

要求仕様書

1. 概要

本要求仕様書は、「製油所コプロセッシングのための低炭素原料／石油基材の詳細成分情報共通化及びソフトウェアの作成」について定めたものである。

2. 仕様

令和7年度「非化石エネルギー等導入促進対策費補助金（次世代燃料生産・利用技術開発事業費のうち、合成燃料（e-fuel）等導入促進事業／製油所の脱炭素化研究開発支援事業費）」の一環として、製油所コプロセッシングのための石油系原料、低炭素系原料の詳細成分情報を共通化するためのソフトウェア作成を行う。

将来のコプロセッシング原料である石油系原料、低炭素原料の詳細成分情報を同時演算処理することで、石油系／低炭素系混合原料の物性予測、分子反応モデリングのほか、ファウリング等の挙動解析等を行うことを計画している。

しかしながら、石油系原料と低炭素原料の質量分析による詳細成分情報データはそれぞれ出力形式が異なり、石油系原料は FT-ICR MS 測定結果を市販ソフトウェアで分子式に帰属し、市販ソフトウェアの解析（CSA1 法）を用いて JACD 構造（48 桁の JACD 数値／分子式／存在量）に変換するものであり、低炭素原料は LC-TOF MS 測定結果に基づく汎用-MS 出力値である。

低炭素原料の汎用-MS 出力値の JACD 構造への変換は、過去に実施した石油系原料の JACD 開発において数か年を要したことや、低炭素原料が石油系原料に含まれない含酸素化合物（アルコール、カルボン酸、ケトン、エーテル等）や不純物を多く含んでいることから、多大な作業時間を要することが想定される。以上のことから、石油系原料の JACD 構造情報を汎用-MS 形式に変換することが望ましく、石油系原料の FT-ICR MS 測定結果を汎用-MS 形式として出力するため、分子帰属、JACD 構造変換に用いていた数値解析ソフトウェアに代わる汎用ソフトウェアを作成し FT-ICR MS 測定結果を汎用-MS 形式として出力する。

3. 見積内容

製油所で低炭素原料と石油基材の詳細成分情報を混合・演算処理するイメージを図1に示す。見積範囲は図1に示す（1）（2）（3）から構成される。

（1）数値解析ソフトウェアに置き換わる汎用ソフトウェアの作成

1) 現在の数値解析ソフトウェア

- プログラムコマンドに JPEC が開発したプログラム「CSA」を入力すると JACD 構造、存在量（単位：mol）が自動で出力され、次に「Mean_Correction」を入力すると各 JACD 構造の存在量に対して感度補正を行う（図2、3）。

- なお、それぞれのプログラム行数はおおよそ以下のとおりである。

「CSA」：100 万行

「Mean_Correction」：1,000 行

2) 汎用ソフトウェアの作成

- 「CSA」「Mean_Correction」のプログラムを Excel などの汎用ソフト実行可能とすること
- 数値解析ソフトウェアには、Excel ソフトには含まれない専用数式を含むことから web 上に無償公開されているライブラリーを用いること
- 汎用ソフトウェアの作成にあたり必要に応じて以下の開示が可能である。
上記「CSA」「Mean_Correction」プログラムを一部解読したドキュメント
数値解析ソフトウェア等を搭載した、当センターのデスクトップパソコンの貸出し
- 汎用ソフトウェアで作成されるファイルは以下の 9 件である。
 - ① JACD 構造／存在量（単位：mol）
 - (ア)Sa,1A,2A,3A,PO,PA,As の各ファイル：7 件
 - (イ)Sa～As を統合した Sheet_All：1 件
 - ※(ア)で共通する詳細成分は 1 つにまとめる。
 - ② JACD 構造／存在量（単位：mol）／感度補正後存在量（単位：mol）
Sa～As を統合した Sheet_All：1 件

(2) 汎用-MS 形式の出力

- 現在は数値解析ソフトウェアのプログラム実行過程で、汎用-MS 形式に相当する情報が削除されている。
- プログラム解析を行い、以下の汎用情報を新規に出力するプログラムを（1）の汎用ソフトウェアに組み込むこと

Formula

PrecursorMass

KM_CH2

KMD_CH2

<参考：KMD 解析>

MS スペクトル上の全成分を「分子量」「元素成分」でプロットし、MS スペクトルの構成成分を俯瞰して解析を行う手法

$$KM = \text{観測した精密質量} \times \text{繰返し構造の整数質量} / \text{繰返し構造の精密質量}$$

(3) Smiles 情報の付加

- ・ 図 2 に示す現行の JACD 構造（48 桁の JACD 数値／分子式／存在量）に、汎用的な化学式である Smiles 形式を新規付与するプログラムを作成すること
- ・ JACD 構造 10 万に対する詳細成分情報と Smiles をまとめたエクセル形式の表は当センターから開示する。

