2022年度　JPECフォーラム

処理原油・原料油成分
リアルタイム予測技術開発

2022年5月11日

JPEC　ペトロリオミクス技術研究室

ー禁無断転載・複製　JPEC　2022ー

Japan Petroleum Energy Center

目次

１．技術開発の狙い

２．2021年度技術開発
①原油・留分一般性状の予測技術開発
②原料油データベースの構築

３．まとめ

グリーン化事業全体の技術開発の狙い

JPEC
Japan Petroleum Energy Center

＜事業開境＞
①燃料需要減・**需要構成の急速な変化**
②世界的な**脱炭素化**の流れの加速
・カーボンリサイクル、ケミカルリサイクルの実現に向けた取組みの加速
・GHG削減対策の一環として欧米等の製油所ではバイオマス由来油と石油留分の混合処理（Co-Processing）技術に関する検討が進んでいる

このような事業環境において、今後も製油所が石油・石化製品を安定供給し続けるためには、
①更なる操業最適化による**エネルギー消費量削減**
②**低炭素基材**（廃プラ再生油、バイオマス由来油、合成燃料）**導入による原料多様化**、需要構造の変化に対応した生産の実現

地球温暖化問題に対応した製油所への転換（＝製油所のグリーン化）に貢献する

本テーマの技術開発内容と全体像

技術開発内容

足元への対応

①原油・・・製油所デジタルトランスフォーメーション化

1）原油Data(Assay)の更新及びCDU入口の原油成分・性状のリアルタイム予測を行うAIモデル①②開発

2）原油成分・性状が得られるオンライン分析技術の選定

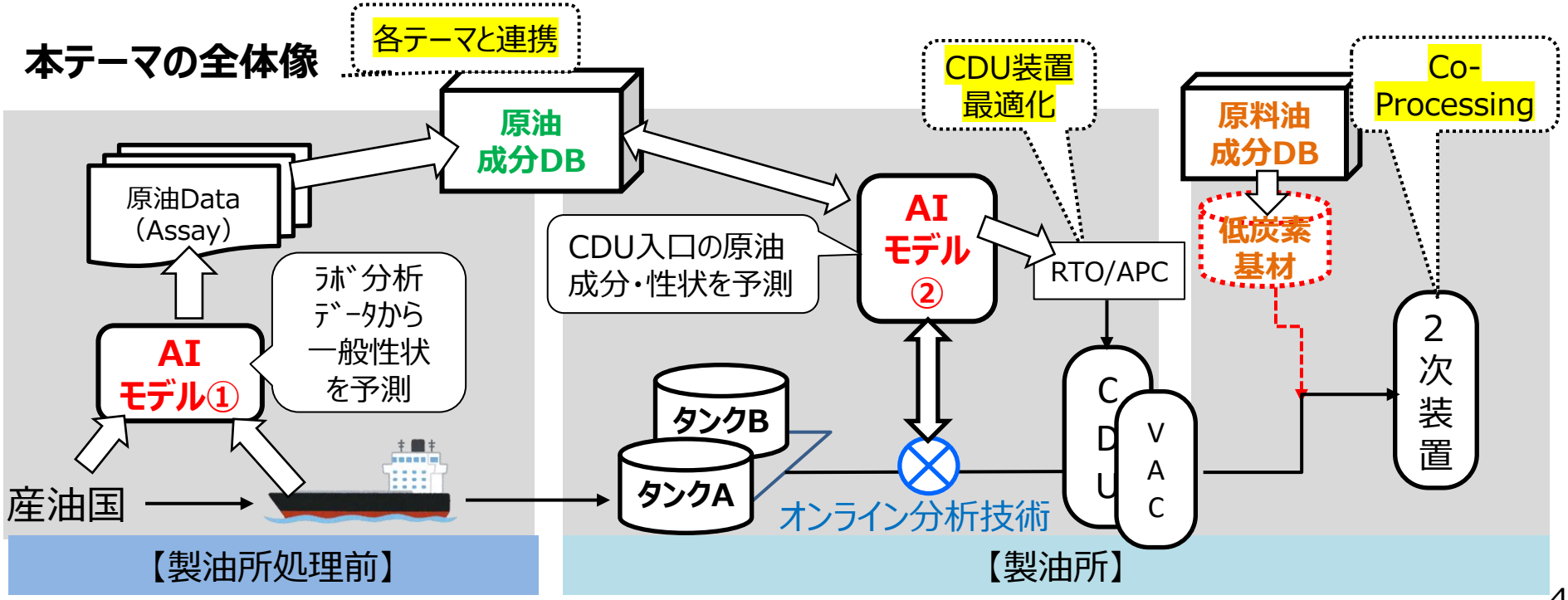
3）原油成分・性状データを有するDB（データベース）構築

将来への対応

②原料油(廃プラ再生油・バイオマス由来油・合成燃料) ・・・製油所のコプロ対応化

1）低炭素基材の成分・性状データを有するDB構築

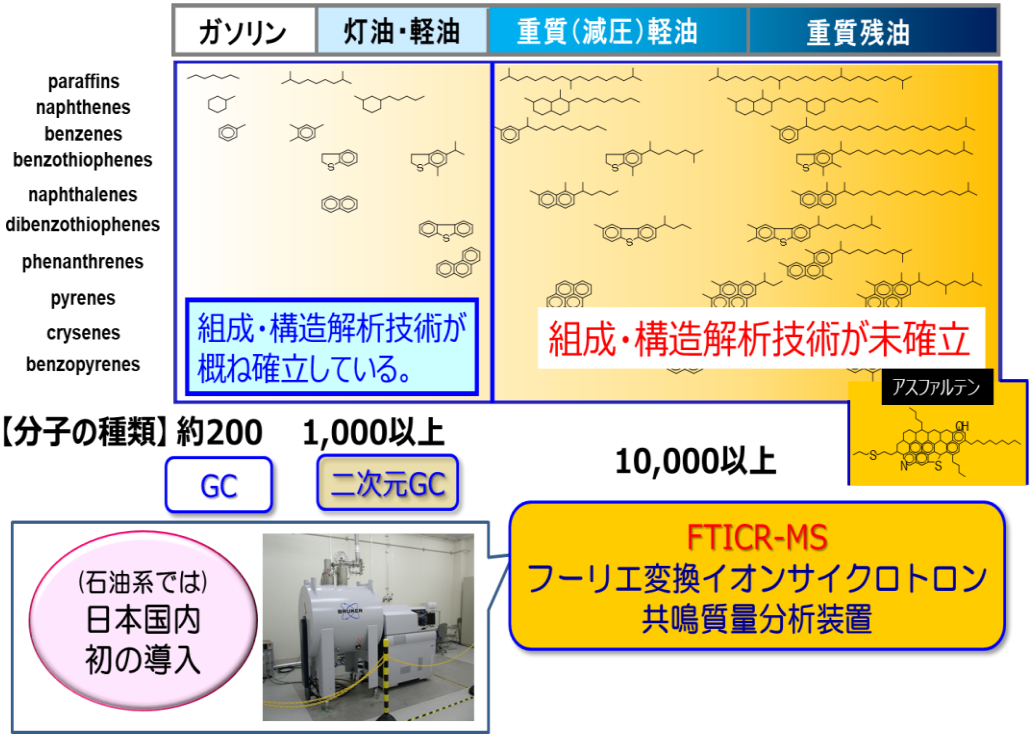
本テーマの全体像



原油・(原料油)成分・性状予測のイメージ

- 原油・留分の「10万以上の成分」「一般性状＝Assay」を予測するAIモデル①②を開発
- 予測した出力結果を製油所CDU装置を最適制御のためのインプットデータして使用し、エネルギー消費量削減に貢献する

