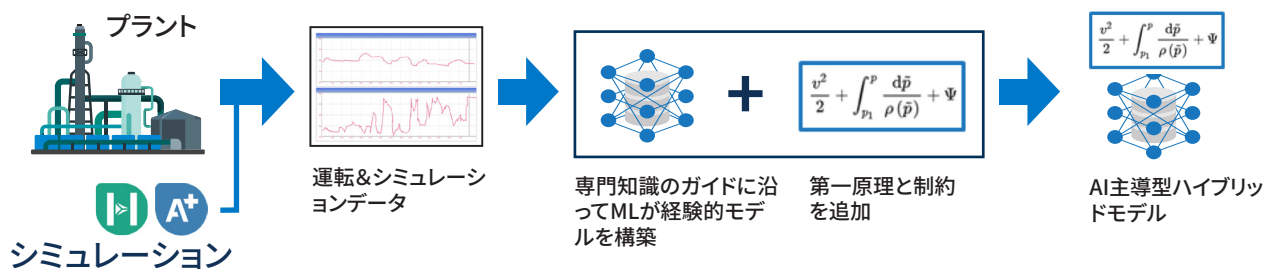


図1: AI主導型ハイブリッドモデルのワークフロー。プロセスエンジニアがデータサイエンスを理解していなくても、直感的にデータを用いて素早くユニットまたはプロセスのモデルを構築できる

タイプ2: 次数低減型ハイブリッドモデル

このアプローチでは、機械学習を利用して、実行される多数のシミュレーションのデータに基づいて経験的モデルを作成し、制約と専門知識で拡張します。これにより、トレーニングが行われた範囲内で正確な、目的に適した、忠実度の高い、効率的なモデルを構築して、AIのアプリケーションを完全に大衆化できます。次数低減モデルを使用すると、ユーザーはモデリングのスケールをユニットからサイト全体へと簡単に拡張して、設計、運転、保守のライフサイクル全体でそのモデルを同期できるようになります。例としては、原油の供給から最終的な化学製品の提供までバリューチェーン全体のモデルの構築や、エッジで素早くオンライン展開可能なコンパクトモデルの構築、線形計画プログラムへの高精度モデルの組み込みなどが挙げられます。



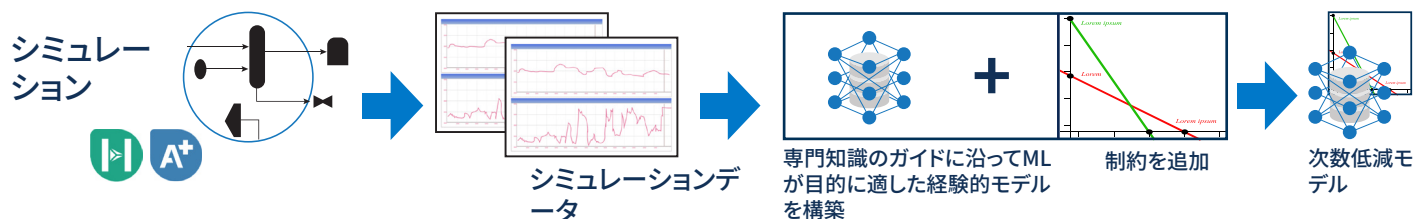


図2: 次数低減型ハイブリッドモデルのワークフロー。プロセスエンジニアが調整されたシミュレーションモデルを用いて対象アプリケーションの範囲内で一貫して展開可能な機械学習次数低減モデルを生成できる

タイプ3: 第一原理主導型ハイブリッドモデル

このアプローチでは、既存の第一原理モデルをAIで拡張します。運転データを使用することで、元のモデルでは得られなかった未知の変数や関係を計算します。機械学習が未知の値とその関係を特定し、状況の変化に応じて継続的にモデルの調整を行います。このアプローチは世界中の多数の既設プラントにおける既存の第一原理モデルの自然な拡張なので、素早く簡単に導入して、精度を大幅に高めることができます。例としては、第一原理の制約を満たしながらAIで作成する特殊なバッチプロセスユニットのモデルが挙げられます。

