

2026年度 JPECフォーラム

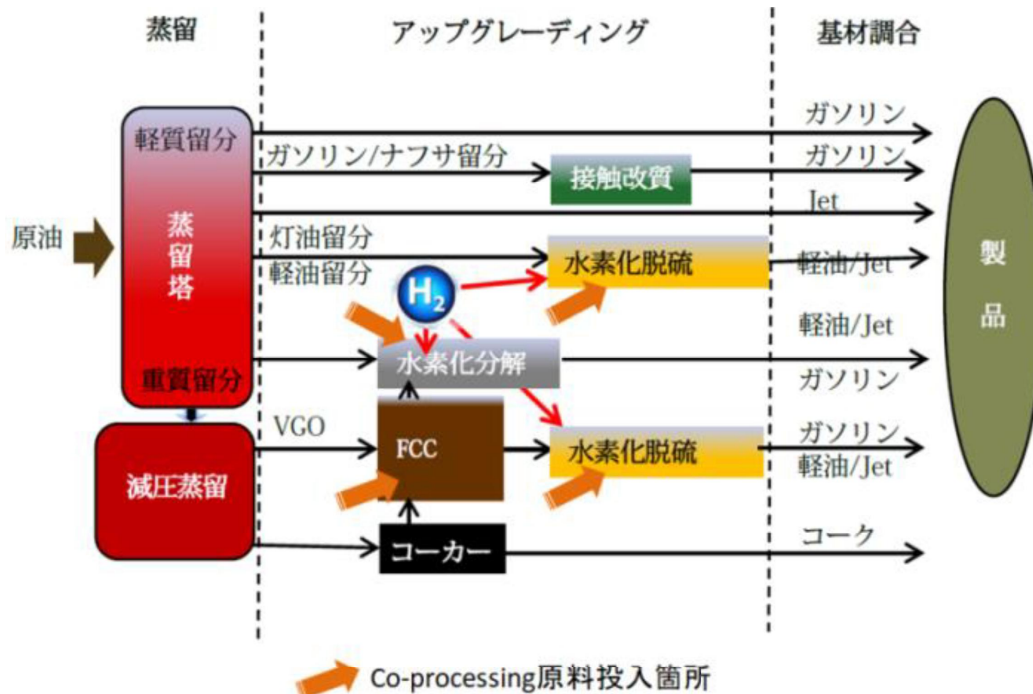
バイオオイルと重質油の混合接触分解における  
生成物組成を予測する機械学習モデルの構築