【JPEC】
原油・留分の10万以上の成分（下記）
と一般性状を実測



登録

【製油所】
処理原油を
リアルタイムに
ラボ/オンライン
分析

【クラウド】
データベースと
AIモデル①②

モデルの
再学習

原油・留分の10万以上の成分
と一般性状を予測

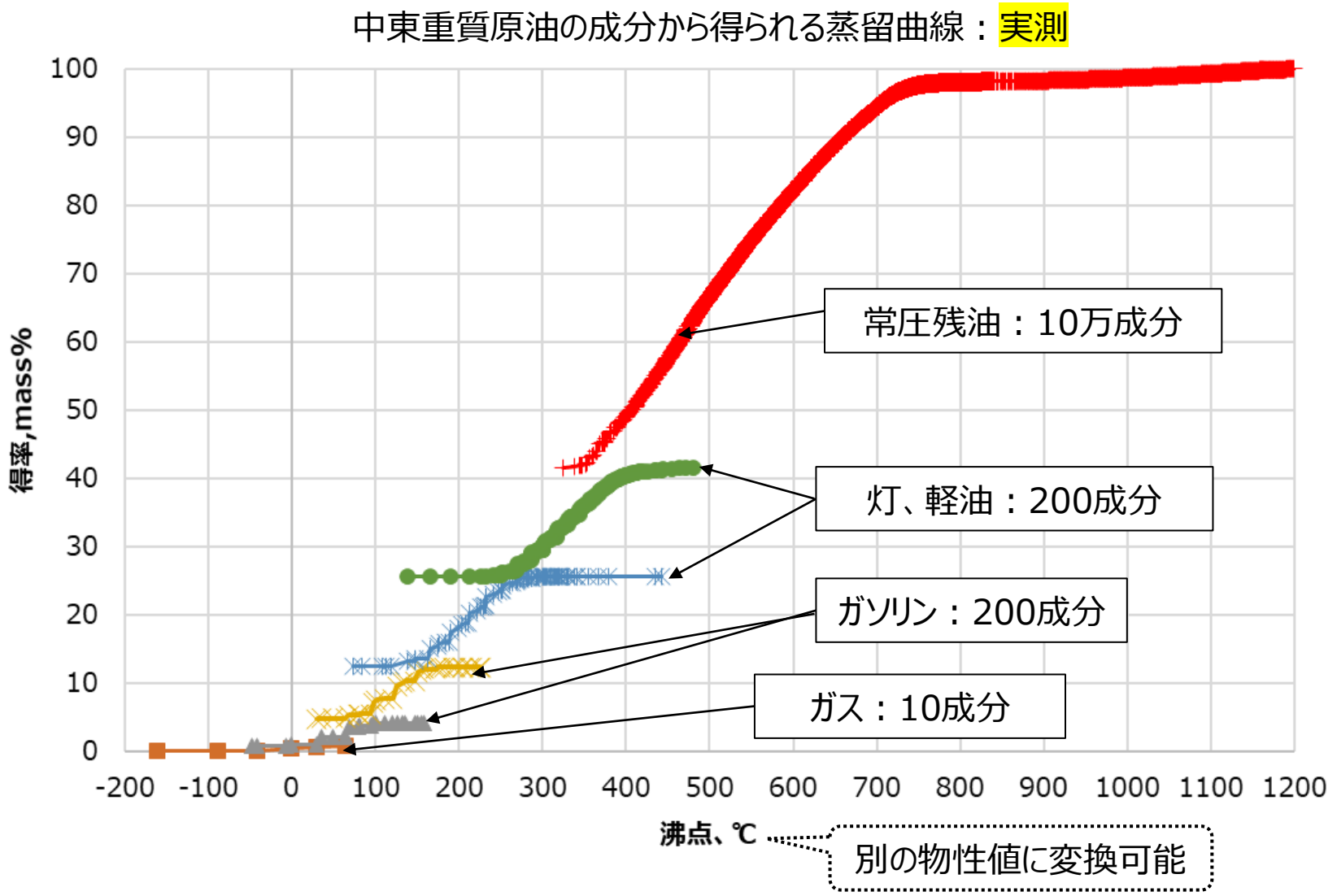
出力結果

【製油所】
CDU装置の
最適制御

- 将来的には、原料油分野にも展開することを想定

