

2023年度 JPECフォーラム

処理原油成分
リアルタイム予測技術開発

2023年5月10日

JPEC ペトロリオミクス技術研究室

1. 技術開発の狙い

2. 2022年度技術開発

- ①原油・留分のデータベース構築 & 予測モデル開発
- ②低炭素原料のデータベース構築

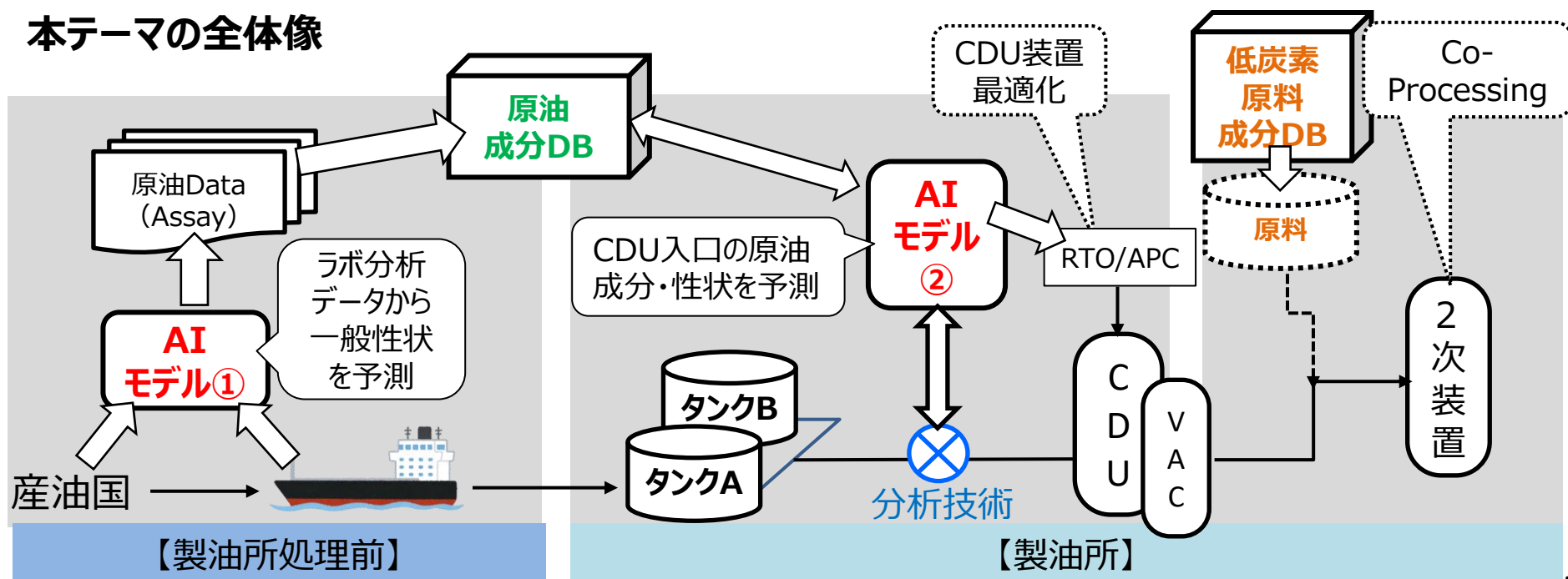
3. まとめ

本テーマの技術開発内容と全体像

技術開発内容

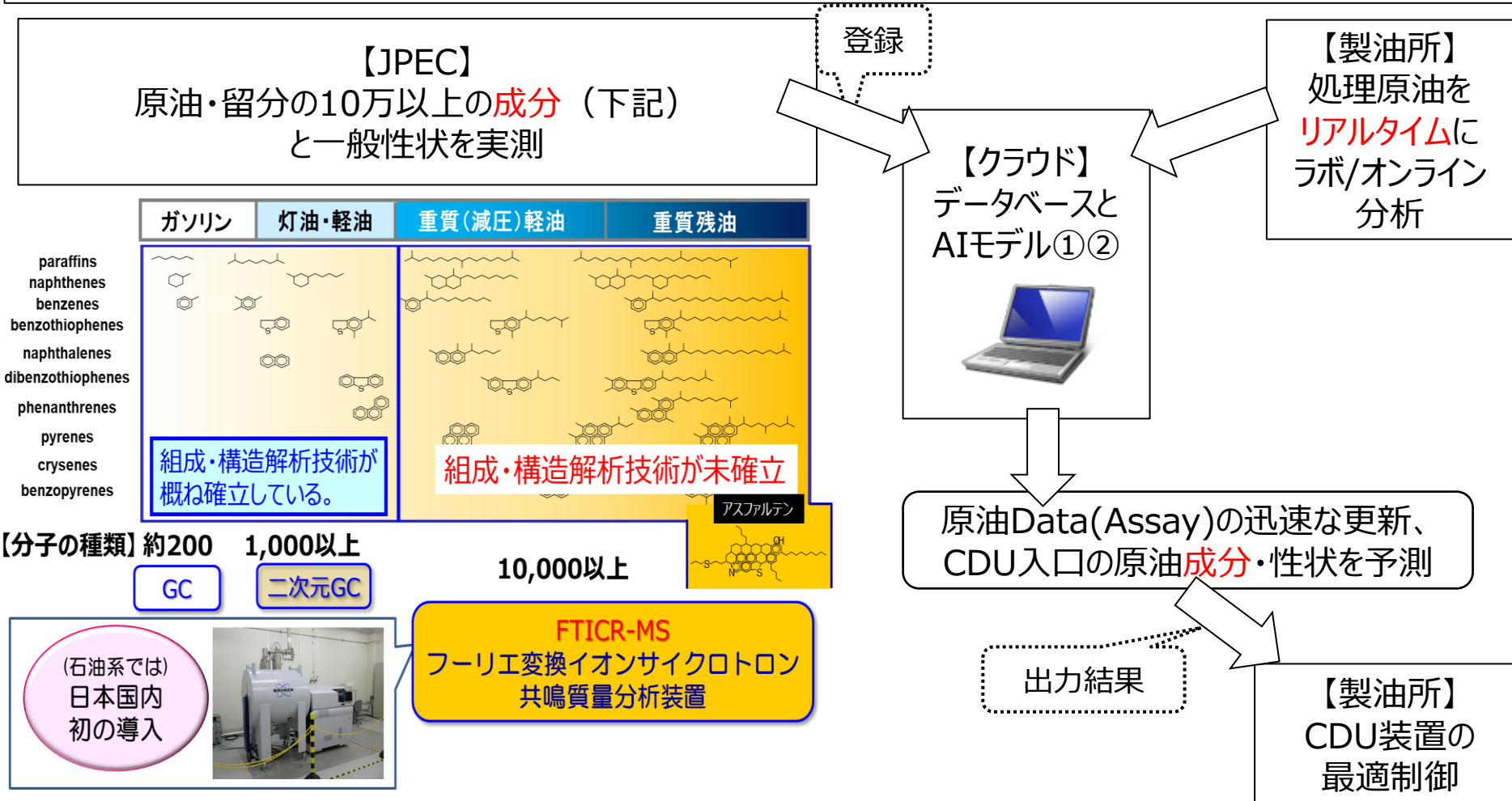
- ① **原油** ———— 足元への対応
- 原油Data(Assay)の更新及びCDU入口の原油**成分**・性状の**リアルタイム**予測を行う **AIモデル①②**の開発
 - 原油成分・性状が得られる**ラボ／オンライン分析技術**の選定
 - 原油成分・性状データを有する**DB(データベース)構築**
- ② **低炭素原料(廃プラ再生油・バイオマス由来油 など)** ———— 将来の製油所 Co-Processing対応
- 低炭素原料の成分・性状データを有する**DB構築**

本テーマの全体像



原油・(低炭素原料)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
- 原油Data(Assay)の迅速な更新、CDU入口の原油成分・性状のリアルタイム予測を実現する技術を開発することにより、CDU運転最適化の更なる高度化に貢献

