2025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

2025年5月13日

JPEC　ペトロリオミクス技術研究室

―禁無断転載・複製　©JPEC　2025―

報告内容

関係者外秘 JPEC

１．技術開発の狙い

２．2024年度、技術開発結果

①原油系

成分予測モデルの開発

成分予測モデルの活用

②低炭素原料

一般性状データベースの構築

Co-Processingに向けた成分情報の把握

３．まとめと今後の予定

技術開発体制

関係者外秘 JPEC

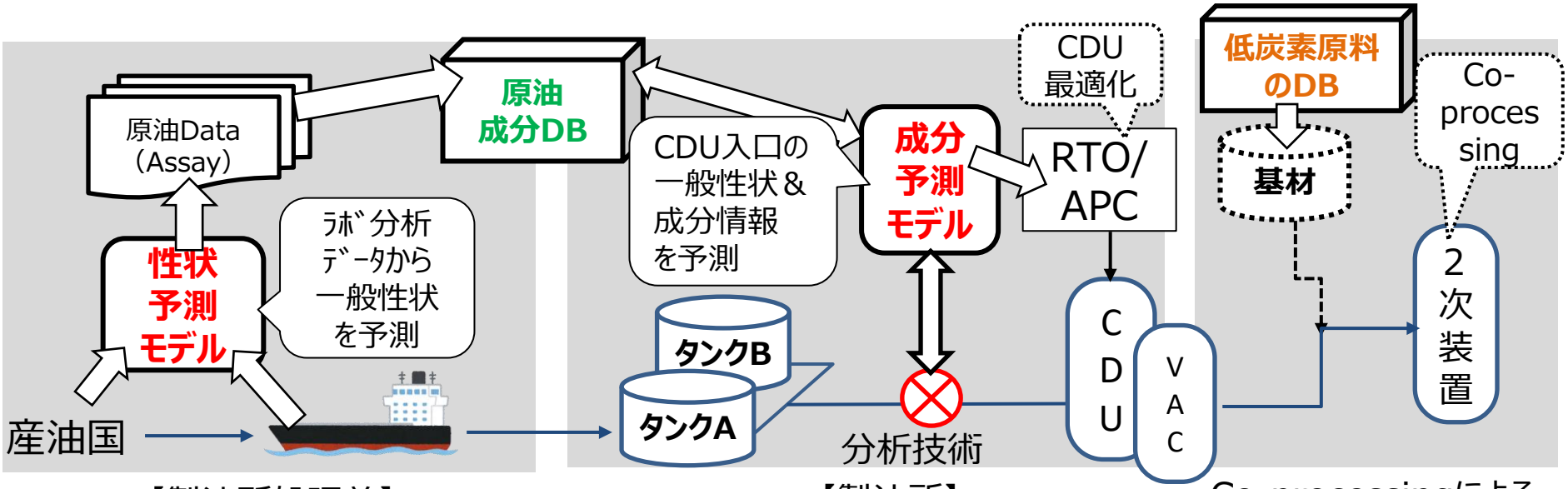
処理原油成分リアルタイム予測技術開発
(JPEC、石油会社との研究会)

CDU最適化制御技術開発
(石油会社との共研)

(1)単品原油の**性状予測モデル開発**
(2)CDU入口の処理混合原油一般性状・**成分予測モデル開発**
(3)原油のオンライン分析技術の選定
(4)原油・低炭素原料のDB、及びDB公開システム開発

単品⇒混合原油性状のリアルタイム予測結果を活用したCDU最適化制御による脱炭素化(省エネ)

その他技術開発



【製油所処理前】
原油購入メリット・処理計画の精緻化

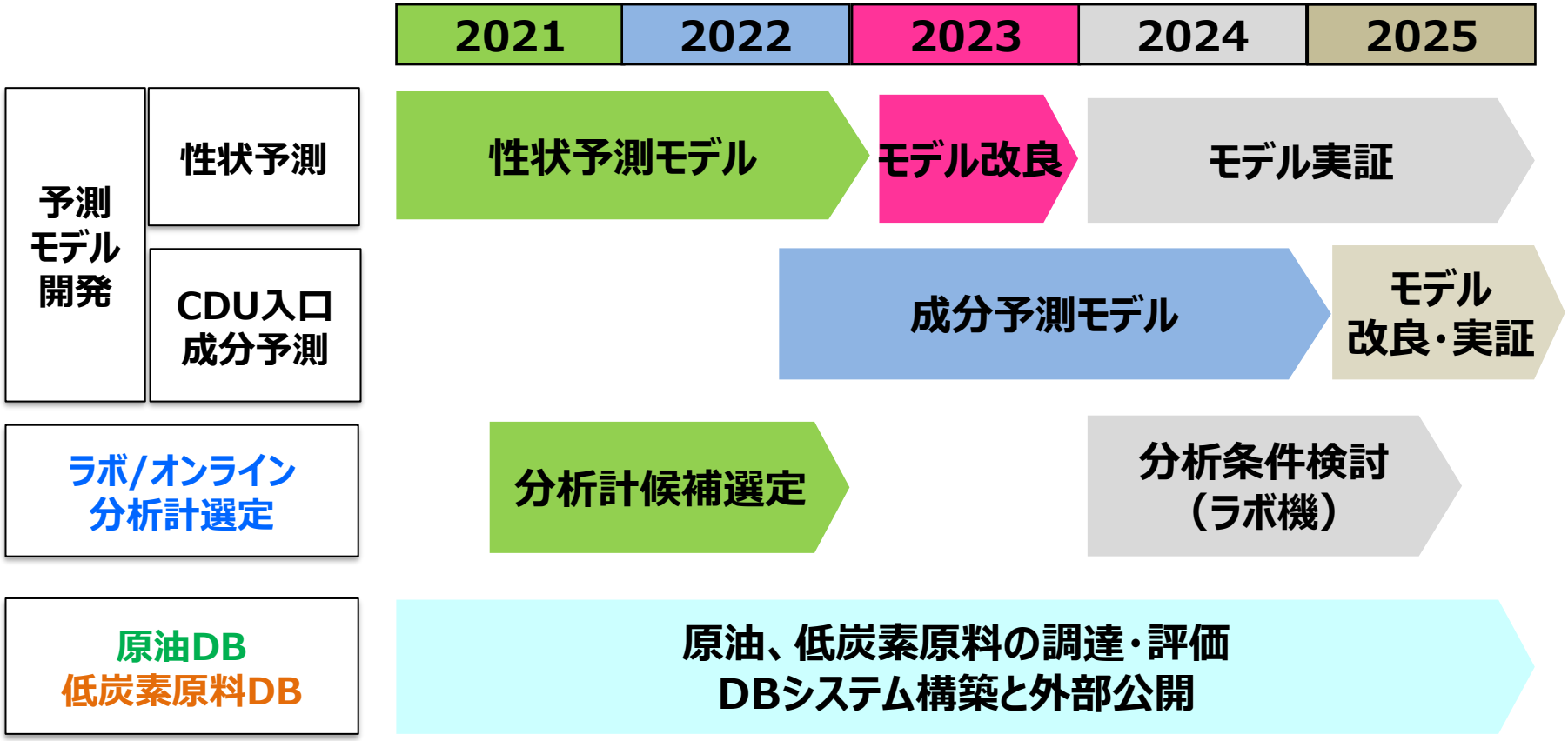
【製油所】
運転最適化による脱炭素化(省エネ)