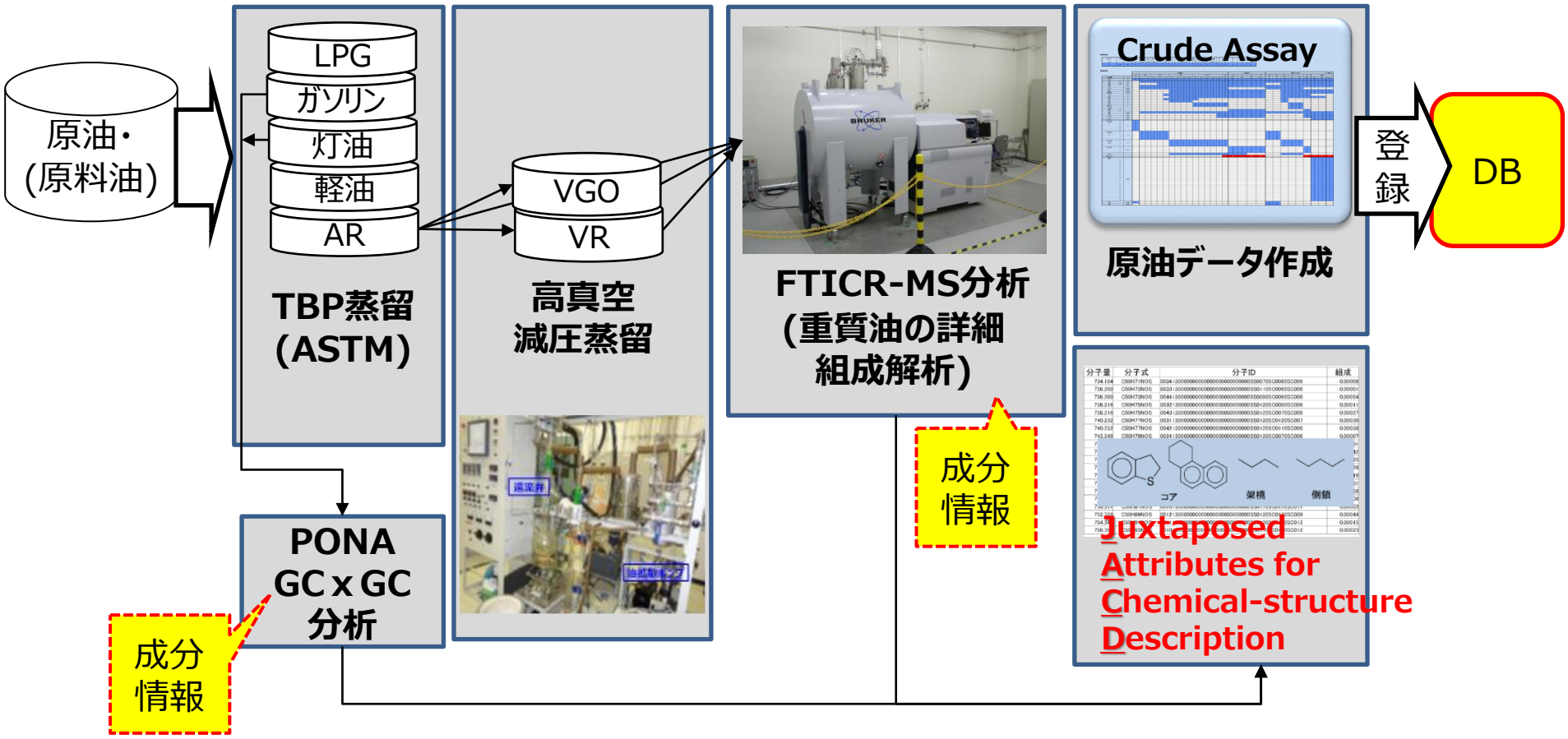
原油成分から得られる情報の例

- 原油・留分の「10万以上の成分」と「物性推算」から、蒸留曲線、動粘度、組成などが計算可能



原油・(原料油)DBの作成方法

- JPECが開発した「高真空蒸留装置によるAR留分蒸留」、「FTICR-MS分析装置を用いた重質油の成分分析」に「PONA-GC分析装置を用いたガソリン成分」、「GCxGC分析装置を用いた灯軽油成分」を加え原油・(原料油)DBに登録



