

2026年度 JPECフォーラム

機械学習を活用した石油系残油留分の
高沸点成分外挿予測手法の開発

2026年5月12日

静岡大学 工学部 化学バイオ工学科

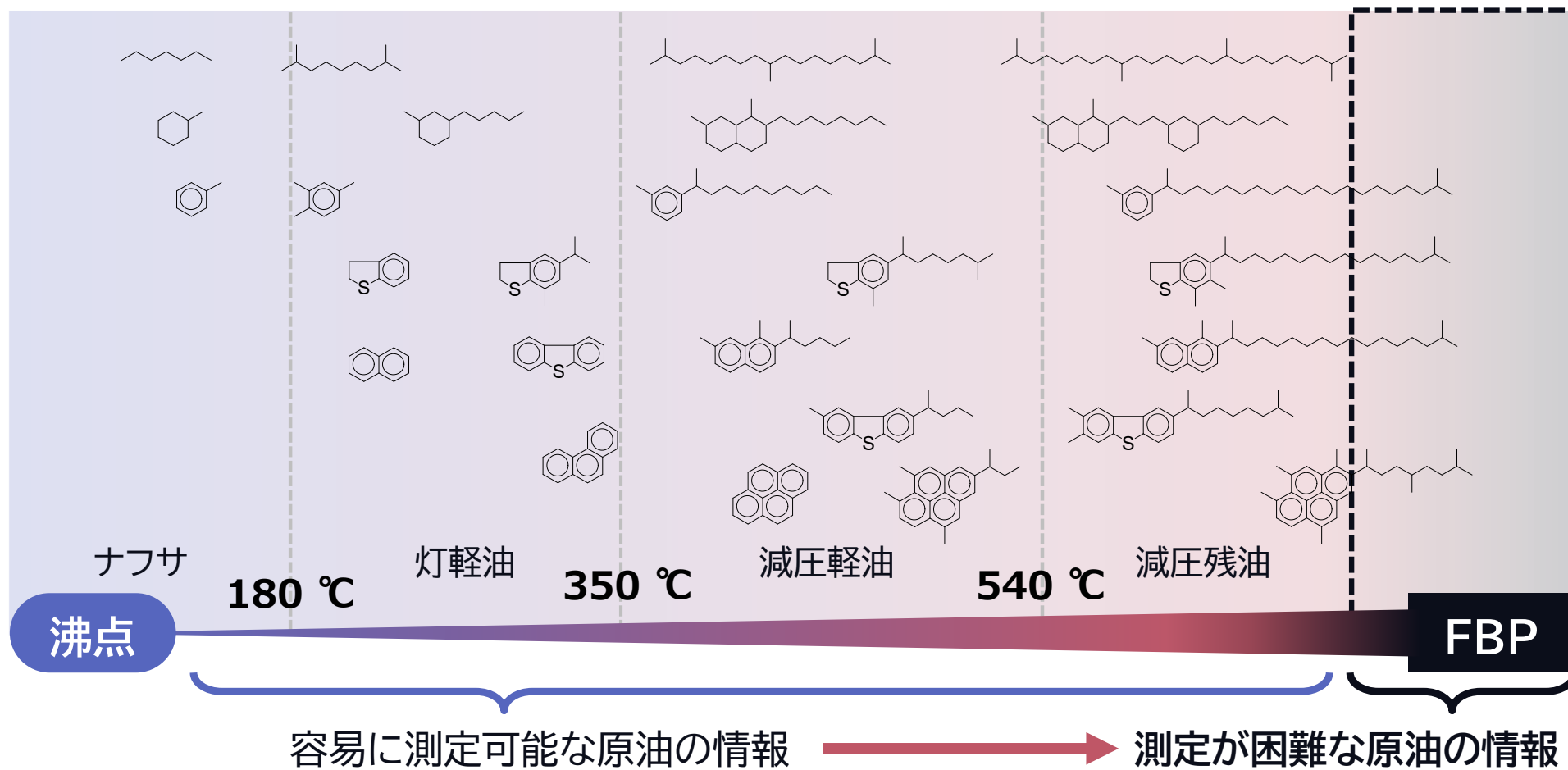
講師 村上裕哉

murakami.yuhya@cii.shizuoka.ac.jp

研究背景

目的

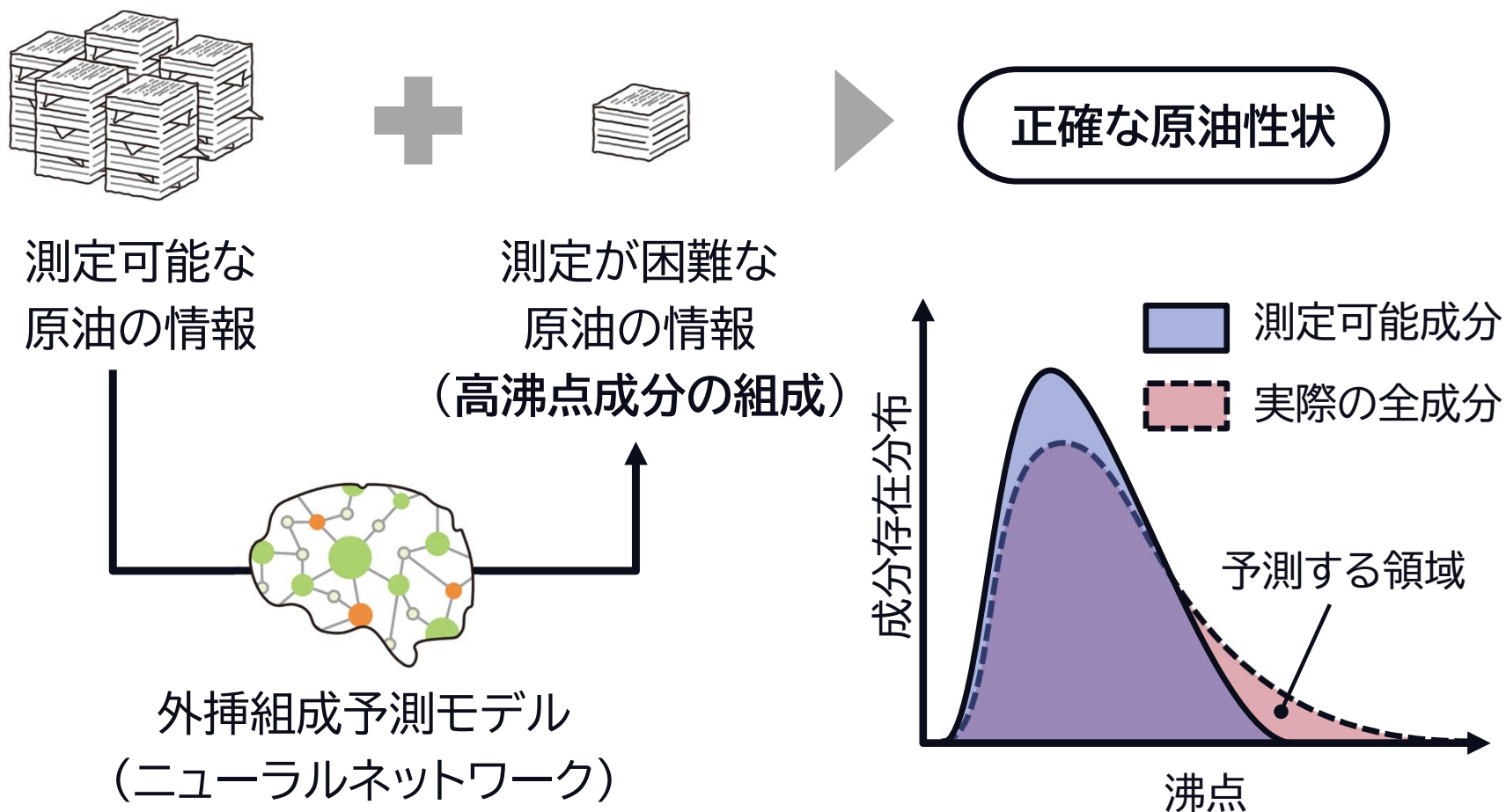
- ① リアルタイム & 正確な原油の性状推定でCDU装置の最適運転を実現
- ② 原油混合安定時のAsphaltene中の未知の重質成分の解明