Co-processingによる
将来の低炭素化

技術開発スケジュールと2024年度実施内容

関係者外秘 JPEC

- 原油・留分の「成分予測モデル」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。
- 本日は、成分予測モデル、低炭素原料DBについて報告する。
- 具体的な最終ゴールをイメージして、残り2年の技術開発を進める。



報告内容

関係者外秘 JPEC

1．技術開発の狙い

2．2024年度、技術開発結果

①原油系

成分予測モデルの開発

成分予測モデルの活用

②低炭素原料

一般性状データベースの構築

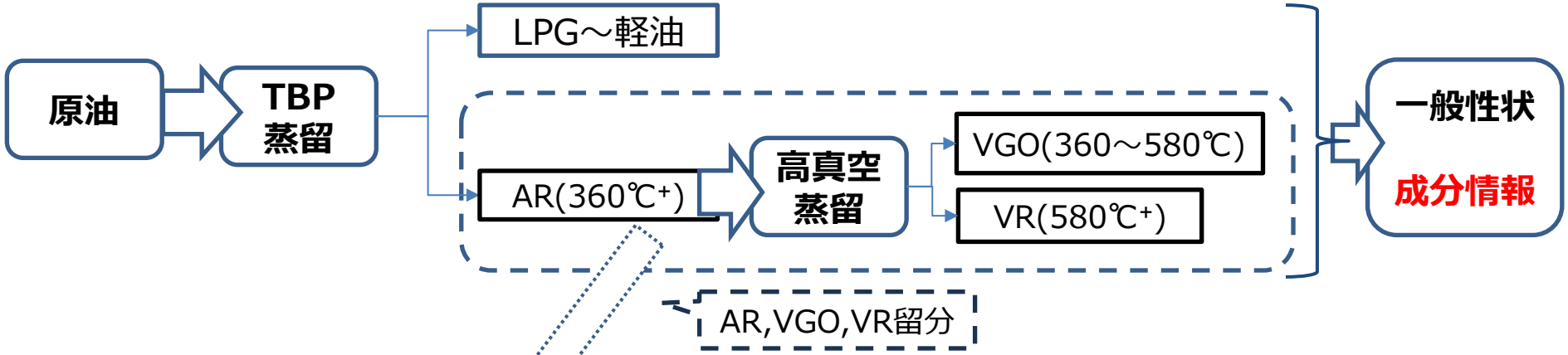
Co-Processingに向けた成分情報の把握

3．まとめと今後の予定

予測モデル開発に必要な教師データ作成

関係者外秘 JPEC

□ 原油を各留分に蒸留分画した後、成分情報データを得る

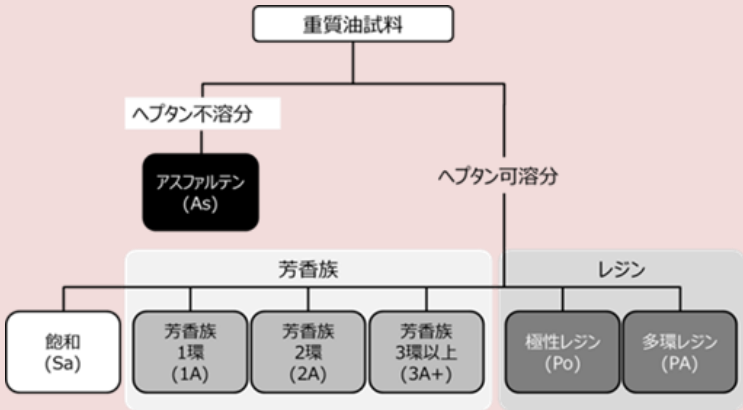


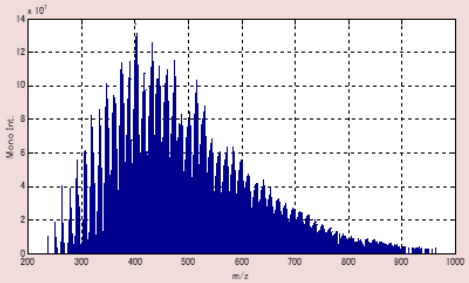
ペトロリオミクスのコア技術

カラム7分画
①n-ヘプタン還流→②カラム分画

FTICR MS測定

解析　JACD化





どのような分子が

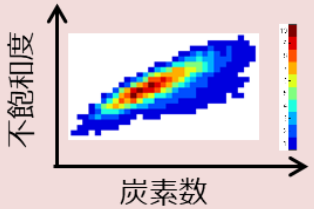
$C_{14}H_{10}$

$C_{16}H_{10}S$

$C_{20}H_{17}N$

⋮

どのように
分布しているか？



JACD：Juxtaposed Attributes for. Chemical-structure Description

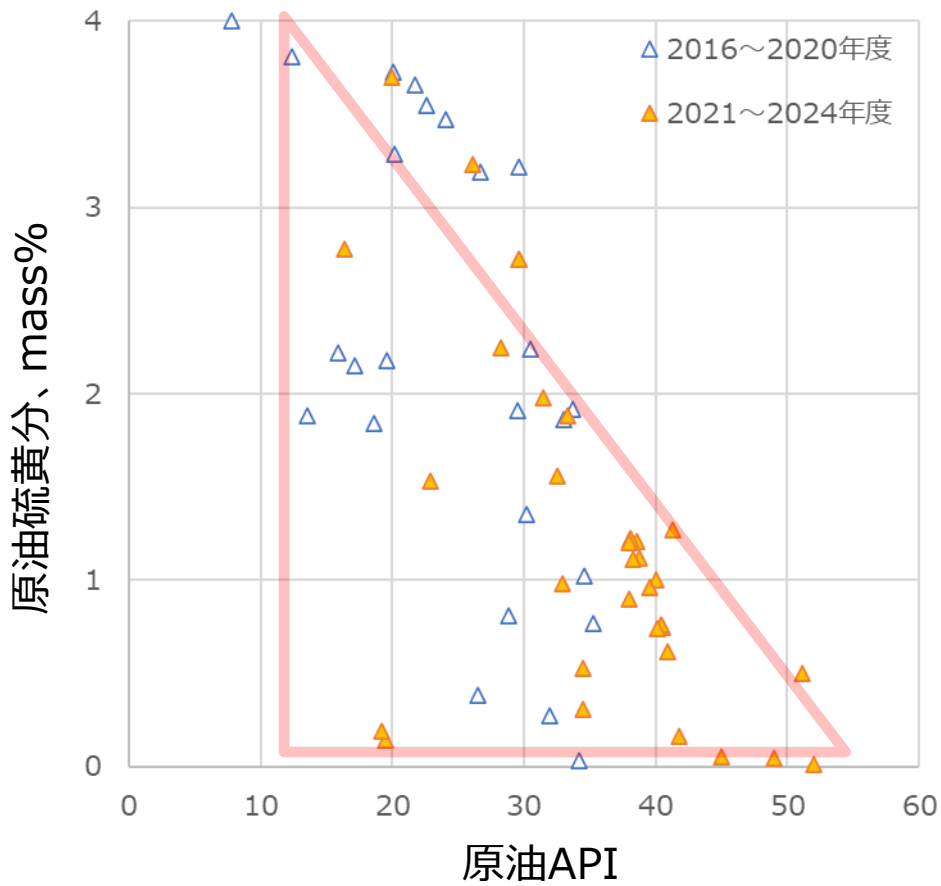
教師データ作成(原油データベース構築)

関係者外秘

JPEC

- 2024年度は6原油評価、今期事業（2021～2024年度）で35件、過去累計60件のDB構築が完了。（左図）
- 国内輸入トップ20原油の評価も完了。（右図）

原油API/硫黄分の関係



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	ｱﾗﾋﾞｱﾝ･ｴｷｽﾄﾗ･ﾗｲﾄ
2	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ･ﾗｲﾄ
3	UAE	ﾏｰﾊﾞﾝ
4	UAE	ﾀﾞｽ
5	Kuwait	ｸｳｪｰﾄ
6	UAE	ｱｯﾊﾟｰ･ｻﾞｸﾑ
7	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ･ﾍﾋﾞｰ
8	Qatar	ｶﾀｰﾙ
9	Russia	ｿｺｰﾙ
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･ｽｰﾊﾟｰ･ﾗｲﾄ･ｸﾙｰﾄﾞ
14	Bahrain	ﾊﾞﾉｺ･ｱﾗﾌﾞ･ﾐﾃﾞｨｱﾑ