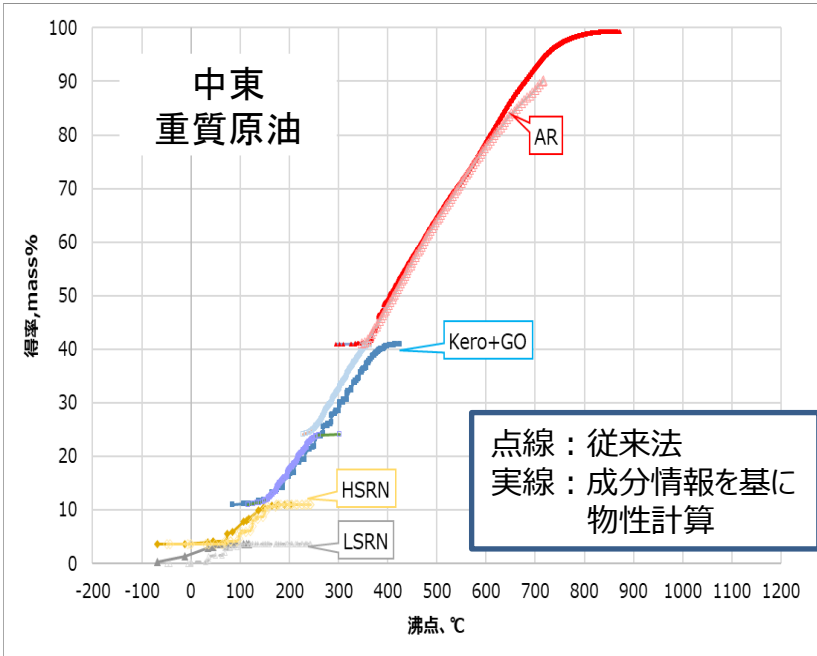


将来的には、低炭素原料のCo-Processingにも展開することを想定

原油成分から得られる情報の例

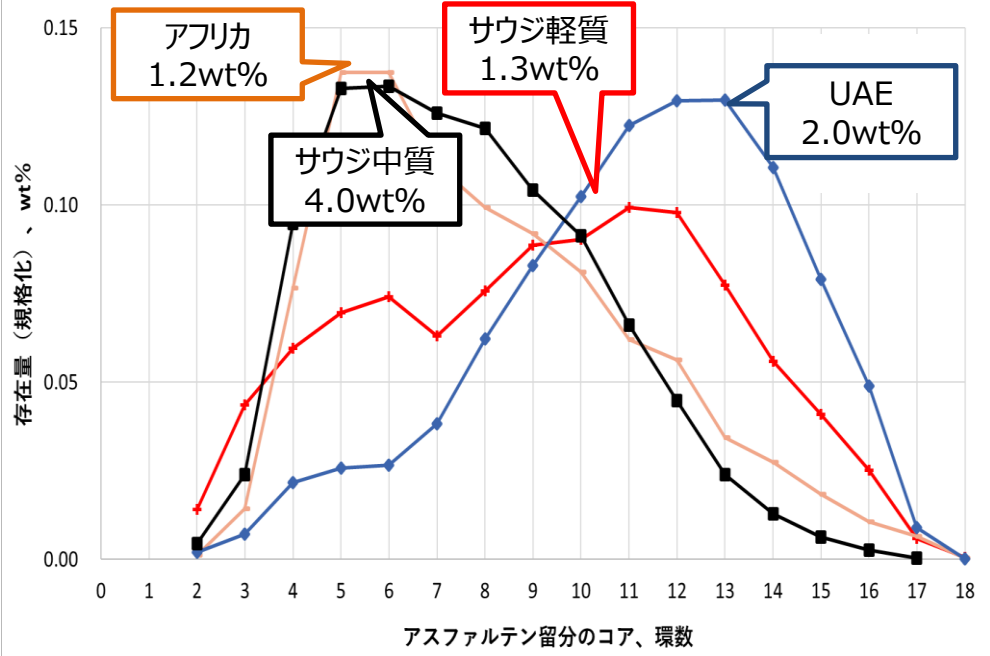
- 原油・留分の「10万以上の成分」と「物性推算」から、蒸留曲線、動粘度、組成などが計算可能
- 成分情報を基にした、アスファルテン分の環構造と存在量の関係把握