2025年度の目標

多様な原油における実測不可能な高沸点成分の外挿

研究背景



研究目的

低沸点成分の組成情報(測定可)から高沸点成分の組成情報(測定不可)を外挿予測する機械学習モデルの開発

発表の概要

目的: 高沸点成分の構造推定・濃度推算

研究背景 石油中の高沸点成分予測の重要性

検討1 外挿範囲構造の予測モデルの概要

→ 外挿範囲における存在可否・存在量を適切に予測可能

検討2 外挿濃度の決定と外挿結果の検証

→ 未知の化合物の外挿補完に成功

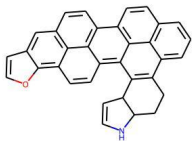
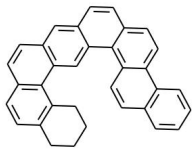
検討3 複数原油の実測物性と予測結果の比較

→ 実際のバルク物性の予測性能向上に寄与することを確認

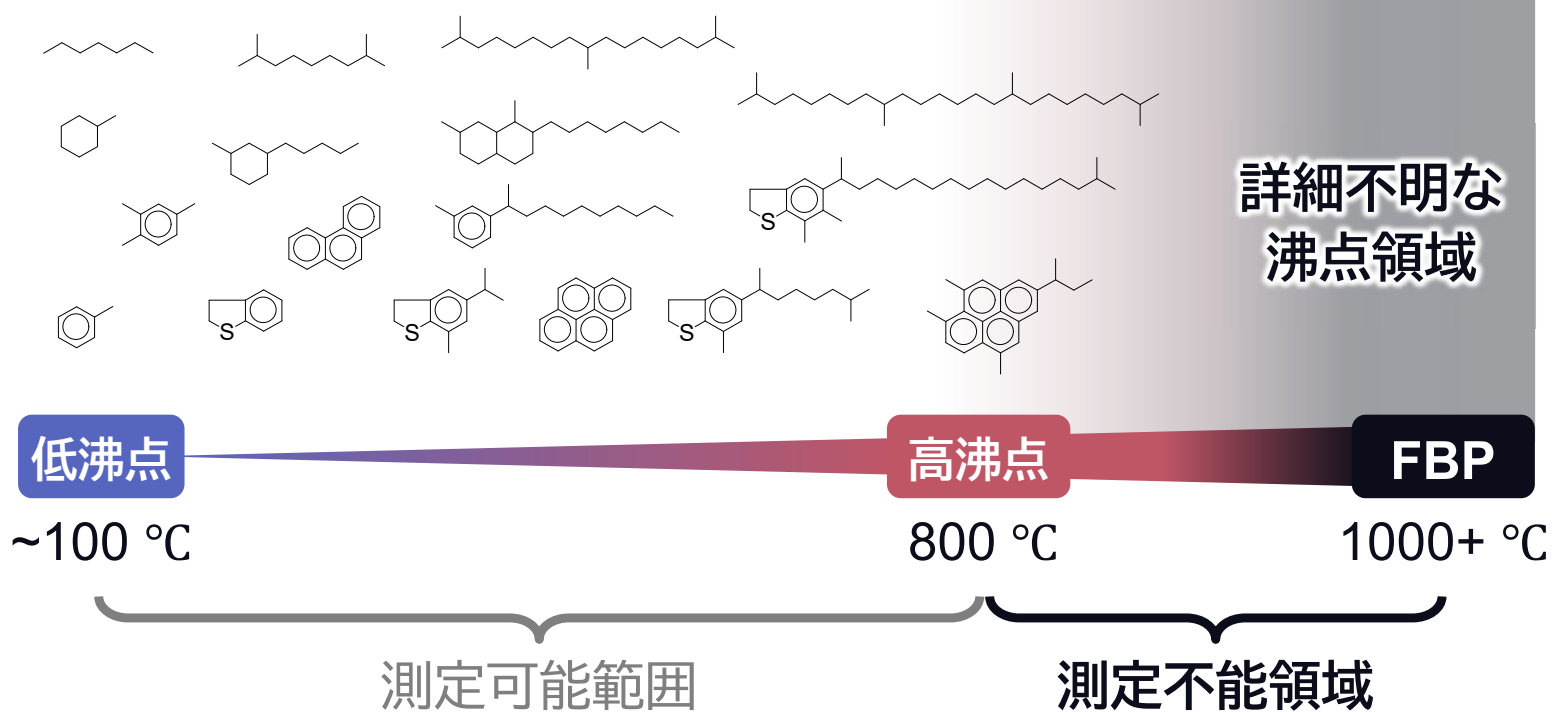
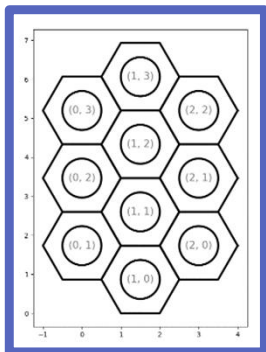
総括