15	Russia	ｴｽﾎﾟ･ﾌﾞﾚﾝﾄﾞ
16	ｱﾒﾘｶ合衆国	WTIﾐｯﾄﾞﾗﾝﾄﾞ
17	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ･ｽｰﾊﾟｰ･ﾗｲﾄ
18	Saudi Arabia	ｱﾗﾋﾞｱﾝ･ﾐﾃﾞｨｱﾑ
19	Ecuador	ﾅﾎﾟ
20	Iraq	ﾊﾞｽﾗ･ﾗｲﾄ

METI統計・令和元年度原油輸入実績データを加工

各予測モデルの作成フロー

関係者外秘 JPEC

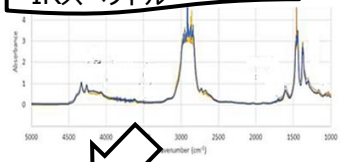
- 性状予測モデル
  説明変数を変えて、目的変数150項目（原油・留分の一般性状と組成）を予測
  ↳原油性状(密度/硫黄分/残留炭素など)、原油FT-IRスペクトル
- **成分予測モデル**
  混合原油を対象に、目的変数（LSR～AR留分の成分情報）を予測
- 高沸点成分推定モデル 静岡大学委託研究
  FT-ICR MSで測定が難しい高沸点成分を推定

世界の原油成分情報を網羅

教師データ

原油データ
原油・留分一般性状、留分得率…

原油・機器部分析
IRスペクトル



実測FT-ICR MSデータ
（DBE50以下）

モデル構築

機械学習

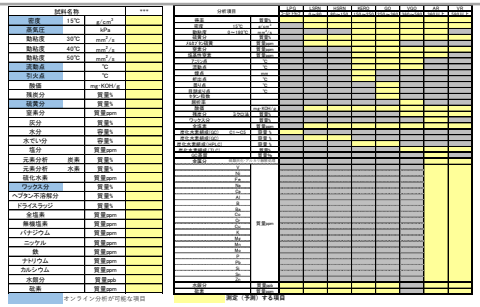
FT-IR
(透過,ATR)

深層学習手法で
巨大成分を推定

≧DBE51

目的変数

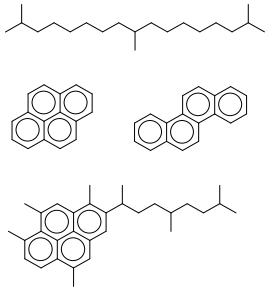
原油・留分の一般性状・組成



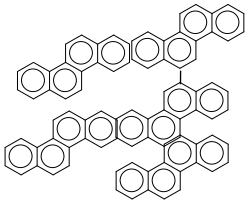
性状予測モデル

成分情報

10万成分



成分予測モデル



高沸点成分推定モデル

成分予測モデル・学習モデル作成

関係者外秘 JPEC

- 前述の10万成分の学習モデル作成には検討時間が必要であることから、各留分を450成分にランプした原油全体のプロトモデルを作成した。

成分予測モデル作成　～各成分の予測／実測R^2の上位**50%平均値**～

留分	LSR	HSR	Kero＋GO	AR
沸点範囲	0-80℃	80-150℃	150-360℃	360℃以上
分析方法	PONA-GC	PONA-GC	GC x GC	FT-ICR MS
成分数	50		150	250
n-パラフィン	0.72	0.86	0.78	0.52
iso-パラフィン	0.76	0.79	0.80	
アロマ	0.47	0.79	0.55	0.54
ナフテン	0.41	0.51	0.59	0.62

- 各成分の学習モデルのR^2低下した要因を確認し、次年度の対応策検討。

	R^2低下の原因	対応策
特定の原油が学習モデルのR^2を低下させている	～2020年度に調達した超重質原油	説明変数FT-IRの再測定、逆解析など
特にAR留分のR^2が悪い	FT-ICR MSの濃度値が実測と合わない	MSの感度補正