①成分情報をもとに原油蒸留性状を作成



従来: ~720°C(試験法実測上限)
 新規: ~850°C(成分情報を物性計算)
 ⇒CDU装置最適化に必要な重質留分得率精度の精緻化

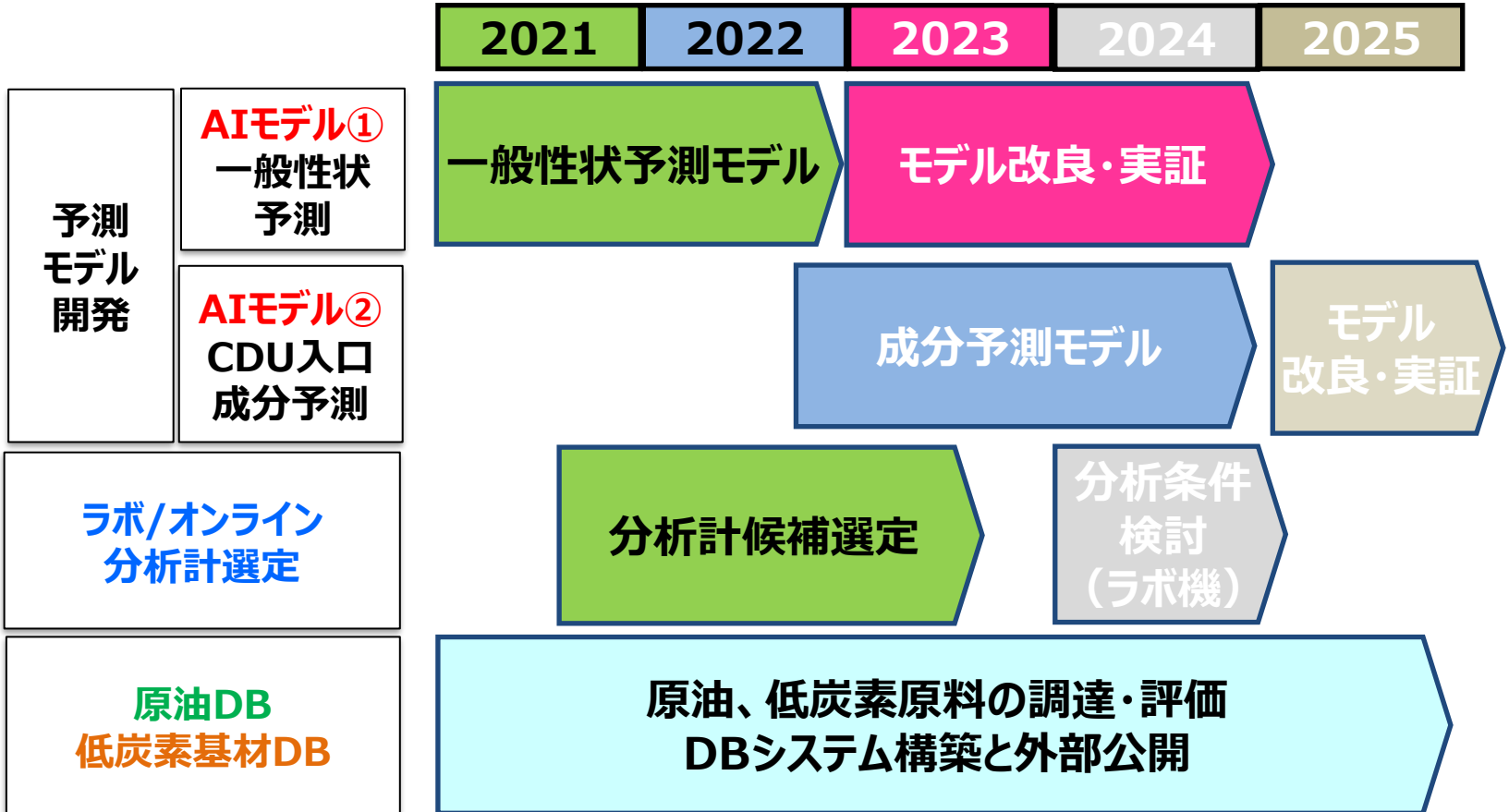
②原油-AR留分のアスファルテン分の環数解析



従来: 重量のみ
 新規: 環数分布 + 産地ごとの傾向
 ⇒成分情報のファウリング抑制技術開発での活用

技術開発スケジュールと2022年度実施内容

- 原油・留分のAIモデル②「成分予測」開発と原油及び低炭素原料の10万成分のDBシステム構築を5年間の主な開発目標とする。
- 2022年度実施内容
 - ・AIモデル②の前検討としてAIモデル①「一般性状予測」を明治大学・金子准教授と共同開発
 - ・ラボ／オンライン分析計候補の選定
 - ・原油及び低炭素原料の調達・評価、DBシステムの仕様検討



1. 技術開発の狙い

2. 2022年度技術開発

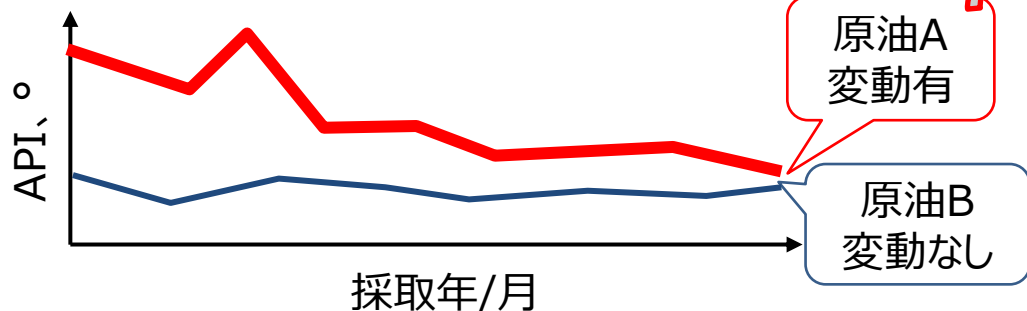
- ①原油・留分のデータベース構築 & 予測モデル開発
- ②低炭素原料のデータベース構築

3. まとめ

AIモデル①(一般性状予測)開発の目的

- 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。

原油APIトレンド(イメージ図)

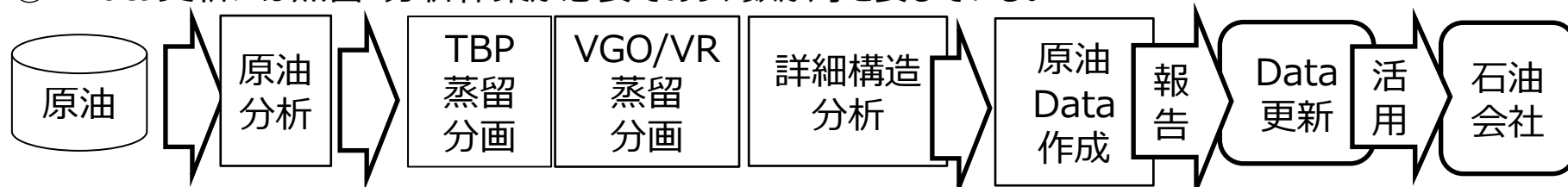


例：A原油Data(2016, 20年度@JPEC)

NAPO原油分析例			2016年度	2020年度
密度	15℃	g/cm ³	0.9511	0.9594
API			17.2	15.9
蒸気圧		kPa	15.75	11.50
動粘度	50℃	mm ² /s	360.3	389.1
流動点		℃	-17.5	
酸価		mg/Kg		
残炭		%		
			0.091	0.082
		容量%	1.04	0.739
水でい分		質量%	1.30	0.8
塩分		質量ppm	117	49
元素分析	炭素	質量%	84.1	85.3
元素分析	水素	質量%	11.1	11.2
ワックス分		質量%	2.4	2.9
全塩素		質量ppm	93	36

原油性状、留分得率・性状変化

- ② 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。

- ❑ AIモデル②「処理原油成分予測」(スライド4)の前段階として、2021、2022年度はAIモデル①「単品原油/留分の一般性状予測」に取り組む。
- ❑ AIモデル①のメリット
 - ・短時間で容易に得られる少数の原油分析結果から原油及び各留分の性状を推定可能
 - ・未知新規原油の事前評価に対しても有効