研究背景 | 予測対象

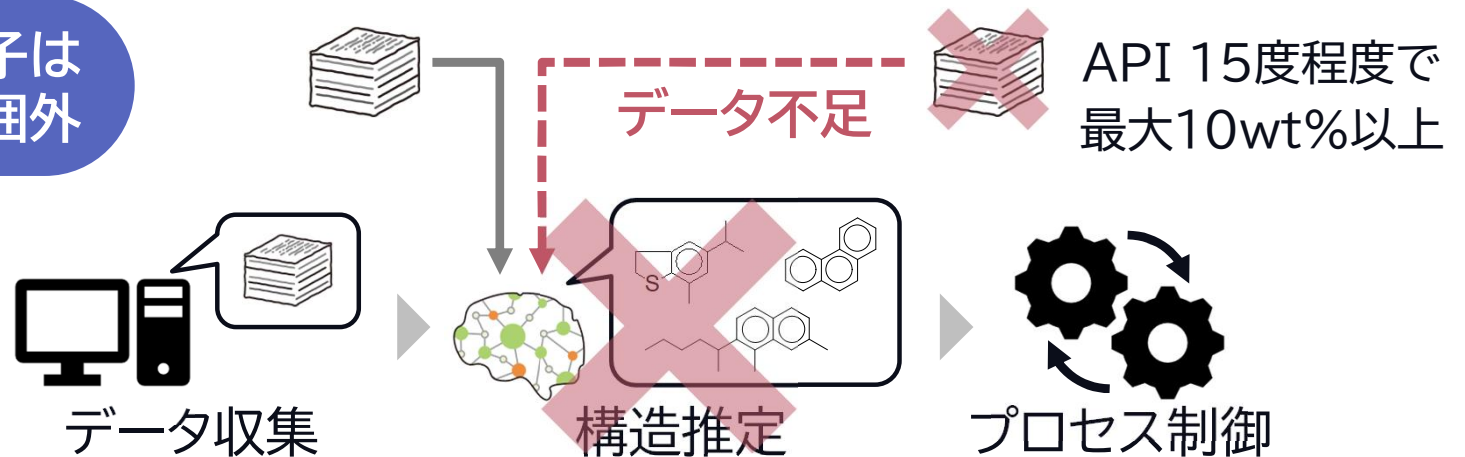
10万超の
化合物



⋮

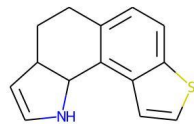
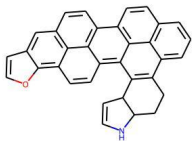
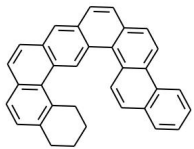


巨大分子は
測定範囲外

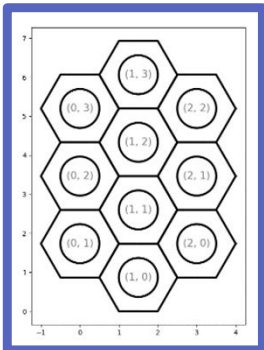


研究目的

10万超の
化合物



⋮



巨大分子は
測定範囲外

低沸点

~100 °C

高沸点

800 °C

FBP

1000+ °C

測定可能範囲

測定不能領域

測定データ



外挿予測



予測対象

研究目的

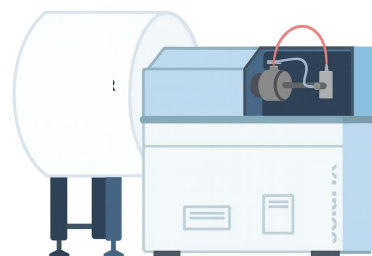
測定可能な沸点範囲の実測化合物データを利用して実測可能な沸点範囲に存在する未知の化学物質の構造を機械学習により推定

>> 外挿範囲での構造推定が必要

データ収集



24種類の原油のAR留分
(360°C ~ FBP)



FT-ICR MS
(イオンサイクロトロン
共鳴質量分析装置)



各原油に
10万成分以上

JACDによる構造表現

化合物のデータセット

JACD*

Core 005 + Core 055 + Side 006 + N 02 + ... >> JACD 0050010550300...