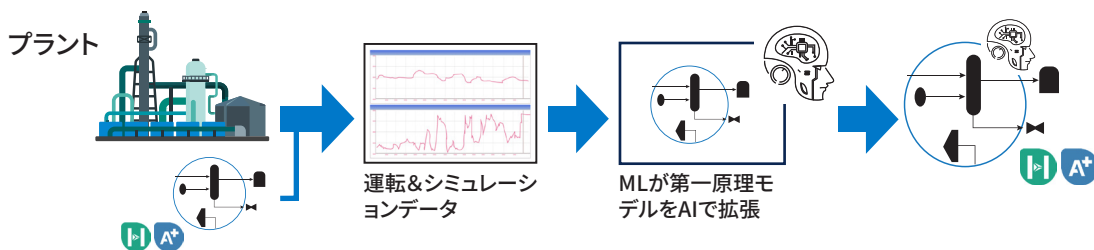


図3: 第一原理主導型ハイブリッドモデルのワークフロー。ユニットのモデリングが難しいと判断される場合(バッチプロセスが多いなど)に機械学習が第一原理モデルを拡張

モデル	概要	例
AI主導型ハイブリッドモデル	プラントデータ/実験データ、第一原理、制約、および専門知識に基づいて機械学習で作成されたより精度の高い経験的モデルです。	<ul style="list-style-type: none"> 複雑なプロセスユニットやプロセスのモデリング ソフトセンサー オンラインの機器モデル
次数低減型ハイブリッドモデル	シミュレーションの実行データ、制約、および専門知識に基づいて機械学習で作成された高速で効率的に実行できる経験的モデルです	<ul style="list-style-type: none"> 製油所全体または化学プラント全体に及ぶモデル 計画モデルの更新 洗浄スケジュールの最善/最悪のケースを予測するための高速に解けるオンラインモデルの展開 オンラインのプロセス学習モデルの展開 APC非線形モデルの展開
第一原理主導型ハイブリッドモデル	モデルの精度と予測可能性を高めるためにデータとAIで拡張された既存の第一原理モデルです。	<ul style="list-style-type: none"> バッチユニットのモデリング バイオプロセスのモデリング 複雑なユニットのモデリング