AIモデル①の開発(1/2)

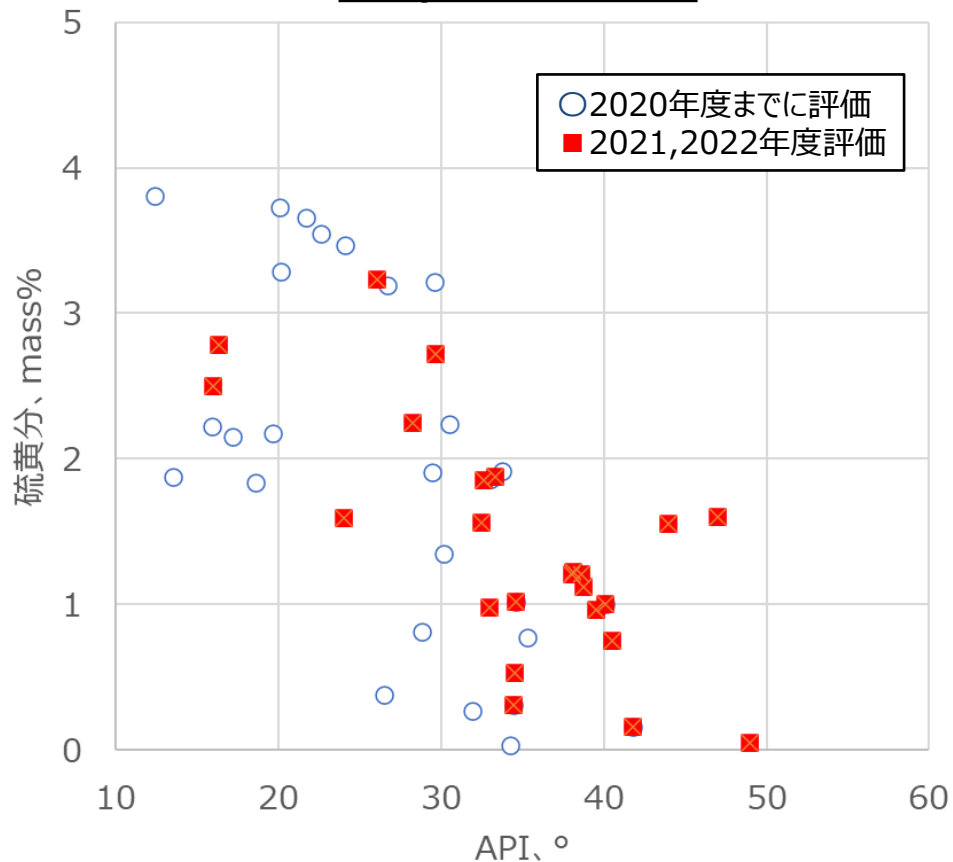
□ 教師データとして、JPECが評価した世界各国の40原油を使用

例:国内輸入トップ20原油名と産油国

No	産油国	原油名
		日本語
1	Saudi Arabia	アラビアン・エキストラ・ライト
2	Saudi Arabia	アラビアン・ライト
3	UAE	マーバン
4	UAE	ダス
5	Kuwait	クウェート
6	UAE	アッパ°ー・ザクム
7	Saudi Arabia	アラビアン・ヘビー
8	Qatar	カタール
9	Russia	ソコル
10	Qatar	アル・シャヒーン
11	Qatar	カタール・マリーン
12	Oman	オマーン
13	Kuwait	クウェート・スーパー・ライト・クルド°
14	Bahrain	バ°ノ°アラブ°・ミテ°イアム
15	Russia	イスホ°・ブレト°
16	アメリカ合衆国	WTIミッド°ラント°
17	Saudi Arabia	アラビアン・スーパー・ライト
18	Saudi Arabia	アラビアン・ミテ°イアム
19	Ecuador	ナホ°
20	Iraq	バスラ°ライト

METI統計・令和元年度原油輸入実績データを加工

API/硫黄分の関係



□ 14の統計手法・機械学習手法を検討

線形手法

- ・OLS : Ordinary Least Squares
- ・PLS : Partial Least Squares Regression など

非線形手法

- ・RF : Random Forests
- ・GBDT : Gradient Boosting Decision Tree など

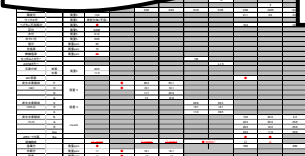
AIモデル①の開発(2/2)

2022年度は、教師データの説明変数を変更(Step1、2)し、AIモデル①を改良

説明変数

2021年度

原油名、産油国、
密度、硫黄分 など



各Laboで測定

機械学習 (AIモデル①)



目的変数

原油・留分一般性状

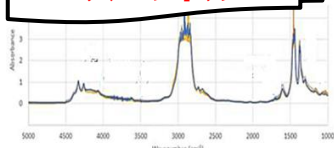
項目	単位	測定方法	測定装置	測定条件	測定精度	測定頻度	測定場所	測定担当者	測定日	測定結果
密度	kg/m ³	密度計
硫黄分	wt%	硫黄分測定機
粘度	mm ² /s	粘度計
凝結点	°C	凝結点測定機
閃点	°C	閃点測定機
着火点	°C	着火点測定機

予測対象：約200
AI予測が適用可能な項目、
精度の見極め

項目	単位	測定方法	測定装置	測定条件	測定精度	測定頻度	測定場所	測定担当者	測定日	測定結果
...