$C_{14}H_{10}$



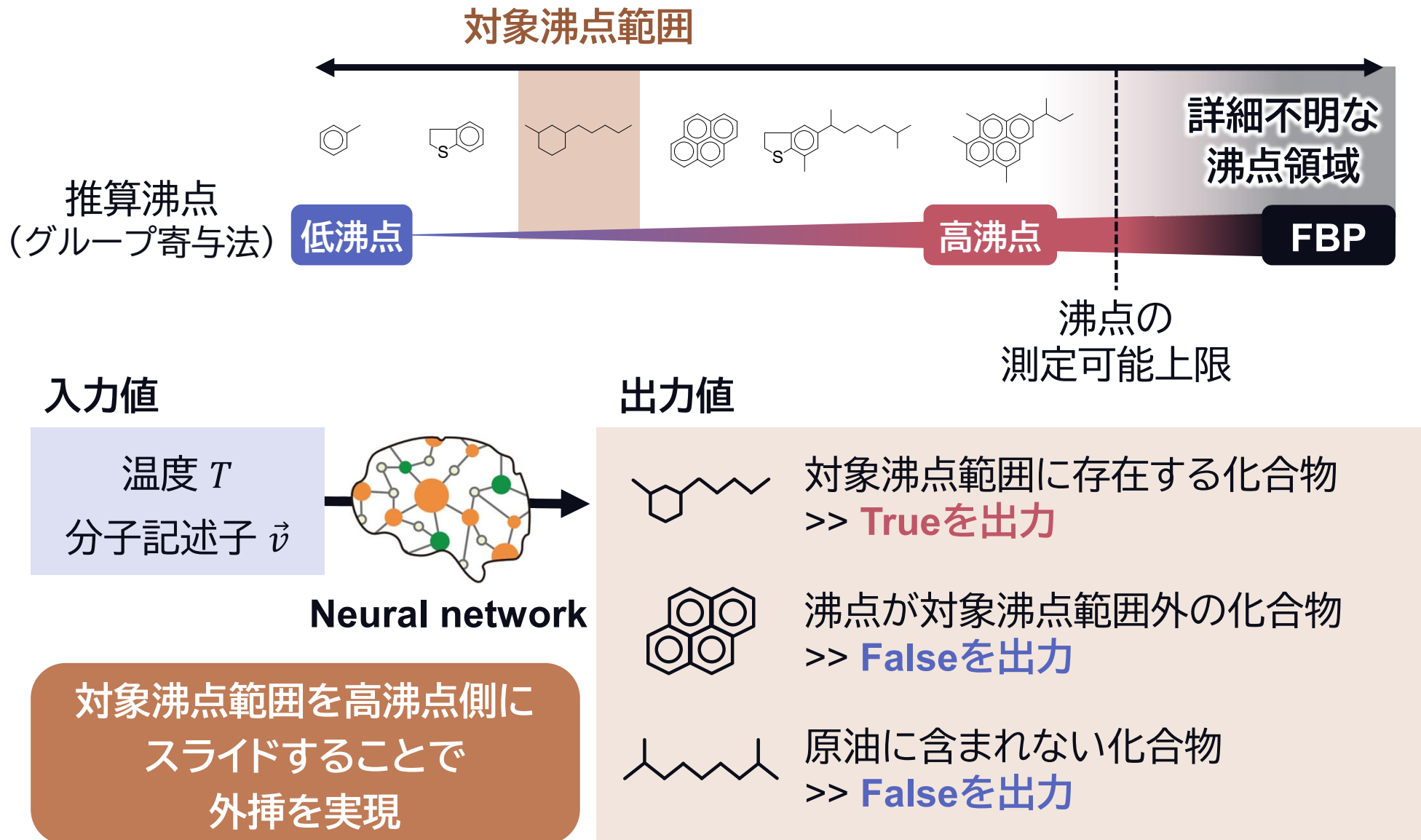
$C_{24}H_{14}$

データセット中の情報

- JACD (構造情報)
- モル濃度
- 化学式
- グループ寄与法で推算された沸点

*Juxtaposed Attributes for Chemical-Structure Descriptor, JPECが開発した分子記述子

外挿予測モデルの構造



外挿範囲存在成分の存在確率予測

外挿範囲データ(沸点800℃以上)の成分の予測精度検証結果

#1	存在	非存在
正答率	98.84 %	99.88 %
数	15,902	88,848

ほとんどのケースで
正解率も99%以上を達成

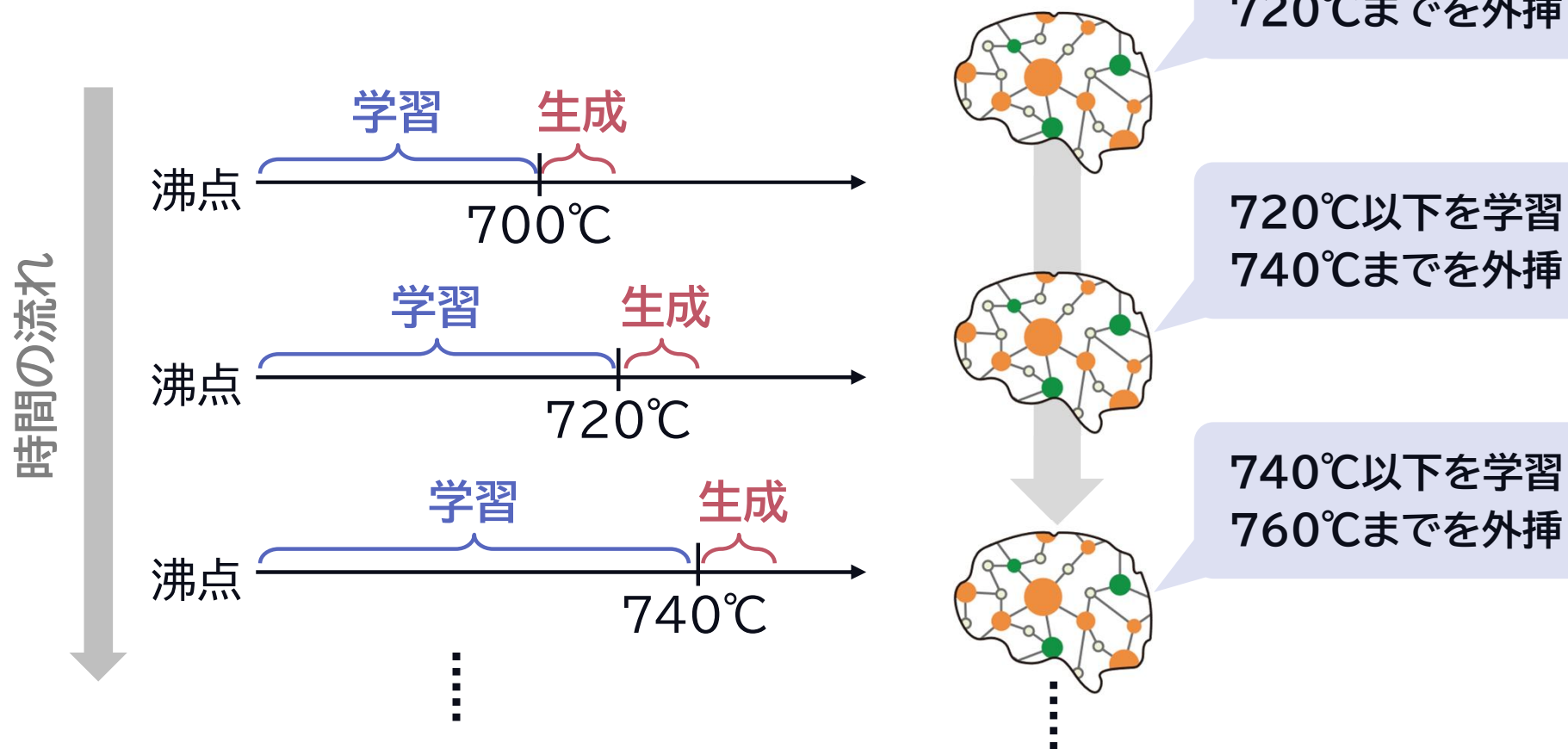
非存在成分のうち
「存在」と予測された成分は
測定範囲外の成分の可能性あり

#2	存在	非存在
正答率	95.55 %	99.90 %
数	4,963	82,959

#3	存在	非存在