成分予測モデル・答合せ

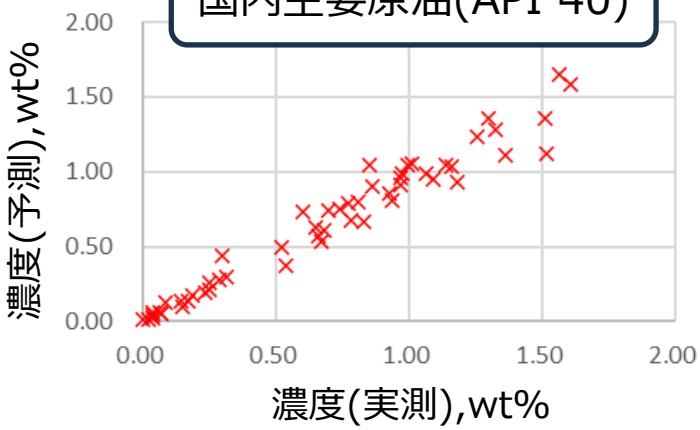
関係者外秘 JPEC

- 現時点の学習モデルを用いて、未知原油X LSR～Kero＋GO留分の答合せを実施。
- 国内主要原油(API 40)の答合せは良好。教師データ外の超重質原油(API 16)は予測が外れるケースが見られたが、未知原油200成分の濃度の桁数が大きく外れることはなかった。
- 現時点における、予測／実測の蒸留性状のΔは最大2℃であった。

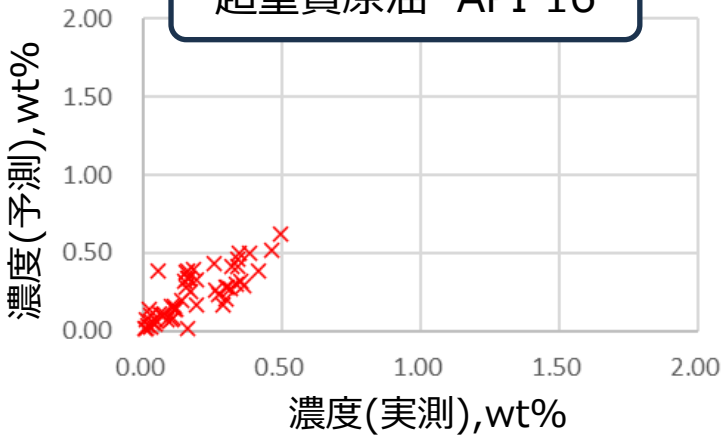
未知原油X LSR～GO留分の各成分濃度を予測

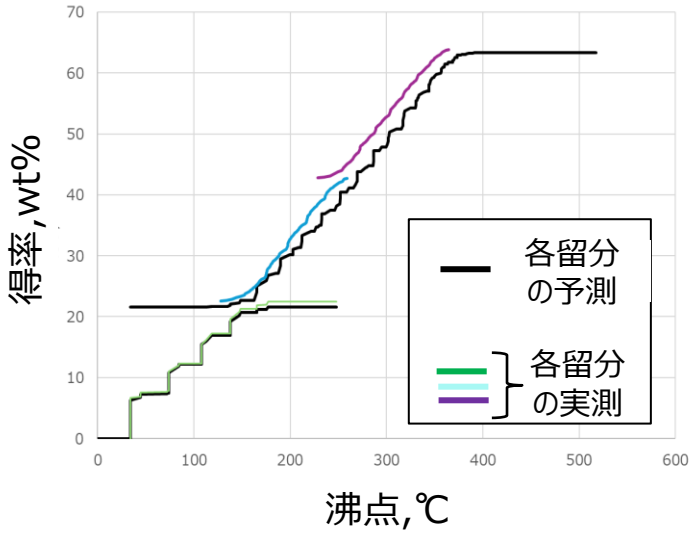
予測した成分に沸点情報を与え蒸留曲線を作成

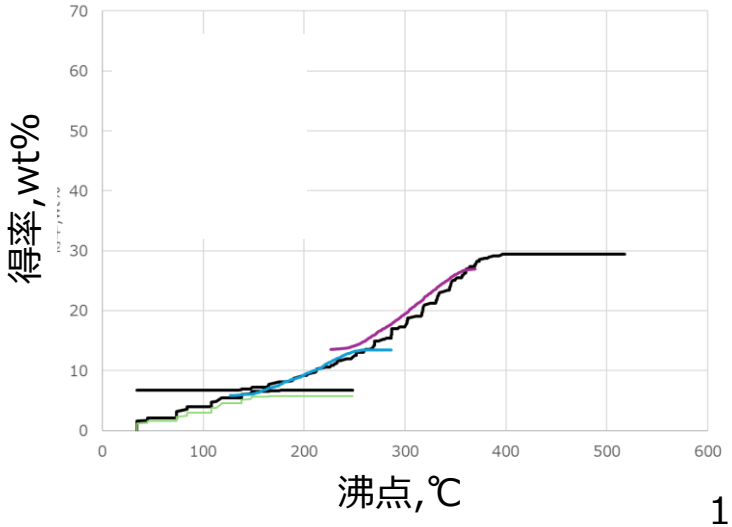
国内主要原油(API 40)