2022年度
Step1

IRスペクトル



Step2

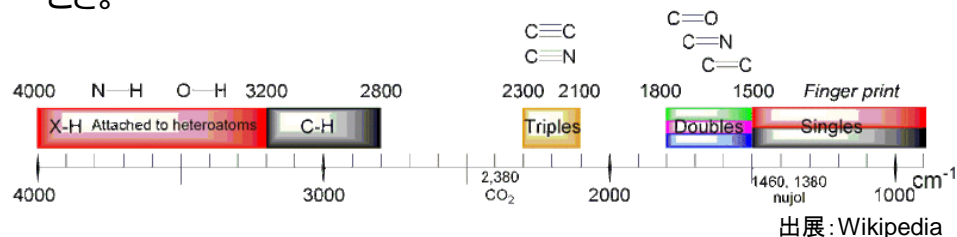
原油名、産油国、
密度、硫黄分 など



IRスペクトル

<IRに着目した理由>

- ASTMでも燃料油のIRスペクトルを多変量解析することでセタン価を予測し、品質管理に用いる手法が規定されるなど、IRスペクトルを用いて機械学習により油の性状を予測する手法の活用が広がりつつあること。
- 性状データは組成や官能基情報と相関があると考えられるが、IRは、短時間でそれらの情報を反映したスペクトルが得られること。