正答率	100.0 %	99.97 %
数	693	89,720

外挿予測モデルの構造

逐次予測の手順



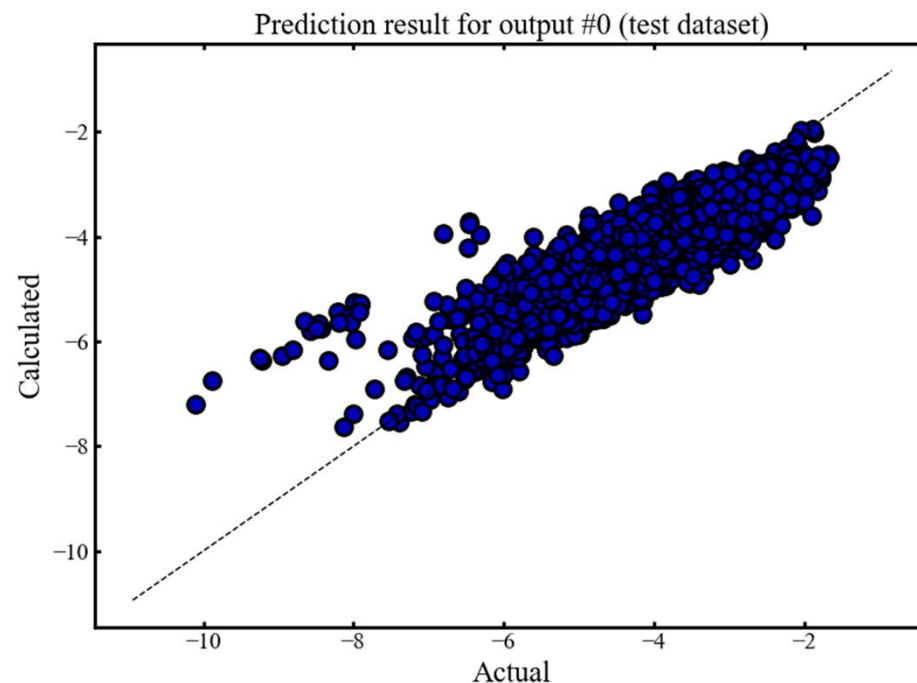
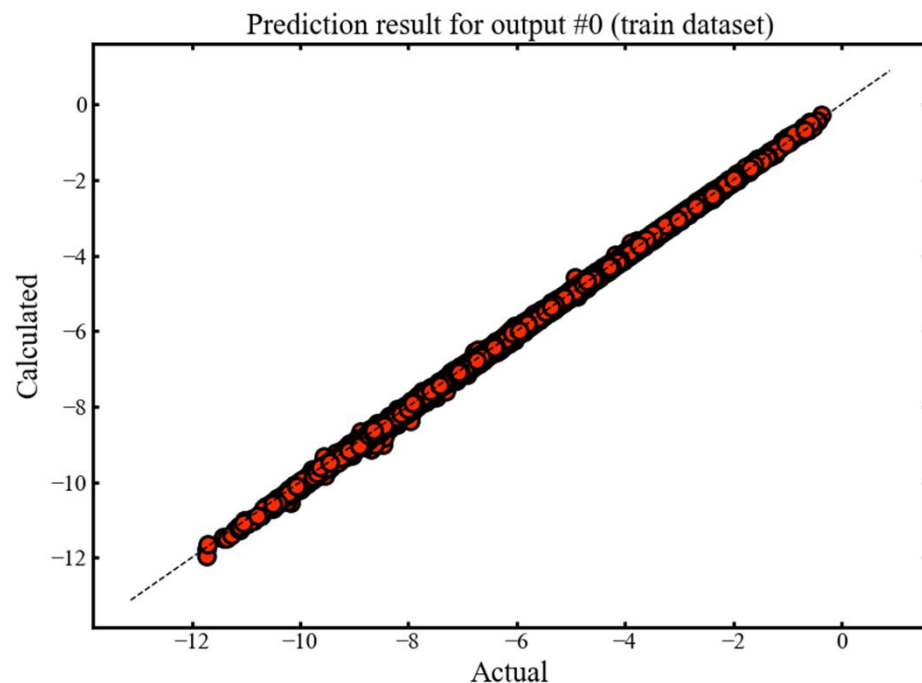
各ステップで10億の化学物の候補から外挿範囲に存在する構造を推定
各ステップで最大10,000化合物を外挿補完

原油#1の外挿範囲成分濃度予測

存在確率と同様の手法で存在モル濃度を予測するモデルを作成

360~800°Cの予測結果(学習データ)

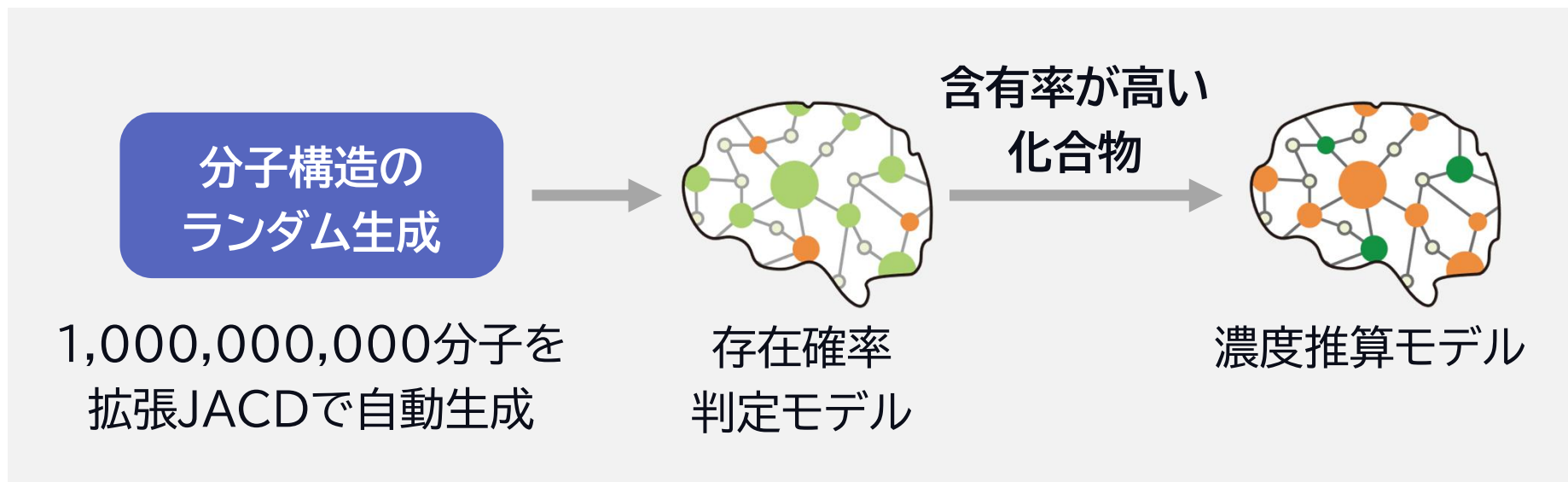
800°C以上の予測結果(未学習データ)



低沸点成分で作成したモデルを高沸点成分の外挿予測に利用可能

外挿領域に存在する分子構造の予測

分子構造予測の流れ



- ① 10億の多環化合物を拡張JACDを利用することでランダム生成
- ② 作成した存在確率判定モデルで外挿領域に含まれる分子を特定
- ③ 外挿領域に含まれている分子の濃度を濃度推算モデルで推算