超重質原油 API 16







報告内容

関係者外秘 JPEC

1．技術開発の狙い

2．2024年度、技術開発結果

①原油系

成分予測モデルの開発

成分予測モデルの活用

②低炭素原料

一般性状データベースの構築

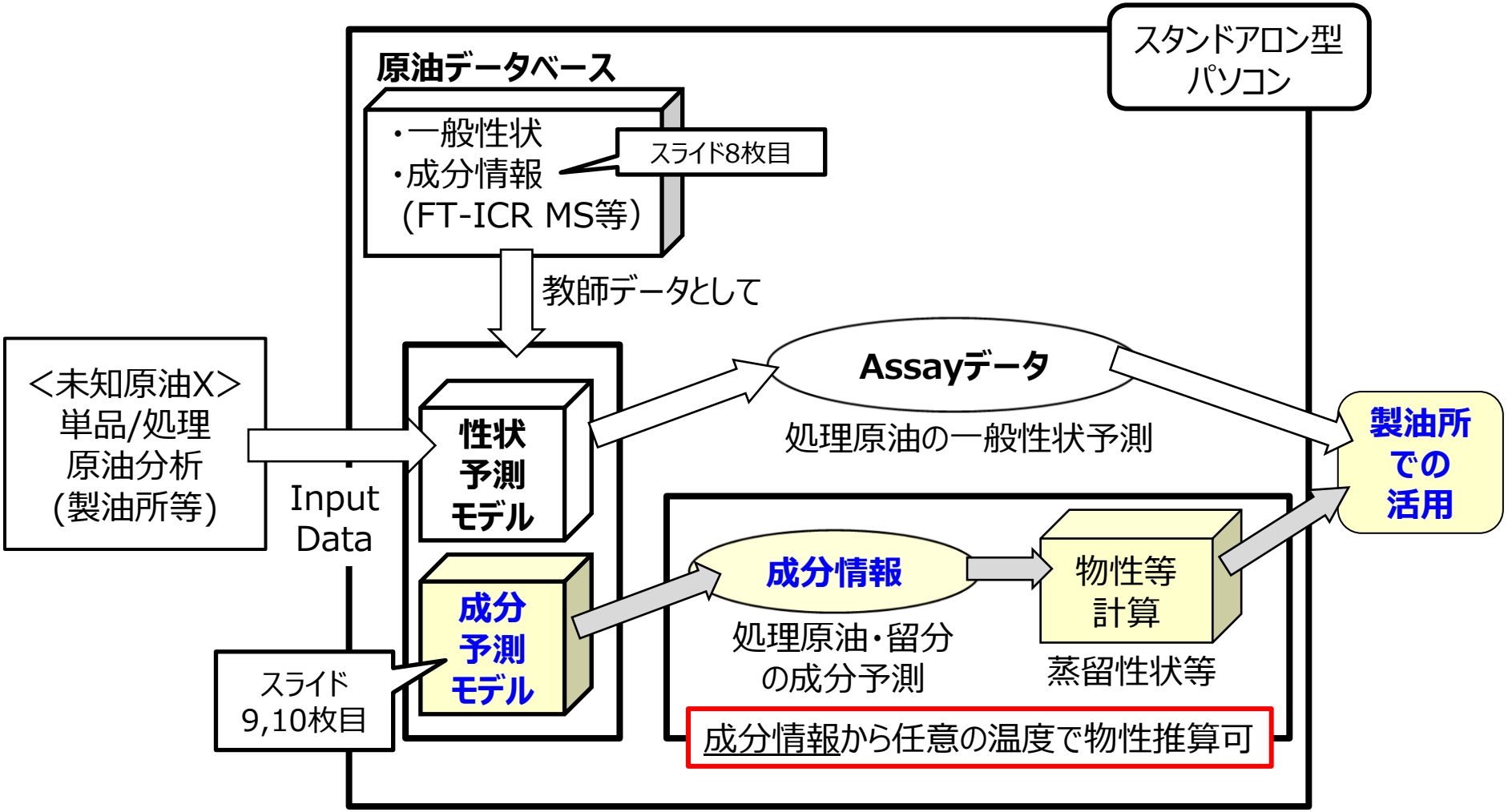
Co-Processingに向けた成分情報の把握

3．まとめと今後の予定

成分予測モデルの活用（DBシステム全体像）

関係者外秘 JPEC

- 原油・(低炭素原料)の一般性状・成分情報、予測モデル、物性計算技術をスタンドアロンパソコンに搭載
- DBシステム開発@JPECとデモテスト@石油会社を実施中



成分予測モデルの石油会社活用案

関係者外秘 JPEC

成分予測モデルとペトロリオミクス技術の活用について、石油会社等との議論を通じて、下記2案を設定した。

	案１	案２
ターゲット	ＣDU制御	原油貯蔵管理 （Fouling抑制）
目的	CDUのリアルタイム運転最適化制御を行い、経済性と脱炭素(省エネ)を両立させる	・原油混合時に原油タンク内で発生するスラッジ≒産廃処理量を削減する。 ・（原油熱交のFouling原因物質と想定されることから、将来の抑制につながる）
成分予測モデルの開発スコープ	CDUからの留分抜出し、または各留分製品規格	・混合原油全体の成分情報のバランス ・スラッジに相当する高沸点成分 静岡大学委託研究
	性状予測モデルで予測が難しいミクロ成分が影響し、混合時の加成性が成り立たない項目 （例：低温性能）	原油混合時の軽質留分とアスファルテン（高沸点成分）の安定性変化

原油混合安定性の課題

JPECフォーラム2020

関係者外秘

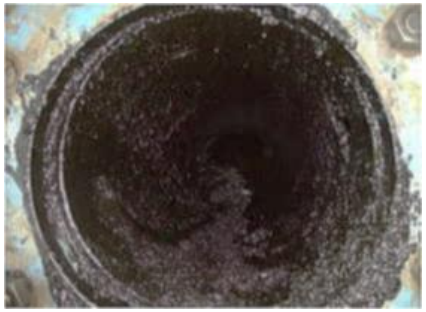
JPEC

非在来型原油や超重質原油をはじめとする未利用原油を取扱う場合、上流から処理プロセスの各段階において多岐にわたる課題が発生

未利用原油使用時の課題例			課題を起こす主要因
製油所への輸送時	パイプライン輸送で	抵抗低減剤の効果が出ない	原油中のアスファルテンの凝集性
	原油タンカー輸送で	スラッジの発生	配管内での他原油との混合
貯蔵タンク内	貯蔵中に	スラッジの発生	他原油との混合や 原油中のアスファルテンの凝集性
蒸留前段	輸送配管内で	スラッジの発生	他原油との混合
	原油予備加熱熱交で	ファウリング発生	原油中のアスファルテンの凝集性
蒸留装置	常圧蒸留塔で	蒸留の切れ悪化	軽質原油との不適切な混合

➢ 輸送・備蓄

パイプライン閉塞



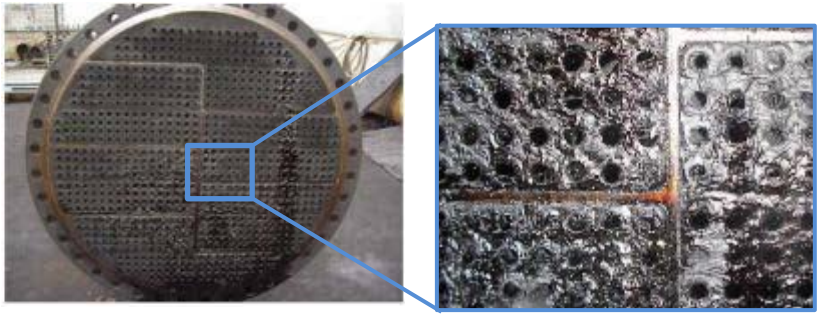
http://www.pektech.co.jp/pipecleaner.html
Pipeline Engineering