出展: Wikipedia

評価指標: R^2 (0.7以上)とRMSE 目標精度: 試験法再現許容差内

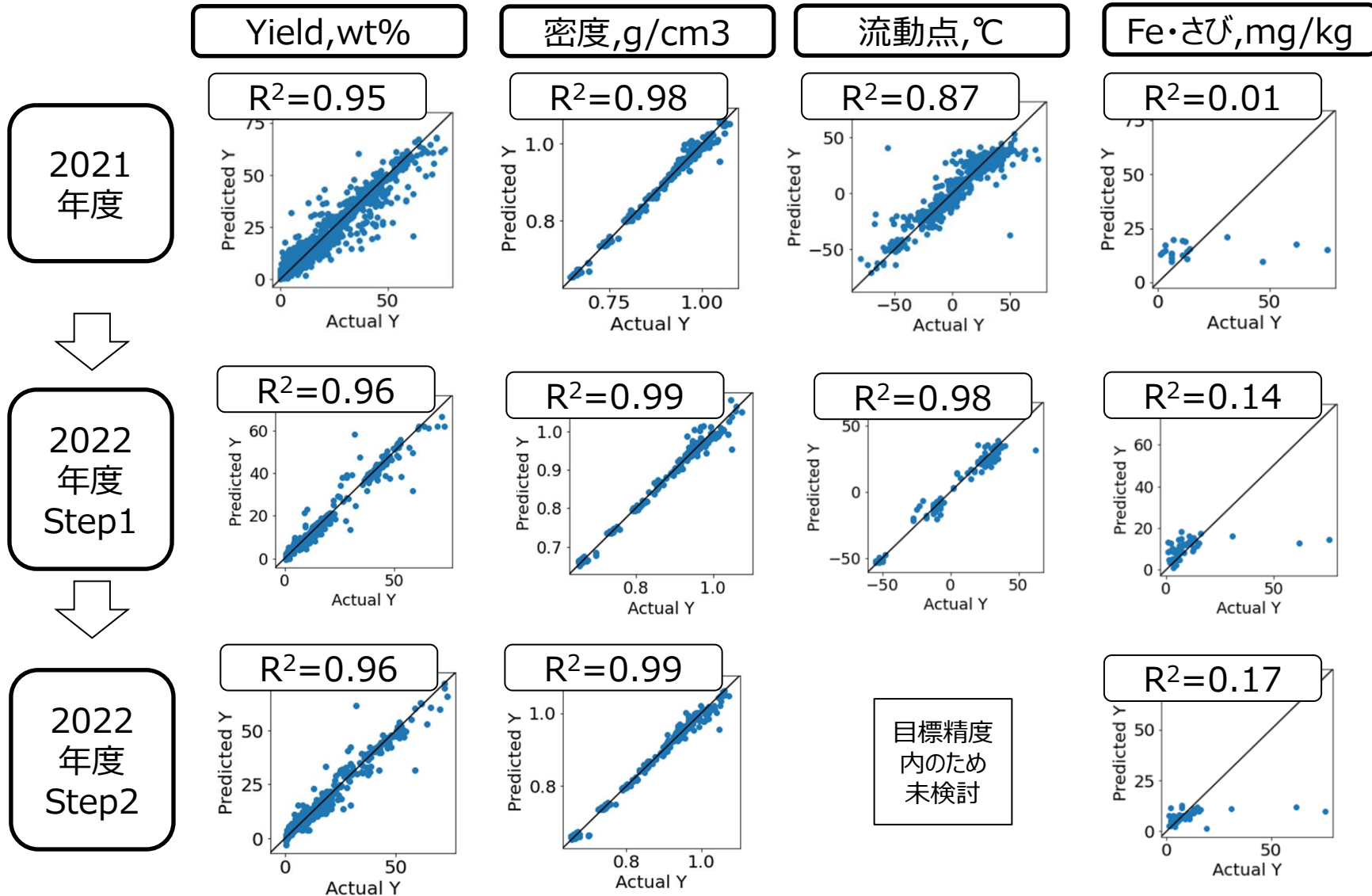
AIモデル①の予測結果

□ 教師データの見直しにより、AIモデル①の評価指標である相関係数 $R^2 > 0.7$ 以上の項目が増加

年度	モデル	説明変数	原油予測		留分予測	
			予測項目数	$R^2 > 0.7$ 以上	予測項目数	$R^2 > 0.7$ 以上
2021	--	原油名、産油国、密度、硫黄分…	14	6 ↓	38	21 ↓
<div style="border: 1px solid black; border-radius: 15px; padding: 5px; display: inline-block;"> 説明変数・密度などは2022年度Step1では目的変数 </div>						
2022	Step1	原油IRのみ	26	11 ↓	45	31 ↓
	Step2	まずは、目標精度未達項目を中心にモデル改良効果有無を確認				
	Step2	原油一般性状+IR	26	15	45	35

AIモデル①予測精度の向上(2021→2022年度)

- 製油所処理主要項目(得率、密度、硫黄分、全酸価) } ……説明変数変更により予測精度が改善
- 加成性の無い項目(流動点など)
- 2021年度・R2の低い項目(Fe・さび、Na,Ca・海水 など) ……原油に由来しないものは予測困難



1. 技術開発の狙い

2. 2022年度技術開発

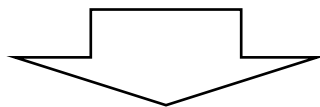
- ①原油・留分のデータベース構築 & 予測モデル開発
- ②低炭素原料のデータベース構築

3. まとめ

低炭素原料DB構築の背景・目的

【背景】

- 製油所脱炭素化の方策の一つとして、2次装置を利用した石油系燃料・低炭素原料(廃プラスチック再生油・バイオマス由来油等)の共処理(Co-processing)がある。バイオマス由来油を中心として欧米で導入が進んでおり、今後、日本でも導入が進むことが予想される。
⇒原油の成分・性状予測技術は、将来、Co-processingにも展開することを想定しており、Co-Processing用AIモデル開発のため低炭素原料の評価データの蓄積が必要
- 石油系燃料に比べ低炭素原料の情報は少なく、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。
⇒Co-Processingを促進するためには、低炭素原料の特徴を把握することが必要