1~3を繰り返すことで実測不能領域の化合物を推定

発表の概要

目的: 高沸点成分の構造推定・濃度推算

研究背景 石油中の高沸点成分予測の重要性

検討1 外挿範囲構造の予測モデルの概要

→ 外挿範囲における存在可否・存在量を適切に予測可能

検討2 外挿濃度の決定と外挿結果の検証

→ 未知の化合物の外挿補完に成功

検討3 複数原油の実測物性と予測結果の比較

→ 実際のバルク物性の予測性能向上に寄与することを確認

総括

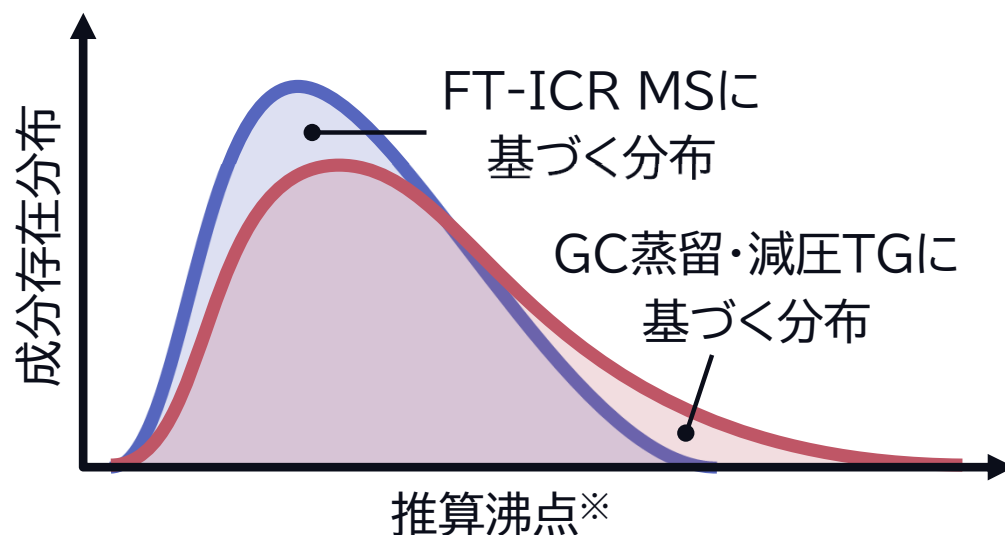
高沸点成分成分外挿への道筋

昨年度までの課題

高沸点成分の候補の探索には成功したが
どの成分がどれだけ含まれているかの定量的な基準があいまい

今年度の方針

測定ができない高沸点成分の含有量を実測データから予測