4. 参考情報

(1) 汎用ソフトウェアの作成に用いる Input データ

ペトロリオミクス技術研究室では重質油の詳細成分構造解析において、超高分解能質量分析装置であるフーリエ変換イオンサイクロトロン共鳴質量分析装置(FT-ICR MS)を活用して分子レベルの詳細な分析をおこない、超高分解能質量分析装置用分子帰属ソフトにより測定されたピークの分子式を帰属している。超高分解能質量分析装置用分子帰属ソフトから出力されるエクセル形式のデータは表 1 に示す FT-ICR MS で測定する各分画物(Sa～As)と FT-ICR MS 試験法に応じた 14 個 (①～⑭) である。

一例として、①②のエクセルファイルを添付資料 1、2 に示す。

表 1. 超高分解能質量分析装置用分子帰属ソフトから出力されるデータ

	各分画物						
FT-ICR MS 測定方法	Sa	1A	2A	3A	PO	PA	As
HighMass 法	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦
CID 法	⑧	⑨	⑩	⑪	⑫	⑬	⑭

(2) CSA 法について

CSA は、下記に示す文献、特許を参照

CSA 処理フロー : 文献「日本エネルギー学会機関誌 えねるみくす, Vol. 98, No. 6, 2019 」

CSA に関する発明 : 特許 6422525、特許 6813833

5. 納入先

〒136-0082

東京都江東区新木場二丁目 3 番 8 号 三井リンクラボ新木場 1 (2F)

一般財団法人カーボンニュートラル燃料技術センター

製造プロセス技術部 ペトロリオミクス技術研究室

6. 納期

2025 年 11 月 28 日まで

7. 売主の業務範囲

アプリケーション製作者 (以下、売主という。) は以下の業務を行う。

(1) アプリケーション仕様書の作成

(2) アプリケーションの製作

(3) アプリケーション操作マニュアルの作成

(4) 当センターが指定するノートパソコンへのアプリケーションインストール

- (5) 当センター職員への取扱い説明
- (6) 納入設置に伴い発生する廃材の処分

8. 提出書類および記載事項

- (1) 汎用ソフトウェア「CSA」の作成
- (2) 汎用ソフトウェア「Mean_Correction」の作成
- (3) 汎用・MS 形式の出力
- (4) Smiles 情報の付加
- (5) 納品書作成
- (6) 取り扱い説明

9. 一般事項

9. 1 適用法規、基準

本業務遂行にあたっては、設計、製作、施工、運転等において、関連する法規、基準、規格等を適用するものとし、売主は本件工事に係わる法的手続きが必要な場合には、適用法規等に規定された手続きを行うものとする。

9. 2 検収条件

- (1) 検収は以下の全ての事項が満足していることを、当センターが確認したときをもって完了したものとする。

- ①本仕様書に記載した仕様が全て満足されていること
- ②当センターの定めた方法により試運転を行い、本仕様書に記載された性能が全て満足されていること
- ③下記の書類が提出されていること
 - ・ソフトウェア仕様書
 - ・ソフトウェア操作マニュアル
 - ・その他当センターが必要とする書類等

(2) 異常時の処置

検収により異常が発見された場合、その原因が売主の設計、製作、施工等に起因している場合は、速やかに売主はその責任において当センターの承認を受け、無償で必要な変更、改造、取替え等の処置を講ずるものとし、更に当センターの検収を受けなければならない。

9. 3 保証

売主は、本装置の納入後 1 年以内に故障が発生し、その原因が装置の品質、性能等に何らかの異常を発見した場合は、速やかに必要な処置を無償で講ずるものとし、さらに当センターの検収を受けなければならない。

9. 4 その他

- (1) 本仕様書に定めない事項は、別途協議のうえ定めるものとする。
- (2) 納期の遅延が売主の責任範囲内において明らかになった場合は、速やかに当センターに連絡し、別途協議するものとする。
- (3) 設置作業では電源は無償支給するが、それ以外の用役は売主で用意する。
- (4) 売主は、設置作業を開始する 7 日前迄に所定の「作業申請書」に必要事項を記入して提出する。
- (5) 納入設置に伴い発生する廃材は売主が責任をもって処分すること

以 上