表1: ハイブリッドモデリングの種類の詳細とシナリオ例

ハイブリッドモデリングの利点と ビジネス価値を証明するユースケース



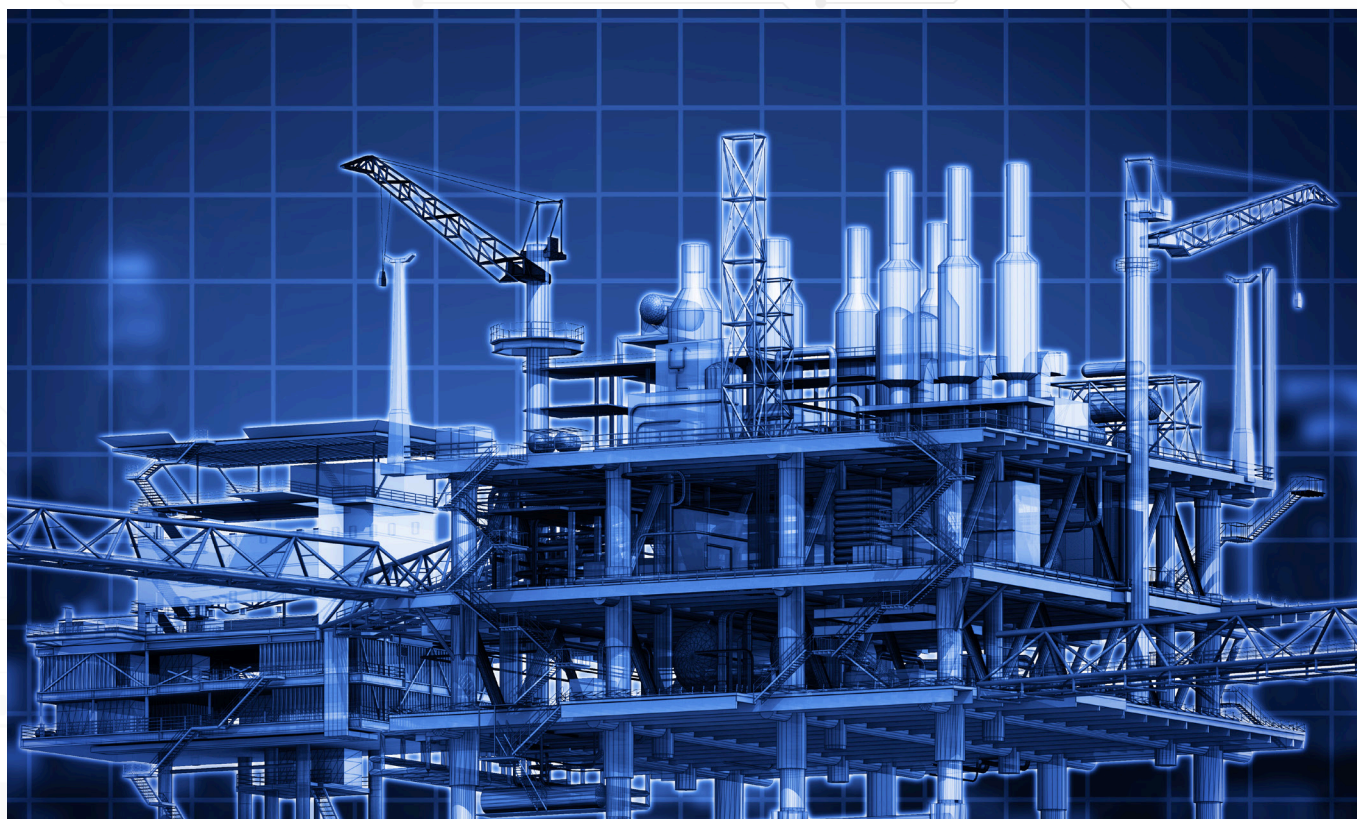
アスペンテックのハイブリッドモデリングのテストには過去1年間で80社を超える企業に参加いただき、30以上の産業データセットを使用してこのアプローチの堅牢性を評価しました。その結果、さまざまな価値の高いユースケースが確認されました。

ここでは、可能性が最も高いユースケースに対するテスト結果やフィードバックに基づいたハイブリッドモデルが提供する独自の利点をいくつかご紹介します。

- 1. モデリングの範囲と影響の拡大:** 複雑なユニットは、生産高、パフォーマンス、品質に関する問題の原因となることも少なくありません。ハイブリッドモデルなら、プロセスエンジニアが第一原理では説明が困難または不可能な機器をモデリングできます（特殊化学反応器モデルなど）。ハイブリッドモデルはモデリングの範囲をプロセスからサイト全体に拡大し、次数低減型ハイブリッドモデルを使用してこれらの大きな問題の解決を可能にします。
- 2. モデリングの大衆化:** 多くの組織では現在、新人エンジニアの割合が高くなっており、同じ情報をもとに仕事をする必要があります。ハイブリッドモデルを用いると、一般的なプロセスエンジニアが専門的なモデリングスキルがなくても運転データと内蔵のデータサイエンスを使用して、信頼性が高く目的に合った機器や設備のモデルを開発できるようになります。
- 3. 目的に合った正確なモデルの作成:** これまでは、各種の目的に合わせてフィッティングしたモデルがさまざまな機能分野で使用されてきました。しかし今後は、プランニングや動的最適化、機器のオンライン監視のために、複雑な挙動を単純かつ正確に表現する次数低減型ハイブリッドモデルを、すべて同じプラントの運転データセットおよびシミュレーションモデルから容易に導き出すことができるようになります。
- 4. より持続的なモデリングの利点:** ハイブリッドモデルは、データドリブンと第一原理の両方の要素を持つため、プラントデータと密接に結びつき、運転設備との同期を持続することが可能です。したがって、純粋な第一原理モデリング以上のモデリングの利点があります。