→ 外挿すべき成分の分布を事前に定義



仮定

二つの分布の差分が
外挿で保管すべき成分の分布

外挿補完量の決定



FT-ICR MS
測定データ

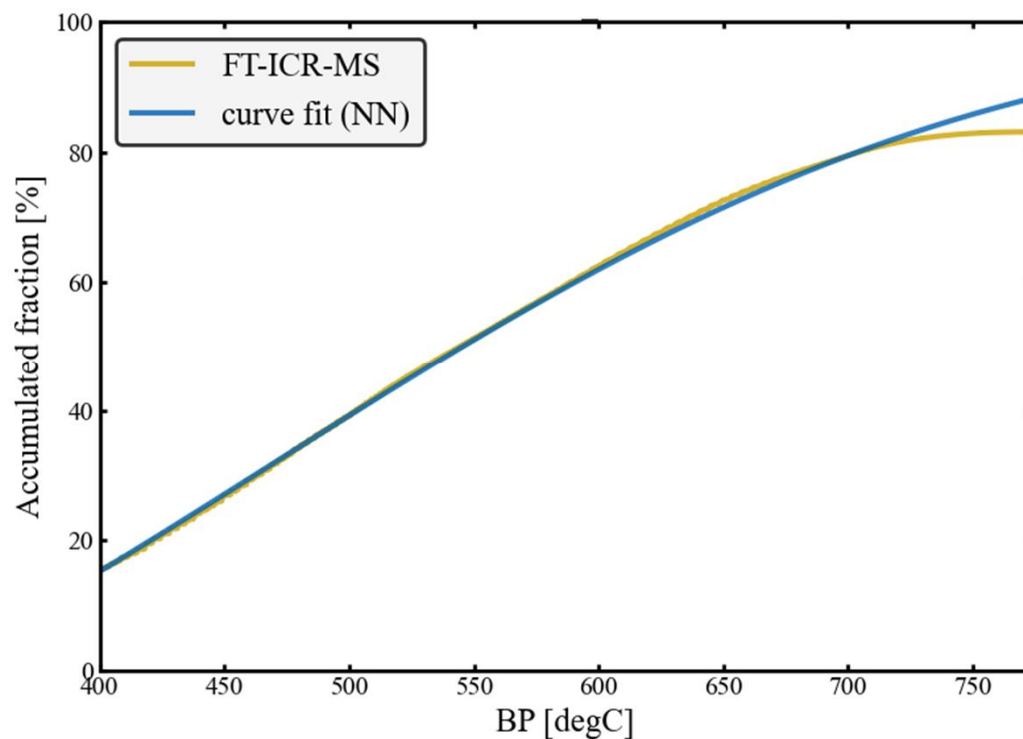


沸点分布
予測モデル



GC蒸留データ

Weibull分布を仮定

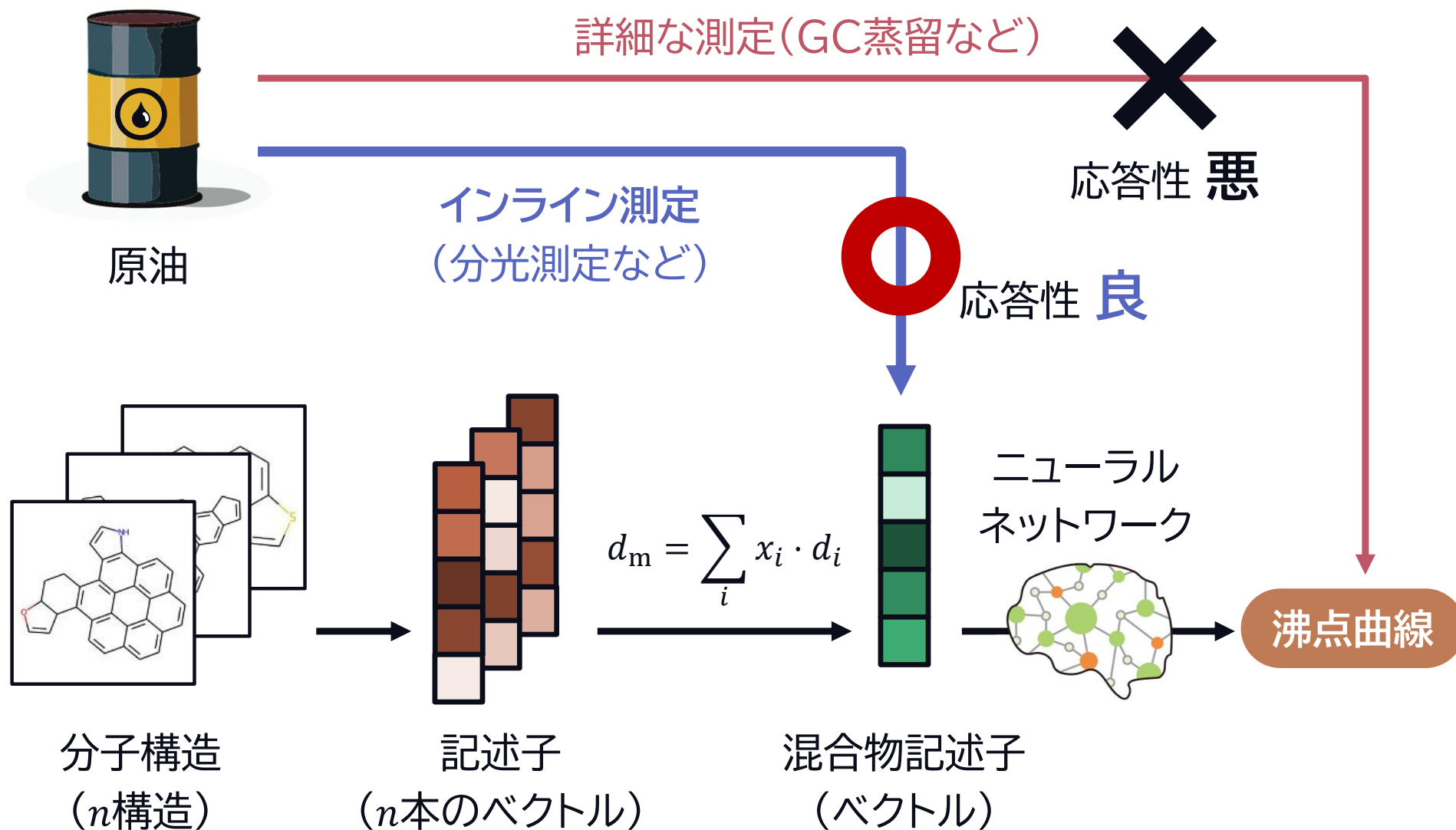


GC蒸留データ(700°Cまで)を
沸点曲線でフィッティング

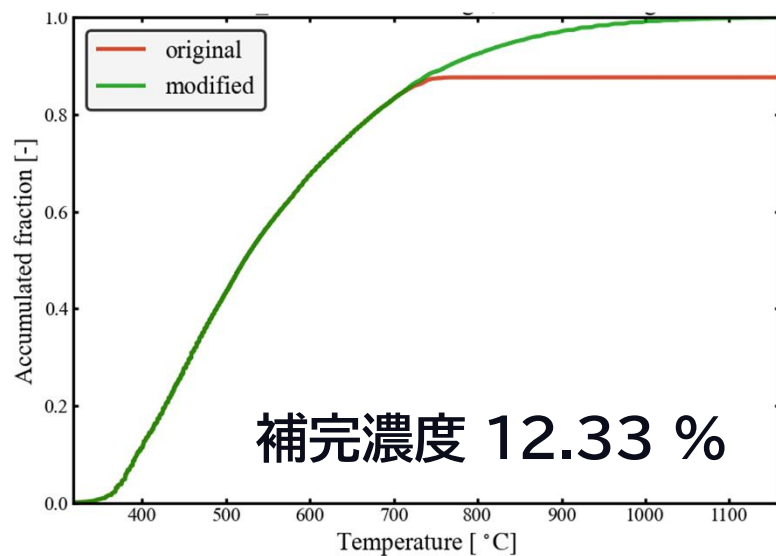
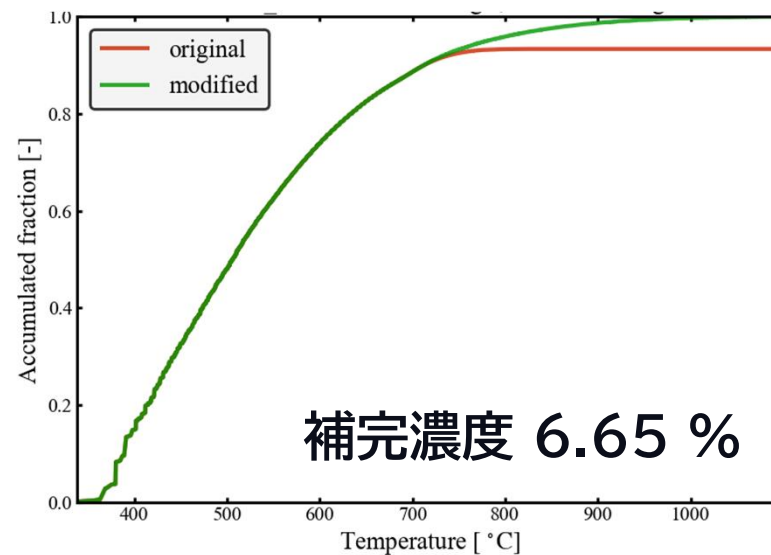
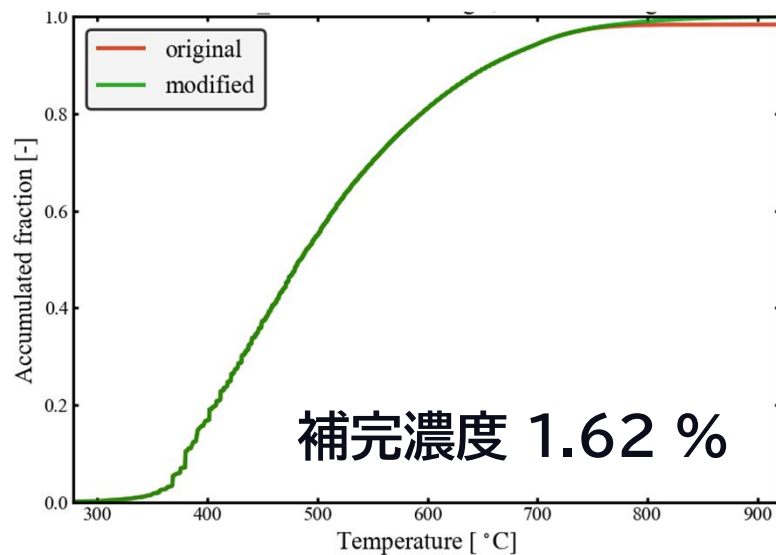
曲線を高沸点領域までに外挿し
未知の化合物の存在量を推定