DBに登録する原油選定方針

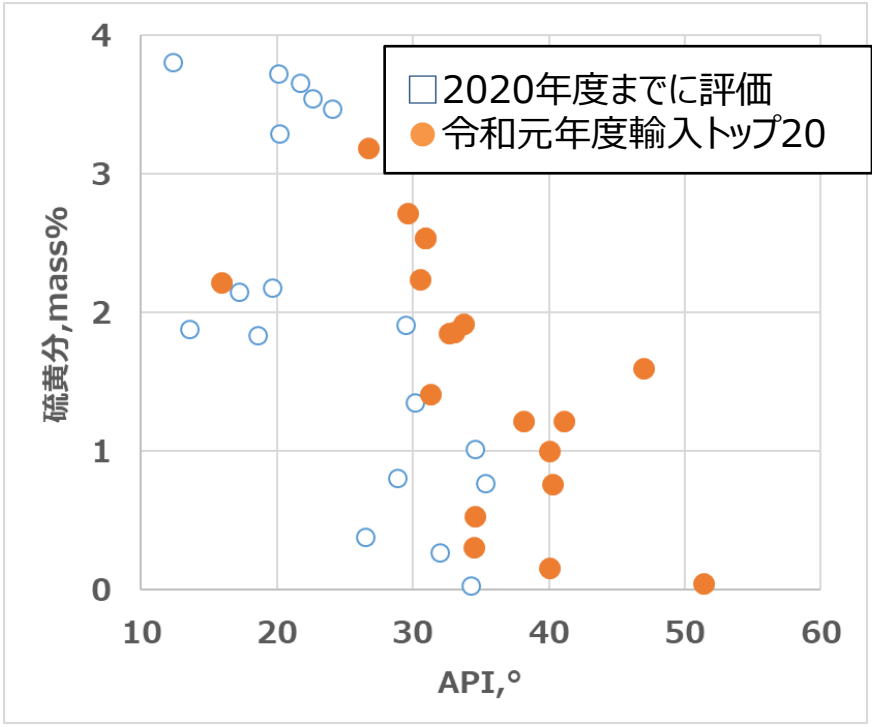
- 今期の作成方針（左図）
  - ・国内輸入原油トップ20を中心に評価。
  - ・同一原油のロット違い、季節変動も確認。
- 2020年度までに評価した原油も含めて登録することで、その範囲を拡大する。

原油名と産油国

ランキング	産油国	原油名		輸入量、ｋL／年
		日本語	英語	
1	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ・ｴｷｽﾄﾗ・ﾗｲﾄ	Arab-E-L	26,618,296
2	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ・ﾗｲﾄ	Arab-L	22,969,545
3	UAE	ﾏｰﾊﾞﾝ	Murban	20,937,579
4	UAE	ﾀﾞｽ	Das	20,032,829
5	Kuwait	ｸｳｪｰﾄ	Kuwait	11,706,239
6	UAE	ｱｯﾊﾟｰ・ｻﾞｸﾑ	U-Zakum	7,667,650
7	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ・ﾍﾋﾞｰ	Arab-H	7,659,329
8	Qatar	ｶﾀｰﾙ	Qatar	4,996,484
9	Russia	ｿｺｰﾙ	Sokol	4,377,964
10	Qatar	ｱﾙ・ｼｬﾋｰﾝ	A-Shahen	4,244,379
11	Qatar	ｶﾀｰﾙ・ﾏﾘｰﾝ	Qatar-M	3,427,764
12	Oman	ｵﾏｰﾝ	Oman	3,352,539
13	Kuwait	ｸｳｪｰﾄ・ｽｰﾊﾟｰ・ﾗｲﾄ・ｸﾙｰ	Kwait-Sl	2,986,400
14	Bahrain	ﾊﾞﾉｺ・ｱﾗﾌﾞ・ﾐﾃﾞｨｱﾑ	Banoc-Am	2,911,341
15	Russia	ｴｽﾎﾟ・ﾌﾞﾚﾝﾄﾞ	Espo-B	2,854,377
16	ｱﾒﾘｶ合衆国	WTIﾐｯﾄﾞﾗﾝﾄﾞ	Wtim	2,769,318
17	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ・ｽｰﾊﾟｰ・ﾗｲﾄ	Arab-S-L	2,459,838
18	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ・ﾐﾃﾞｨｱﾑ	Arab-M	2,260,623
19	Ecuador	ﾅﾎﾟ	Napo	2,080,949
20	Iraq	ﾊﾞｽﾗ・ﾗｲﾄ	Basrah-L	2,011,168

METI統計・令和元年度原油輸入実績データを加工

DB化される、原油のAPI/Sの関係



DBに登録する原油油

Japan Petroleum Energy Center

□ 廃プラ再生油・バイオマス由来油・合成燃料について、各成分・性状データを有するDBを構築する

廃プラ再生油

廃プラ

粉砕
脱塩
熱分解

軽質～重質留分

バイオマス由来油

廃食油
パーム油
菜種油油
大豆油

エステル化

脂肪酸メチルエステル

R^1COOCH_3
R^2COOCH_3 +
R^3COOCH_3

FAME
(Biodiesel)