5. 異なる分野間のコラボレーションの加速: 次数低減モデルを利用することで、異なる分野間のモデルアライアンスが可能になります。例えば、製油所において、ハイブリッドモデルによって厳密な反応器モデルからプランニングモデルを更新することで、情報の共有とコラボレーションが向上します。



価値の高いハイブリッドモデリングの ユースケース



ここでは、業界の企業とのテストが成功したハイブリッドモデリングのユースケースをいくつかご紹介します。

- デジタルツインで解決できるビジネス上の問題の範囲拡大
- 収益性と品質の改善
- 新世代のナレッジワーカー（経験の浅いデジタルネイティブ世代）によるテクノロジーの簡単な適用

製油所およびオレフィンのプランニングモデルの更新

製油所およびオレフィンの利益率は、プラントのプランニング担当者やオペレータが計画に近い生産を毎月達成できるかどうかと密接にかかわっています。計画と実績にギャップが生じていれば、たいていの場合、最新の状態ではないまたは不正確なプランニングモデルが原因と考えられますが、FCCや水素化分解装置など特定の反応ユニットの場合は特にそうです。そのようなモデルを最新の状態に保つための作業は、モデリングのスペシャリストに依存しています。

世界最大規模の石油精製企業の1つは、ハイブリッドモデリングのワークフローに従って必要な頻度でこれらの詳細な反応器モデルの最新版を作成する能力があれば、1日あたり20万バレルの一般的な精製所の場合、控えめに言っても年間1,000万米ドルを超える価値をもたらすと見積もっています。これは、多くの石油精製企業が生産しなければならない製品の劇的な変化に直面している今、非常にタイムリーです。

機器の監視

ユニットレベルおよび機器レベルのモデルに適したアプリケーションで、オンライン展開して、運転の生産性を高め、パフォーマンスや安全性に関する問題を解決して、コンプライアンスを向上させるためのアドバイスをオペレータに提供するものは多数あります。一例として、ファウリングとクリーニングのスケジュールに関するアドバイスを提供するための、あるいはさらに閉ループの意思決定を行うための予熱用熱交換器トレインモデルが挙げられます。ハイブリッドモデルなら構築、更新、実行が容易です。ファウリング監視ユースケースだけで、単一の熱交換器トレインに対して年間数千万ドルの価値を実現できます（実際に測定されたケーススタディに基づく）。

また別の例として、触媒の劣化と寿命延長のための製油所反応ユニットモデルが挙げられます。このようなモデルは、触媒の寿命を延長して生産性／パフォーマンスを向上させることで、触媒反応ユニットごとに年間500万から1,000万米ドル相当の経済的価値を生み出すことが可能です。



高性能特殊ポリマープロセスのモデリング

特殊ポリマープロセスは品質問題や無駄が発生しがちですが、ポリマー反応器はもともと複雑で、正確にモデリングするのは難しく、時間がかかります。そのようなプロセスのモデリングにおけるエキスパートの需要は、供給をはるかに上回っています。特殊ポリマーのユースケースでは、ハイブリッドモデルが重要な重合反応ユニットのパフォーマンスを正確に示すことができます。

当社では、すでに別のポリマー生産運転アプリケーションでのハイブリッドモデルの有効性をテスト済みです。実際のデータを使用して、他のどんな手法よりもはるかに良い結果と経済上の利点を達成しています。そのデータセットのテストは大手ポリマーメーカーと共同で行いましたが、同社はこれまで解決できなかった問題を解決できることで、このモデルの価値が1ラインあたり年間100万ドルは下らないと予想しています。

プラント全体のモデリングによるオプションニングと最適化

業界では持続可能性（および俊敏性）に関するビジネス問題を解決するためにサイト全体のモデルを必要としています。これらのモデルを構築するのは困難です。次数低減モデルならモデルを企業の観点にまで要約できるので、経営陣の認識と戦略的意思決定に必要な情報が得られます。サイト全体のモデルをより素早く直感的に実行できるようになり、迅速な意思決定を促し、装置を最適化して、安全性、持続可能性、および収益性を実現できます。