タンクでのスラッジ堆積

http://www.shimura1948.co.jp/cleaning/service.html
株式会社シムラ

➢石油精製工程

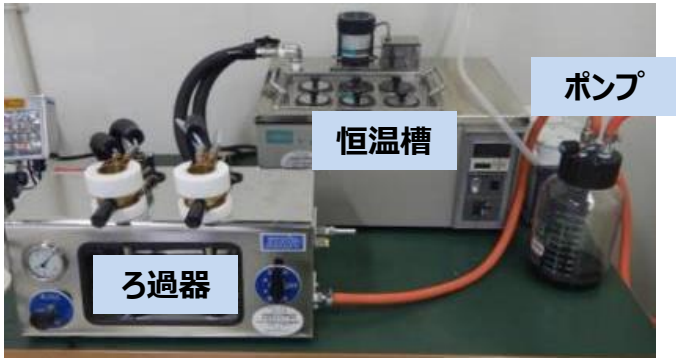
熱交換器のスラッジによる閉塞



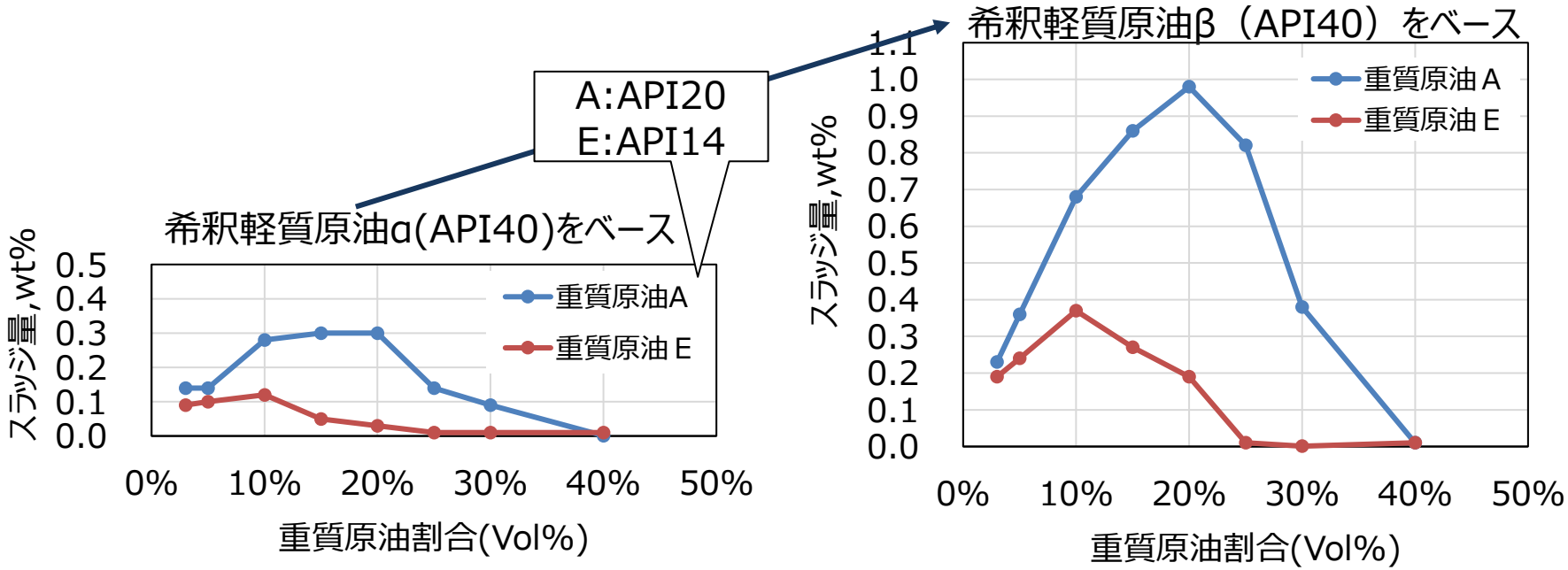
混合原油比率とドライスラッジ量の変化

関係者外秘 JPEC

【試験名称】実在ドライスラッジ試験方法
【試験番号】ISO10307-1
【試験概要】
100℃に加温されたろ過器を用いて吸引ろ過を行い、
1μm以下の金属フィルター上の残渣の質量を測定



- 単品原油のスラッジ量は＜0.01%だが、混合原油では、超重質原油（A・E）と軽質原油（α・β）の組み合わせによらず、重質原油比率10～20%のときに極大値を持つ。
- 重質原油の成分影響≒アスファルテンは、ペトロリオミクス技術（FT-ICR MS）を駆使することで解決できるのではないか？



成分情報を用いたスラッジ予測式(開発中)

関係者外秘 JPEC

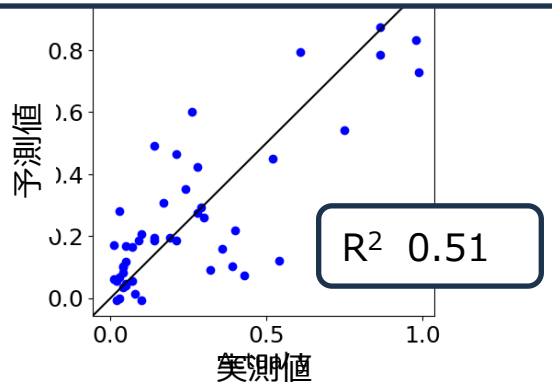
□ 教師データ作成
・ドライスラッジ量を実測
・比率の異なる2原油、複数原油の100点
(右表は超重質原油10%ケース)

(要因解析)

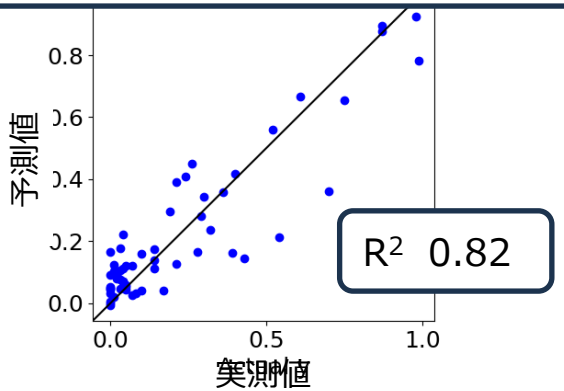
スラッジ予測式・学習側の作成

				超重質原油10%					
				サウジ	サウジ	エクアドル	エクアドル	ブラジル	メキシコ
				API 28	26	16	23	13.5	20
				S 2.9	3.2	2.8	1.5	1.88	3.7
				Asphaltene 2.7	4.10	10.60	8.50	11.36	9.86
希釈原油90%	米国	API45	S0.02	0.09	0.21	0.61	0.52		0.99
	サウジ	49	0.05	0.07	0.17	0.21	0.43		0.82
	米国	42	0.16		0.04	0.26	0.32	0.70	0.75
	UAE	40	0.75	0.02	0.04	0.03	0.05		0.54
	UAE	39	1.21	0.01	0.01	0	0.10		0.39
	サウジ	40	0.96	0	0	0	0.03	0.10	0.28
	サウジ	33	1.86		0		0	0	0