CH_2-OH
$CH-OH$
CH_2-OH

グリセリン

合成燃料

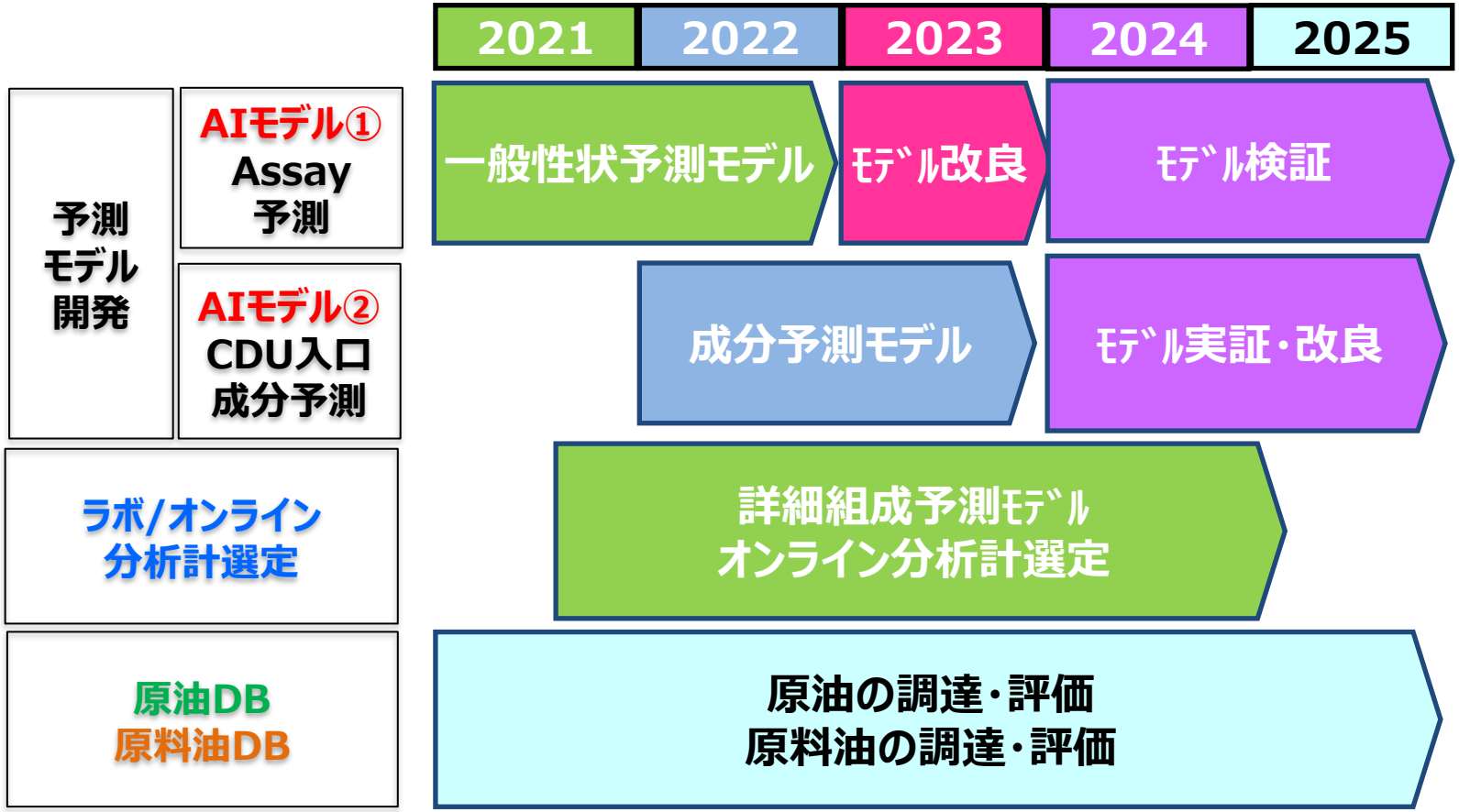
H2、CO
(H2O、CO2
を共電解)

FT合成

パラフィン系炭化水素
灯油～潤滑油留分

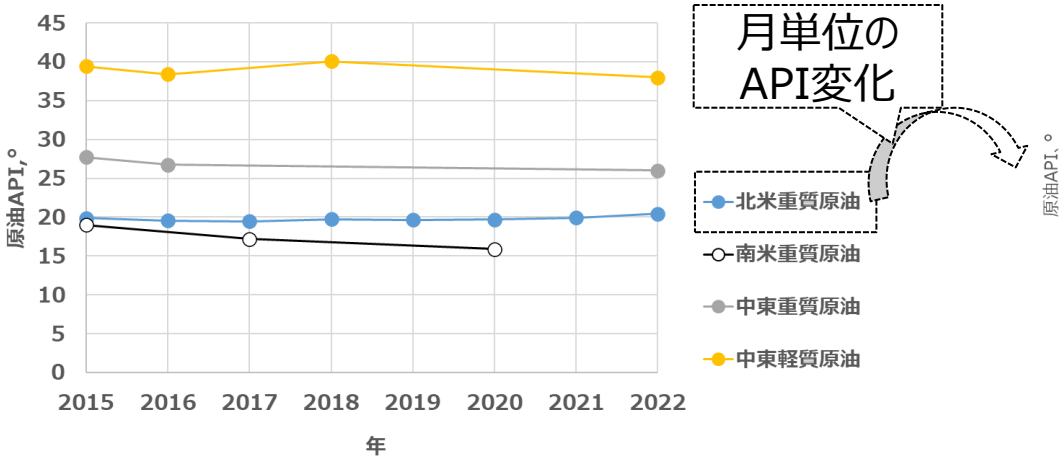
技術開発スケジュールと2021年度実施内容

- 原油・留分のAIモデル②開発と製油所展開、原油及び原料油の10万成分のDB(データベース)構築を5年間の主な開発目標とする。
- 2021年度実施内容
  AIモデル①「一般性状予測」のプロトタイプを明治大学・金子准教授と共同開発 ← 報告
  ラボ／オンライン分析計の技術調査
  原油、原料油の調達・評価・DB化を実施 ← 原料油について報告