また、これらのユースケースの例だけでなく、AIを利用したハイブリッドモデルは、ビジネスで使われているインテリジェンスシステムとやりとりして、人間の働き方を根本から変えるでしょう。モデルの構築や再構築に多くの時間を費やしたり、スプレッドシートでデータストリームを手動で処理したりする代わりに、従業員がより価値の高い業務を行い、やるべきことについて将来を見据えたデータ主導の意思決定を行うようになることで、システムレベルのリスクを軽減しながら、全体的な精度、効率、パフォーマンスを向上させることができます。

AI



AIは、さまざまな産業分野で予測的洞察を提供できる能力を急速に発揮しています。アスペンテックは、AIがプロセス産業のプロセスや機器に対する実践的な洞察を提供するうえで、依然として専門知識が鍵になると確信しています。当社がAIと専門知識を融合するハイブリッドモデリングアプローチを考案し、開発したのはそのためです。当社が構想する3種類のハイブリッドモデリングは、ビジネス価値の高いユースケースを幅広くカバーしており、オペレータやエンジニアに現在の環境で測定可能な価値をもたらします。アスペンテックは、80社を超える当社の主要顧客の多くが貴重なプロセス運転データとモデルを共有し、ワークフローと機能性をテストし、直感的な使いやすさを追求するための支援を行いました。

アスペンテックは、モデルアライアンステクノロジーによって自社の既存ソフトウェアスイート全体にハイブリッドモデリング機能を展開します。このテクノロジーは、安全性、信頼性、持続可能性、および収益性の高い装置の運用に必要なさまざまな機能分野で目的に合ったモデルを同期させるというものです。

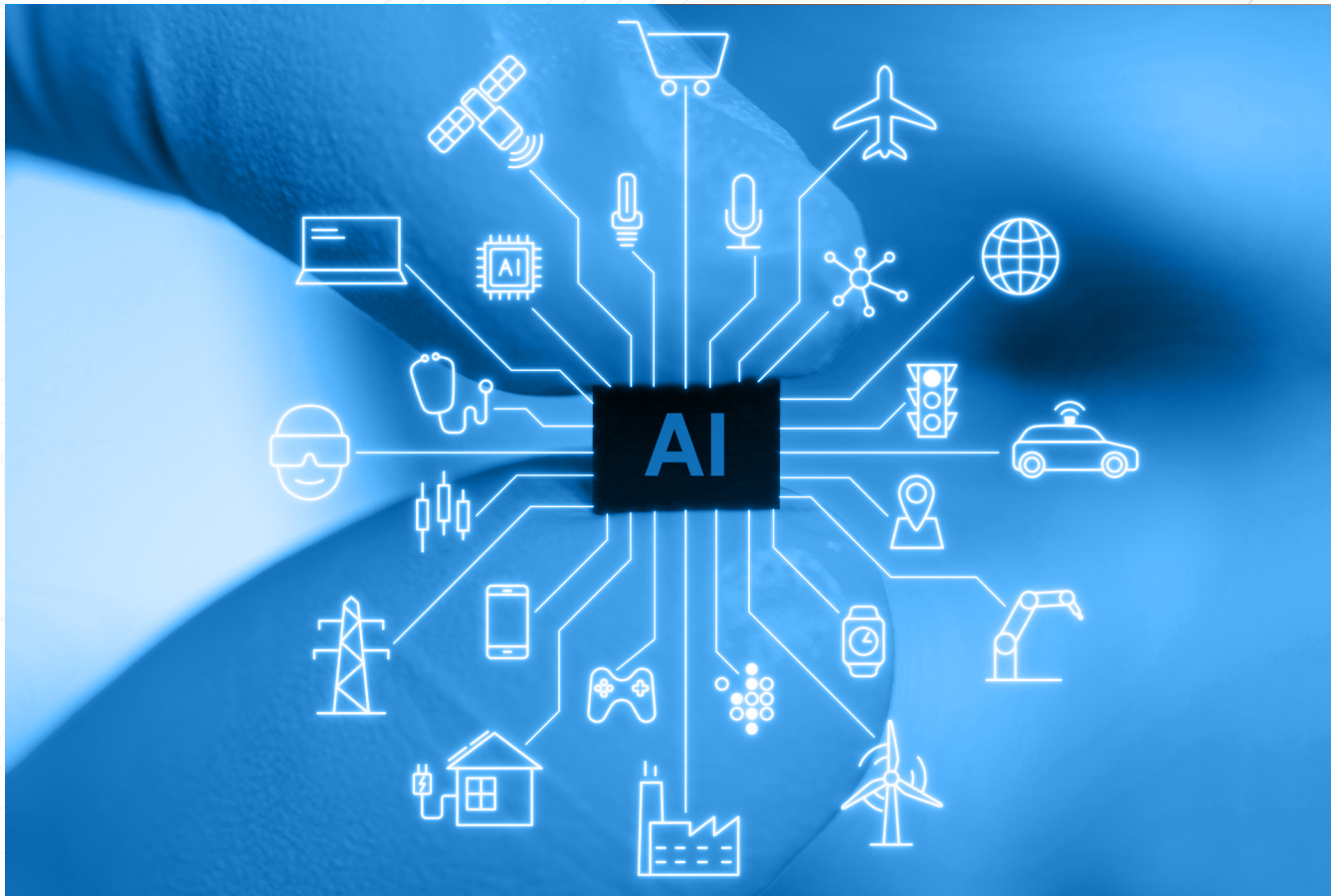
現在、プロセス産業の組織は前例のない課題に直面しています。需要の不確実性、原料や原油価格の変動、持続可能性のプレッシャー、および国際競争にさらされるなかで、自社の未来に向けた道筋をはっきりと描くには、俊敏性と洞察、そして全社規模の分析が欠かせません。これを何十年分もの経験を失う退職の波が押し寄せるなかで実現するとなると一段と困難になります。