【目的】

多様な原料を処理し、需要に柔軟に対応可能なCo-processing技術を確立するための共通基盤として、低炭素原料のDBを構築する。

低炭素原料のDB構築に向けた2022年度の取り組み内容

実施事項	現在までの進捗状況
新規調達	・2021年度に作成した調達マトリックスに基づき、新たに9種類の低炭素原料を調達。
評価	・2022年度に調達した低炭素原料(9種)の一般性状を分析。 ・2021年度に調達・評価した低炭素原料(11種)の一般性状をDBに登録。

【2022年度に調達した例】



木質熱分解油



トルール油



PE+PP熱分解油

2022年度に評価した低炭素原料（一部）

試験項目名	単位	HVO (水素化 植物油)	木質 熱分解油	トール油	PE+PP 熱分解油	セルロース 熱分解油
密度(15℃)	g/cm ³	0.7805	1.2240	0.9060	0.792	1.252
動粘度(30℃)	mm ² /s	3.741	200	23	4.2	320
酸価	mgKOH/g	0.02	80.1	200	0.06	64.3
水分	質量ppm	8	29.6質量%	0.1	0.1未満	30.4質量%
API°の不溶解分	質量%	-	44.1	0.1未満	0.1未満	57.2
残留炭素分	質量%	0.00 参考値	25.1	0.11	0.1未満	25.6
酸素	質量%	0.1未満	44.8	11.4	0.3	42.9
Cl	質量ppm	50 未満	100未満	100	100未満	100未満
無機塩素分	質量ppm	1 未満	50未満	50未満	0.36	100未満
微量窒素	質量ppm	1 未満	350	43	620	560

- 2021年度は、廃プラスチック再生油で装置腐食の原因となる塩素を高濃度で含むものがあることを確認したが、2022年度評価では、バイオマス由来油の中にも装置腐食が懸念されるもの（高酸価のバイオマス由来油）があることを確認した。

トール油による腐食

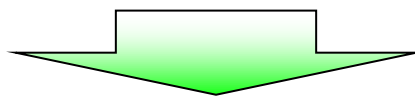
廃食油
(腐食無し)



トール油
(腐食発生)



- トール油のファウリング評価時、試験装置の一部に極端な減肉が発生し、試験後の油が赤褐色を呈していた。
(装置材質がカーボンスチールであることから、腐食によって鉄が溶出したと考察)



- 全酸価が高いことから腐食性のあることを推測していたが、高温では腐食が著しく進行することが確認された。
⇒低炭素基材利用の拡大のためには、腐食性物質除去技術の確立が必要と考察