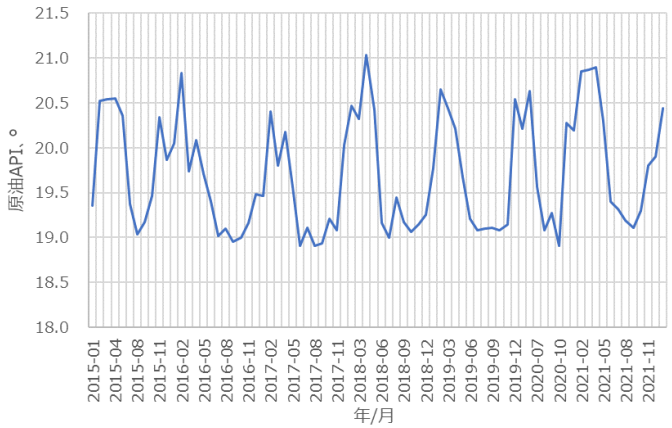


AIモデル①開発背景　処理原油の課題

① 原油は同じ原油名でも荷揚げ・処理時期により性状が異なるケースがあり、原油Data(Assay)との乖離が発生し、製油所生産計画との差異を生じる。

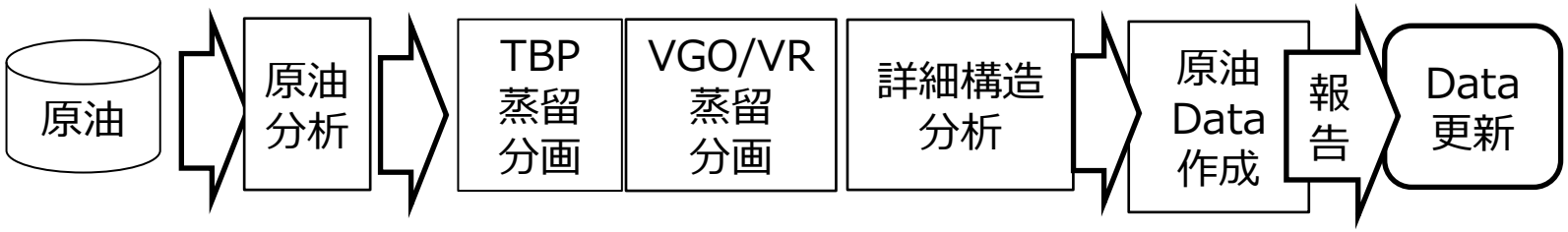


出展：JPEC,外部文献データを加工



出展：https://www.crudemonitor.ca/

② 原油Data更新には蒸留・分析作業が必要であり、数か月を要している。



③ 単品原油Dataを合成した混合原油一般性状を製油所CDU制御に用いているケースはあるが、実際の組成・性状を制御に反映させている国内製油所は少数と推測している。

AIモデル①の概要

- AIモデル①「一般性状予測」では、少ないインプットデータ≒説明変数から、アウトプット≒原油・留分の「一般性状200項目」を高精度に予測することを目指す。
- インプットデータとして、産地、原油名、原油一般性状５項目(密度、硫黄分など)を使用した。

過去に分析した原油・留分の一般性状実測

原油一般性状

試料名称			***
密度	15℃	g/cm^3	
蒸気圧		kPa	
動粘度	30℃	mm^2/s	
動粘度	40℃	mm^2/s	
動粘度	50℃	mm^2/s	
流動点		℃	
引火点		℃	
酸価		mg･KOH/g	
残炭分		質量%	
硫黄分		質量%	
窒素分		質量ppm	
灰分		質量%	
水分		容量%	
水でい分		容量%	
塩分		質量ppm	
元素分析	炭素	質量%	
元素分析	水素	質量%	
硫化水素		質量ppm	
ワックス分		質量%	
ヘプタン不溶解分		質量%	
ドライスラッジ		質量%	
全塩素		質量ppm	
無機塩素		質量ppm	
バナジウム		質量ppm	
ニッケル		質量ppm	
鉄		質量ppm	
ナトリウム		質量ppm	
カルシウム		質量ppm	
水銀分		質量ppb	
砒素		質量ppm	

オンライン分析が可能な項目

留分一般性状

分析項目			LPG	LSRN	HSRN	KERO	GO	VGO	AR	VR
			コールドトラップ	0～80	80～150	150～250	250～360	360～580	360以上	580以上
得率		質量%								
密度	15℃	g/cm^3								
動粘度	0～180℃	mm^2/s								
硫黄分		質量%								
メルカプタン硫黄		質量ppm								
窒素分		質量ppm								
塩基性窒素		質量ppm								
アニリン点		℃								
流動点		℃								
煙点		mm								
析出点		℃								
濁り点		℃								
目詰まり点		℃								
セタン指数										
屈折率										
酸価		mg･KOH/g								
残炭分	ミクロ法	質量%								
ワックス分		質量%								
全塩素		質量ppm								
炭化水素組成(GC)	C1～C5	容量%								
炭化水素組成(GC)		容量%								
炭化水素組成(HPLC)		容量%								
炭化水素組成(TLC)		質量%								
GC蒸留		質量%								
金属分	硫酸灰化-アルカリ融解処理									
	V	質量ppm								
	Ni									
	Fe									
	Na									
	Ca									
	Al									
	B									
	Ba									
	Co									
	Cr									
	Cu									
	K									
	Mg									
	Mn									
	Mo									
	P									
	Pb									
	Si									
	Sn									
	Zn									
水銀分		質量ppb								
砒素		質量ppm								