説明変数：LSR～AR留分の全組成35
目的変数：ドライスラッジ量



説明変数：LSR～AR留分の全成分情報450
目的変数：ドライスラッジ量



2025年度は、成分予測モデル開発の予測精度を向上させ、スラッジ予測式・学習モデルの精度向上
・未知混合Xの答え合わせを行う

報告内容

関係者外秘 JPEC

1．技術開発の狙い

2．2024年度、技術開発結果

①原油系

成分予測モデルの開発

成分予測モデルの活用

②低炭素原料

一般性状データベースの構築

Co-Processingに向けた成分情報の把握

3．まとめと今後の予定

低炭素原料のデータベース構築の背景・目的

関係者外秘 JPEC

製油所脱炭素化の方策の一つとして、石油系原料・低炭素原料※1のCo-processing※2の検討が進められているが、低炭素原料の情報は少なく、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。

※1) 廃プラスチック熱分解油・バイオマス由来油等
※2)二次装置(FCC等)において低炭素原料と石油由来の油とを混合処理し、燃料・石化成分を得る技術

多様な原料を処理し、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原料の性状・組成のDBを構築し、製油所の脱炭素化に貢献する。

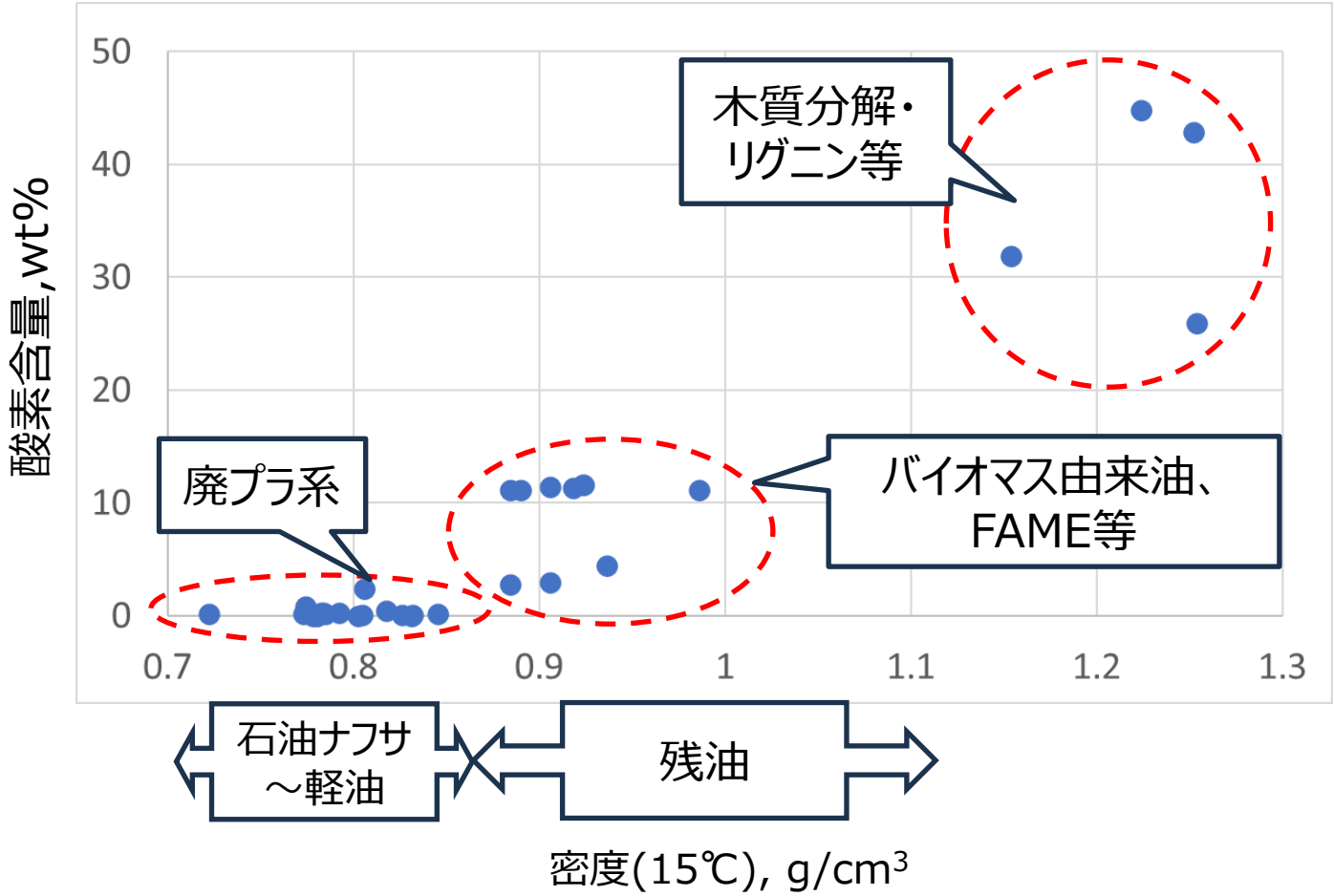
【開発スケジュール】

年度	2021	2022	2023	2024	2025
低炭素原料の調達・評価	低炭素原料の調査	低炭素原料の選定・調達・評価（累計30種類以上を目標）			
データ公開システム（石油系原料）		システム・セキュリティ検討	システム検証・改善点抽出	システム改良・運用	

低炭素原料のDB化 密度/酸素

関係者外秘 JPEC

- 国内外で入手可能な、低炭素原料の一般性状をDB化
- トール油等の油脂系原料、木質熱分解油等のリグノセルロース系原料ともに酸素含量は、石油系原料(≦1%)に比べて高濃度
- 石油系原料の不純物元素である硫黄、窒素の含有量は全般的に少ない傾向



木質熱分解油の脱炭素化品の一般性状

関係者外秘 JPEC

- バイオマス油化技術開発が進む欧州メーカより入手した水素化処理品について一般性状、蒸留試験及びVGOとの相溶性などを評価中
- SPOからSDPOと水素化が進むにつれ、酸価・酸素・水分・残留炭素分は低下