今こそ、未来への道を整えるためにデジタル化とAIを取り入れるべきときです。これにより、何十年と使ってきた強力なツールをさらに強化し、より高度な自動化を行い、モデルから実用的な洞察を得て、それらのツールのリモート操作を実現できます。そうすることで、プロセス産業のユニットおよびプラントの設計や運用におけるAIの大衆化につながります。

エネルギー、化学、エンジニアリング、および関連産業の主要企業は、このテクノロジーが即座に提供できる優れた競争力に目を向け、すでにアスペンテックと連携して取り組んでいます。これらの利点により、利益率、持続可能性、設備コストの節約のほか、持続可能なビジネス上の優位性をもたらす経済的価値へと転換することができます。



ぜひ今すぐアスペンテックまでご連絡ください。デジタル化とAIがいかに御社のビジネスに役立つかについてのブリーフィングや、御社の業績を上げるために今すぐ適用できる詳細なアセスメントについてご案内いたします。



執筆協力者:

Ron Beck,
アスペンテック社、マーケティング戦略担当ディレクター

Gerardo Munoz,
アスペンテック社、製品マーケティング担当シニアスペシャリスト

アスペンテクノロジーについて

アスペンテクノロジー（アスペンテック）は、アセット最適化ソフトウェアの世界的リーダーです。当社のソリューションは、装置の設計、運転、保守のライフサイクルを最適化することが極めて重要となる、複雑な業界環境に対応します。アスペンテックは、数十年にわたって培ったプロセスモデリングの専門知識と人工知能を独自の方法で組み合わせています。当社の専用ソフトウェアプラットフォームは、アセットのライフサイクル全体で高い利益を提供することで、ナレッジワークを自動化し、持続可能な競争優位性を築きます。これにより、さまざまな資本集約型業界の企業が、稼働時間を最大化させ、パフォーマンスの限界を押し上げ、より高速かつ安全に、長期にわたり、より環境に配慮した方法でアセットを運用できるようになります。

詳細は [AspenTech.com](https://www.aspentech.com) をご覧ください。

© 2020 Aspen Technology, Inc. AspenTech®, aspenONE®, Aspenリーフロゴ、aspenONEロゴ、およびOPTIMIZEはAspen Technology, Inc.の登録商標です。無断複写・転載を禁じます。AT-06245