測定（予測）する項目

【受け入れ原油】

AIモデル①

【インプットデータ】
産地、原油名
原油性状5項目

統計手法
機械学習手法
など

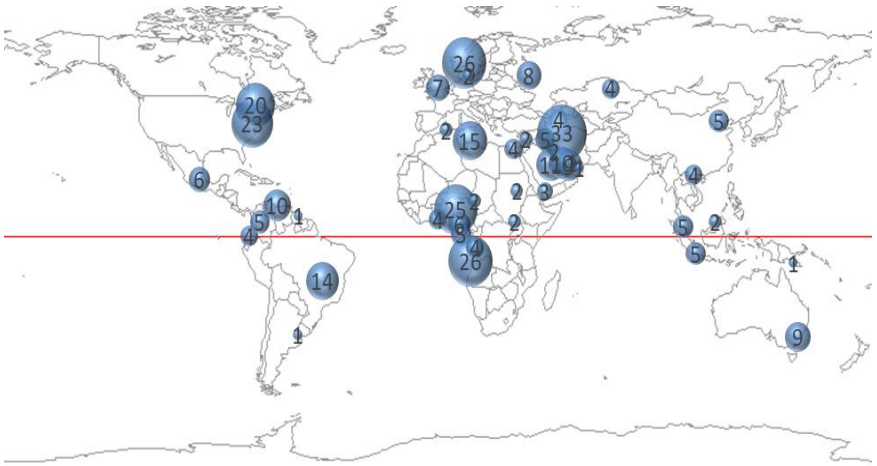
【受け入れ原油】
原油・留分の
一般性状
200項目

予測

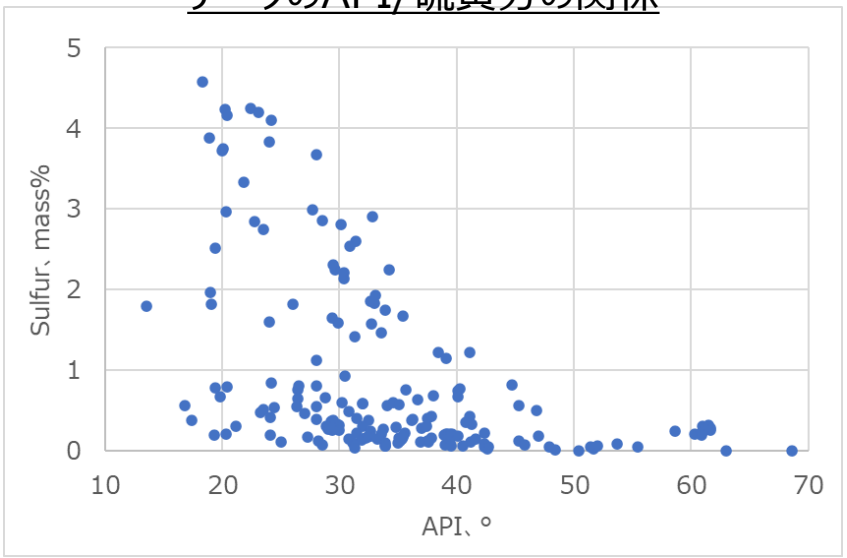
AIモデル①「一般性状予測」の開発

教師データとして、世界各国の100原油以上を使用

データバブルチャート



データのAPI/硫黄分の関係



14の統計手法・機械学習手法などを検討

線形手法

- OLS：Ordinary Least Squares
- PLS：Partial Least Squares Regression
- RR：Ridge Regression
- LASSO：Least Absolute Shrinkage and Selection Operator
- EN：Elastic Net
- LSVR：Linear Support Vector Regression
- GPR_0：Gaussian Process Regression (Linear kernel)

非線形手法

- NLSVR：Non-Linear Support Vector Regression（Gaussian kernel）
- DT：Decision Tree
- RF：Random Forests
- GPR_1 ～ 10：Gaussian Process Regression (Nonlinear kernel)
- GBDT：Gradient Boosting Decision Tree
- XGB：eXtreme Gradient Boosting
- LGBM：Light Gradient Boosting Model

AIモデル①「留分一般性状予測」の予測結果１/２

JPEC Japan Petroleum Energy Center

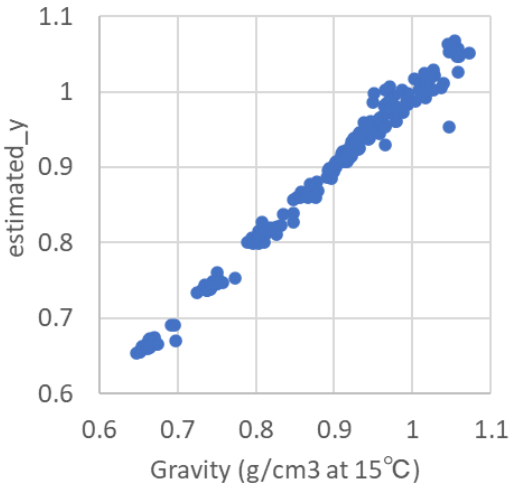
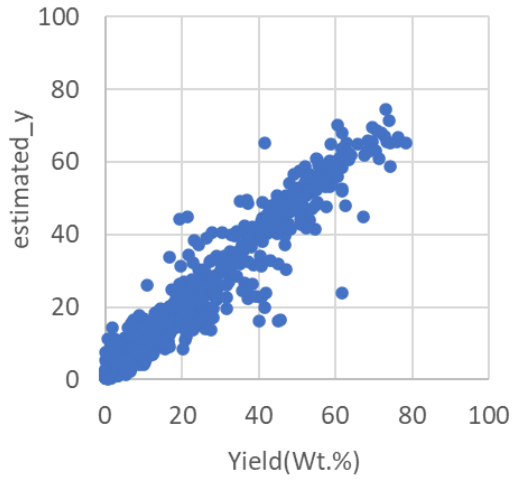
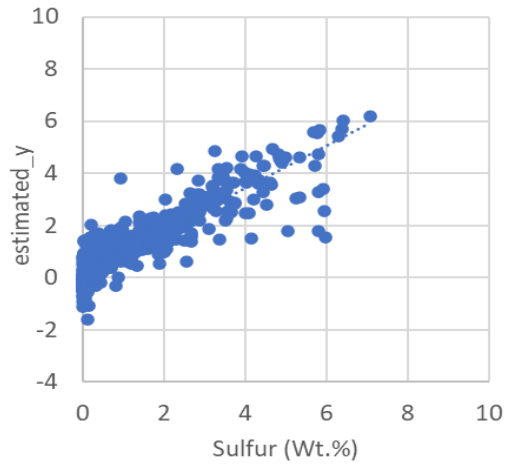
- 留分の「一般性状項目」のうち、決定係数R2＞0.7が約60%と良好であった。
- 製油所処理において、主要項目とされる留分密度、得率、硫黄分の予測精度も良好であった。

明治大学・金子研提供

項目	単位	R2	RMSE
Gravity(15℃)	g/cm3	0.99	0.01
Yield	wt%	0.95	3.5
Viscosity(30℃)	cSt	0.95	0.61
Resin(TLC)	wt%	0.91	2.7
Saturate(TLC)	wt%	0.91	5
CCR	wt%	0.87	3.2
Basic Nitrogen	mg/kg	0.87	181
Pour Point	℃	0.87	11
Refractive Index		0.87	0.005
Vanadium	mg/kg	0.86	56
Saturate(HPLC)	vol%	0.85	3
Paraffins(GC)	vol%	0.81	8.9
Sulfur	wt%	0.80	9.9
Cloud Point	℃	0.77	8.3
Di-aroma(HPLC)	vol%	0.77	1.9
Nickel	mg/kg	0.77	23
Cetane Number		0.76	3.2
Nitrogen	mg/kg	0.76	1121