1. 技術開発の狙い

2. 2022年度技術開発

- ①原油・留分のデータベース構築 & 予測モデル開発
- ②低炭素原料のデータベース構築

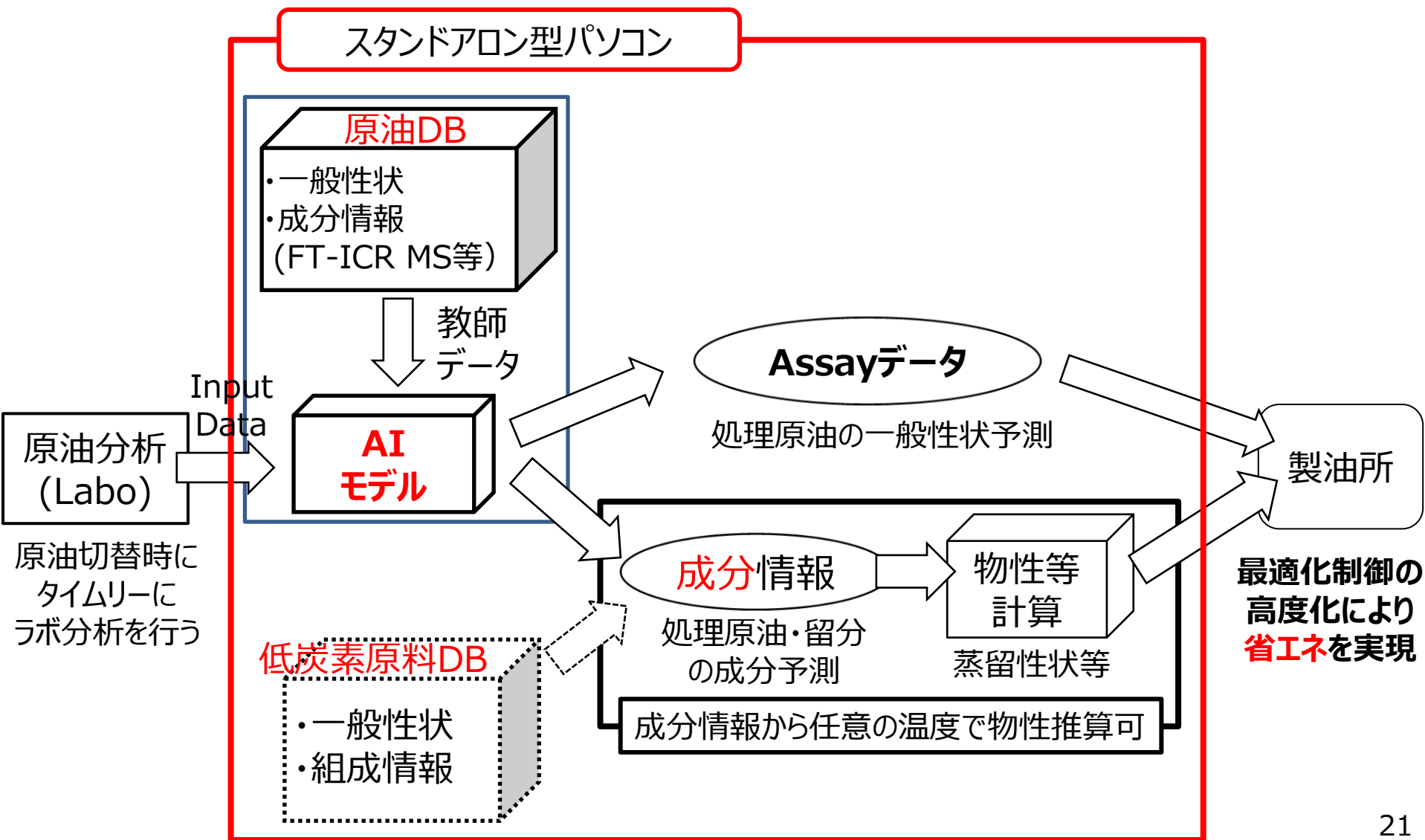
3. まとめ

技術開発まとめ、2023年度の主要課題

	項目	2022年度の技術開発		今後の課題
原油	AIモデル①②	AIモデル①を構築 (詳細はスライド14参照)		AIモデル①の更なる予測精度を向上 AIモデル②(成分予測)のプロトタイプ作成
	ラボ/オンライン分析計の技術調査	分析計候補としてIRを選定		将来の現場展開に向け、FT-IR測定条件がAIモデル②の成分予測に与える影響を把握
	原油成分・性状データを有するDB構築	2022年度までに評価した原油についてDB化 (事業目標35件に対し18まで積み上げ)	外部へのDB公開に向けたシステム仕様を確定	左記継続
低炭素原料	2022年度までに評価した低炭素原料について、DB化 (事業目標20件達成) Co-processing時の影響項目を把握			

DBシステム構想(案)

- 原油・低炭素原料の一般性状・成分情報、AIモデル、物性計算技術をスタンドアロン型パソコンに搭載
- 石油会社に利用して貰うためのDBシステム開発中



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。