SPO　：低温安定化工程(250℃以下)で処理し、熱に不安定な酸素化合物をより安定な化合物に変換
SDPO：高温水素化工程(350℃以上)で脱酸素反応を実施

試験項目名	単位	木質熱分解油(FBPO)	SPO FBPOを安定化	SDPO SPOを水素化	液体リグニン(原料)
密度(15℃)	g/cm^3	1.22	1.15	0.94	1.25
動粘度(30℃)	mm^2/s	200	130	18	16000
動粘度(50℃)	mm^2/s	51	58	14	6400
酸価	mgKOH/g	80.1	51.1	19.4	44.7
水分	質量%	29.6	3.4	0.7	3.5
ﾍﾌﾟﾀﾝ不溶解分	質量%	44.1	64.7	6.0	88.5
残留炭素分	質量%	25.1	11.5	2.4	30.6
酸素	質量%	44.8	31.9	4.5	25.9
Cl	質量ppm	1.4(XRF)	100未満	1.2(XRF)	100未満
無機塩素分	質量ppm	50未満	50未満	50未満	50未満
微量窒素	質量ppm	350	870	1400	1500
塩基性窒素	質量ppm	100	500	500	600

Co-processingに向けた今後の技術開発

関係者外秘 JPEC

- これまでに低炭素原料31種の調達・評価し性状DB化を完了
- ヒヤリングの結果、石油会社各社は低炭素原料研究を行っており、成分情報等の公開を要望
- 次ステップとして、Co－Processing実現に資する低炭素原料の成分情報整備を目指す

Co-Processing基盤術開発

低炭素原料DB構築公開
- 国内外品31種の入手・分析
- 低炭素原料の分析技術調査

低炭素原料の成分分析
- 分析装置の選定導入
- 低炭素原料の成分情報把握

低炭素原料の腐食物質把握と前処理検討
- 前処理影響の評価
- 成分情報に基づく処理影響の解析

低炭素原料のファウリング挙動解析
- マクロ実験によるファウリング特性評価
- ミクロ解析によるファウリング挙動解析

課題：石油とは違う性状を持つ低炭素原料の分析装置選定・手法確立・ライブラリ構築

- 沸点範囲が広い、熱安定性
- 多種多様の含酸素化合物：フラン、エステル、アルコールなど
- 製造・流通過程の不純物を含む　塩素、窒素

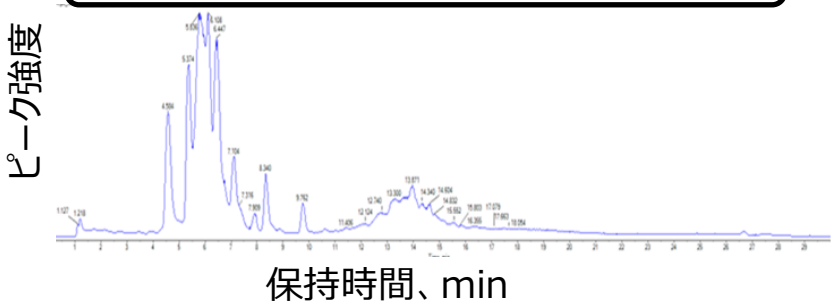
LC-TOFMSを選定導入

LC-TOFMS装置を用いた成分情報把握の例

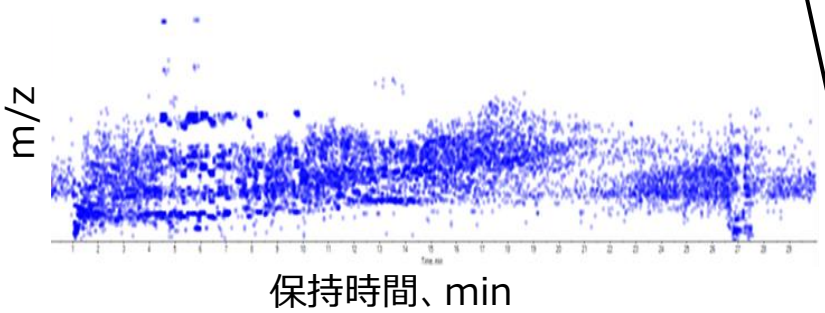
関係者外秘 JPEC

- 石油系原料に主に含まれる酸素化合物(ナフテン酸の単独骨格）は、低炭素原料に多く含まれない模様
- 各ピークの定性を行い、カルボン酸、アルコール、エステルとされる化合物が複数成分存在
- 次年度、過去に入手した試料成分情報を把握

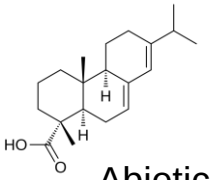
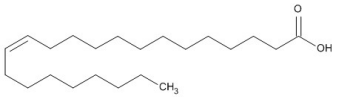
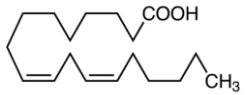
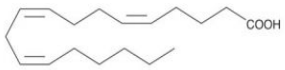
従来のLC/MSイメージ：成分が重複



LC-TOFMS：
LC/MSで重複している成分をさらに分離



成分数と同定された高～低濃度の酸素化合物

測定モード	ESI Positive	ESI Negative
成分数	16901	11625
酸素化合物	 Abietic acid 20%  cis-13-Docosenoic acid 88ppm	 Linoleic acid 15%  Pinolenic acid 8ppm

報告内容

関係者外秘 JPEC

１．技術開発の狙い

２．2024年度、技術開発結果

①原油系

成分予測モデルの開発

成分予測モデルの活用

②低炭素原料

一般性状データベースの構築

Co-Processingに向けた成分情報の把握

３．まとめと今後の予定

まとめと今後の予定

関係者外秘 JPEC

		2024年度	2025年度	
予測モデル開発	性状予測	・混合原油を用いた原油/留分の一般性状・組成予測精度の見極め	製油所展開に向けたセンサー開発	脱炭素効果の最終検証
	CDU入口成分予測	・LSR～AR 留分に含まれる450成分のプロトモデル作成 ・モデル活用方針の明確化	450成分(特にAR留分)の予測精度の向上	
	高沸点成分推定	・静岡大学様報告	JPEC-DB60原油への対応	
ラボ/オンライン分析計			FT-IR測定条件影響が説明変数に与える影響を把握	
データベース構築	原油	• 6原油評価完了（事業目標35原油） • 石油会社へのデータ公開 • 9年間継続してきた石油会社との原油・原料油研究会をクローズ		
	低炭素原料	・木質系原料中心に3種を入手評価し、DB登録（事業目標30達成） ・LC-TOFMS(成分構造解析)、微量塩素計(腐食成分分析)を選定、導入	・試料前処理手法含むLC-TOFMSによる成分分析法の確立 ・成分分析結果に基づく腐食原因物質の把握および	

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。