項目	単位	R2	RMSE
Poly-aroma(HPLC)	vol%	0.76	1.3
Naphthenes(GC)	vol%	0.74	8
Saturate(Chromato)	wt%	0.72	4.8
Total Acid Number	mg KOH/g	0.70	0.39
CFPP	℃	0.66	4.7
Mercaptan Sulfur	mg/kg	0.64	46
Smoke Point	mm	0.62	2.8
Freeze Point	℃	0.51	12
Poly-Resin(Chromato)	vol%	0.46	2.2
Di-aroma(Chromato)	wt%	0.26	1.1
Poly-aroma(Chromato)	wt%	0.2	3.3
Chlome	mg/kg	0.09	78
Olefins(GC)	vol%	0.06	0.43
Mono-aroma(HPLC)	vol%	0.03	3.8
Iorn	mg/kg	-0.01	21
Mono-aroma(Chromato)	wt%	-0.02	3.6
Polarity-Resin(Chromato)	wt%	-0.02	27
Sillicon	mg/kg	-0.05	5.6

AIモデル①「留分一般性状予測」の予測結果２/２

予測項目	各留分・密度,g/cm3	各留分得率,wt%	各留分・硫黄分,wt%
予測／実測の関係図			
データ数	206	1984	930
決定係数 R2	0.99	0.95	0.80
二乗平均平方根誤差 RMSE	0.01	3.5	9.9

原料油DB化の背景・目的

【背景】

製油所グリーン化の方策の一つとして、２次装置を利用した石油系燃料・低炭素基材(原料油)のCo-processingがあり、バイオマス由来の油を中心として欧米で導入が進んでいる。
今後、日本でも導入が進むことが予想される。

しかし、石油系燃料に比べ低炭素基材の情報は少なく、Co-processing時の装置への影響（触媒被毒・装置腐食・配管閉塞等）の事前評価が困難である。

また、今後は低炭素基材の種類もバイオ以外のものへ多様化していくと予想されるがバイオ以外のCo-processingはまだ事例も少なく、不明な点が多い。

【目的】

多様な燃料を処理し、ニーズに応じ柔軟なCo-processingを実現するための基盤となる低炭素基材（廃プラ再生油・バイオマス由来油・合成燃料）性状・組成のDBを構築し、各原料油を横並びで整理する。

原料油DB構築に向けた2021年度の取り組み内容

実施事項	現在までの進捗状況
調達方針検討	・国内製油所での使用を前提とし、日本で入手できる廃プラ再生油・バイオマス由来油・合成燃料を検討対象として選定 ・製造方法・原料別に調達マトリックスを作成 ・現時点ではどの技術・原料の油が主流になるか予測することが困難なため、将来入手可能性があるものを広く調達
評価	・原油・留分の評価項目以外に、廃プラ再生油・バイオマス由来油・合成燃料の独自評価項目を選定 ・低炭素基材11種を分析して、一般性状をDBに登録した。

●：廃プラ再生油　▲：バイオマス由来油

不純物＼留分	未精製・原料	懸念される影響
Cl、Br	●	触媒被毒、装置腐食
Si	●	触媒被毒、配管閉塞
含酸素化合物、酸価	▲	装置腐食
水分	▲	装置腐食
N	●	触媒被毒、アンモニウム・NOxの生成
Na、K	▲	不明
テレフタル酸	●	配管閉塞

原料油の評価結果

- 装置腐食や触媒被毒の原因となる塩素、窒素、水分 などを高濃度に含有している低炭素基材があることが分かった。
  （後のセッションで詳細報告）

				試料名			
				石油系	廃プラ再生油	バイオマス由来油	合成燃料
				中東重質原油AR(360℃+)	ABS+PE熱分解油	CPO(パーム油)熱分解油 分留品	GTL
				未精製	精製油	精製油	精製油
試験項目	密度		g/cm3	0.9941	0.8455	0.8055	0.7782
	酸価		mgKOH/g	<0.05	0.05	12.5	0.01
	水分		質量ppm		580	2020	86
	流動点		˚C		15	-22.5	-37.5
	ｱﾆﾘﾝ点		˚C		56.4	54.1	94.2
	元素分析	C	質量%	84.2	86.0	80.0	84.8
		H	質量%	10.4	12.1	13.1	15.2
		O	質量%	0.4	0.2	2.4	<0.1
	硫黄分		質量ppm	5	112	6	<1
	窒素分		質量ppm	2300	16000	16	1
	塩素分		質量ppm	<10	<50	180	<50

技術開発まとめ、2022年度の主要課題

	項目	2021年度の技術開発	2022年度の主要課題
原油	AIモデル①「一般性状予測」のプロトタイプ作成	• 原油及び留分の予測精度は、決定係数R2＞0.7が約60%と良好であった。	• AIモデル①の説明変数に機器分析スペクトルを追加して予測精度を向上する。 ※将来のオンライン分析計も想定
	ラボ／オンライン分析計の技術調査	• 特許、文献調査を行った。 • 組成情報が得られるFTIR、NMRと蒸留情報が得られるガスクロが用いられていることが分かった。	• AIモデル②に用いる分析計の候補を選定する。
	原油成分・性状データを有するDB構築	• 2020年度までに評価した原油と今期評価原について、DB化した。	• 評価継続。 • 外部へのDB公開に向けたクラウドシステムを設計する。
原料油	低炭素基材の成分・性状データを有するDB構築	• 原料油の調達方法を調査し、数種について一般性状を評価した。	

謝辞

本研究は経済産業省・資源エネルギー庁の
補助事業として実施されました。
ここに記して、謝意を表します。