※ FT-ICR-MSの測定データも
この領域が測定不能であると示唆

実用的な外挿補完技術に向けて



外挿結果の確認: 沸点



赤線: FT-ICR MSデータ

緑線: 補間構造追加後データ

外挿データを含めた沸点曲線は
滑らかで定性的に妥当な結果

→ 実測不可能な領域の構造推定可能

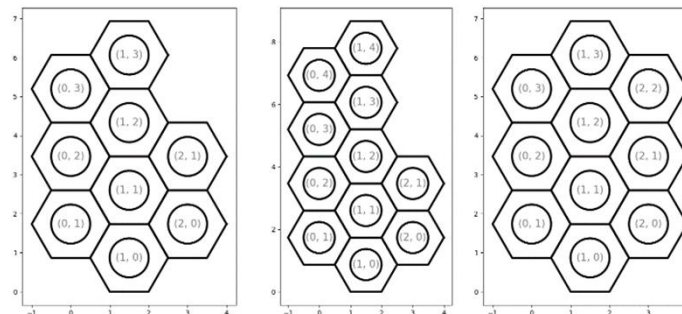
外挿成分数・濃度

成分数

	外挿前	外挿後	差分	補完濃度	密度 g/mL
#4	156,009	315,981	159,971	1.62	0.969
#5	224,457	475,944	251,487	3.42	0.981
#6	185,527	537,818	352,291	6.65	0.985
#7	134,163	556,806	422,649	11.89	1.009
#8	146,928	562,465	415,537	12.33	1.017

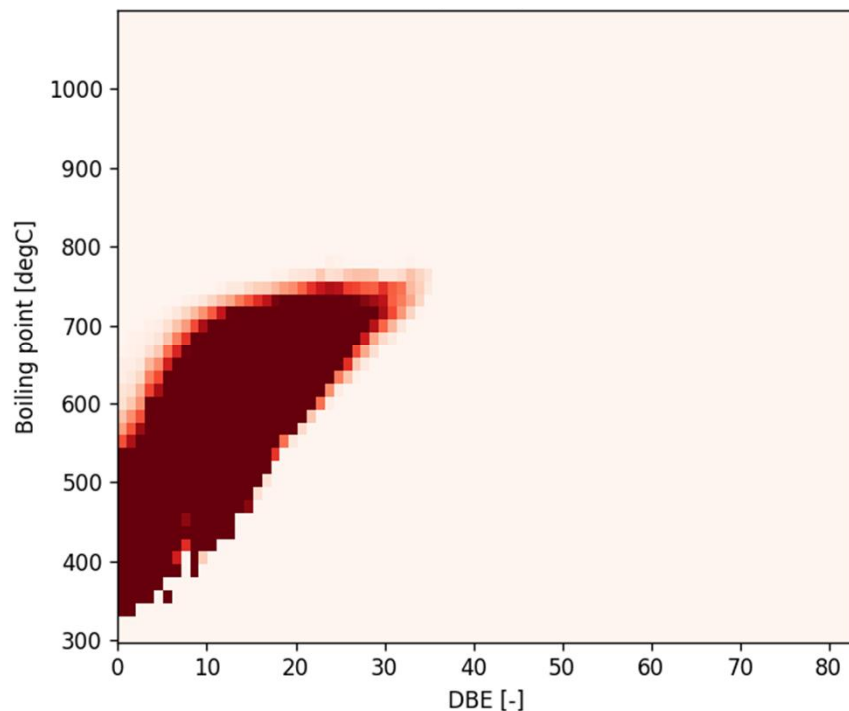
補完濃度が高いほど外挿成分数も多い

縮合度の高い化合物を外挿補完

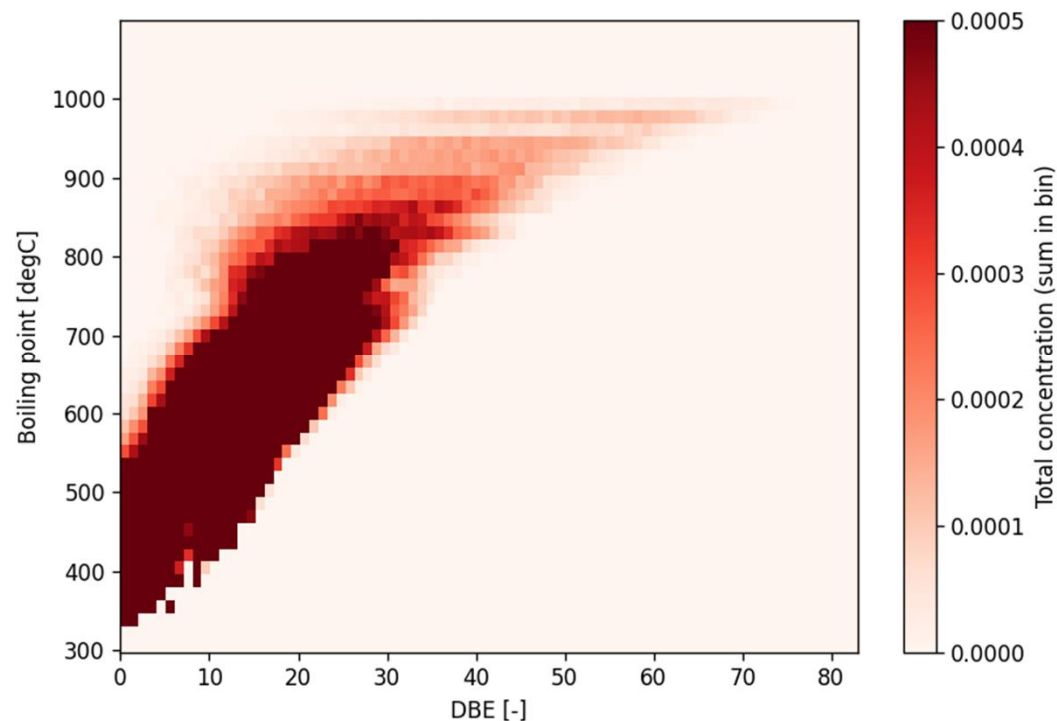


原油#7の沸点 vs DBE分布

元データから作成した分布図



外挿補完データから作成した分布図



高沸点・高DBE領域の化合物を選択的に外挿補完していることを確認
→ 環数40、沸点1000°C、DBE70程度まで外挿補完可能

※ $DBE = C - H/2 + N/2 + 1$: Double Bond Equivalent

発表の概要

目的: 高沸点成分の構造推定・濃度推算

研究背景 石油中の高沸点成分予測の重要性

検討1 外挿範囲構造の予測モデルの概要

→ 外挿範囲における存在可否・存在量を適切に予測可能

検討2 外挿濃度の決定と外挿結果の検証

→ 未知の化合物の外挿補完に成功

検討3 複数原油の実測物性と予測結果の比較

→ 実際のバルク物性の予測性能向上に寄与することを確認

総括

総括

目的: 高沸点成分の構造推定・濃度推算

研究背景 石油中の高沸点成分予測の重要性

検討1 外挿範囲構造の予測モデルの概要

→ 外挿範囲における存在可否・存在量を適切に予測可能

検討2 外挿濃度の決定と外挿結果の検証

→ 未知の化合物の外挿補完に成功

検討3 複数原油の実測物性と予測結果の比較

→ 実際のバルク物性の予測性能向上に寄与することを確認

総括

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。