2026年5月12日

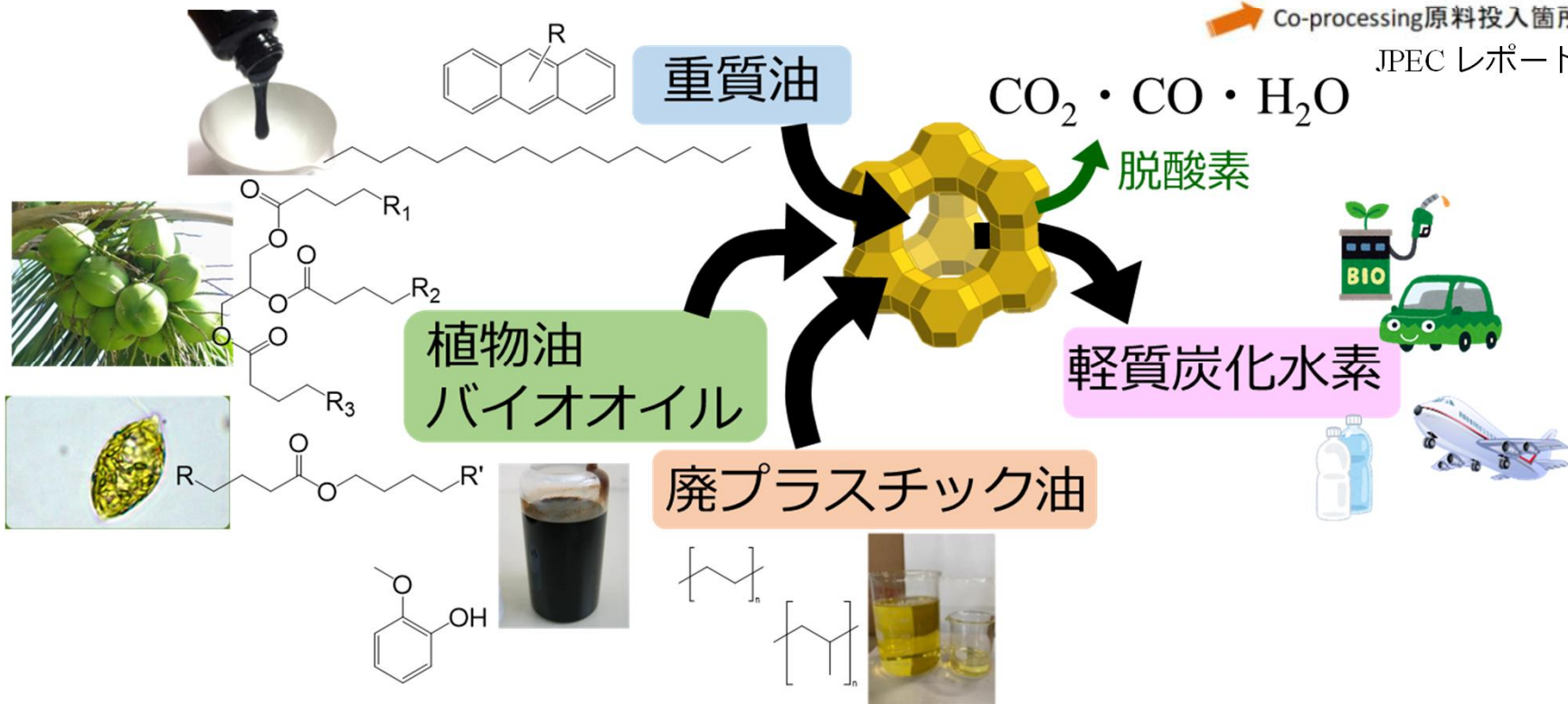
信州大学/嶋田五百里

## 流動接触分解（FCC）プロセス

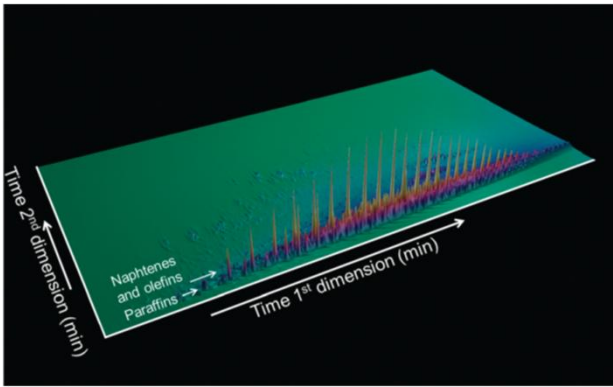
従来の役割である重質油の分解に加え、再生可能資源やリサイクル資源の共処理（co-processing）での利用も期待されている



JPEC レポート, No.201004 (2020)

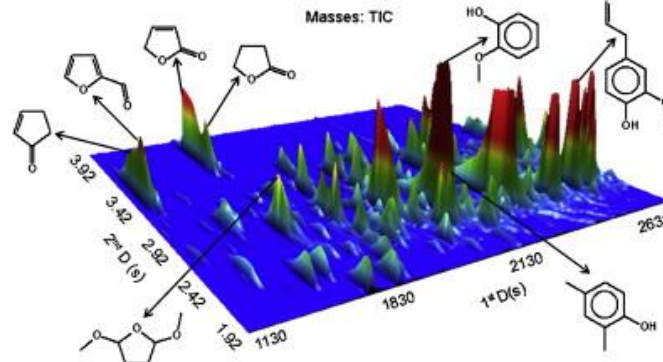


## 重質油



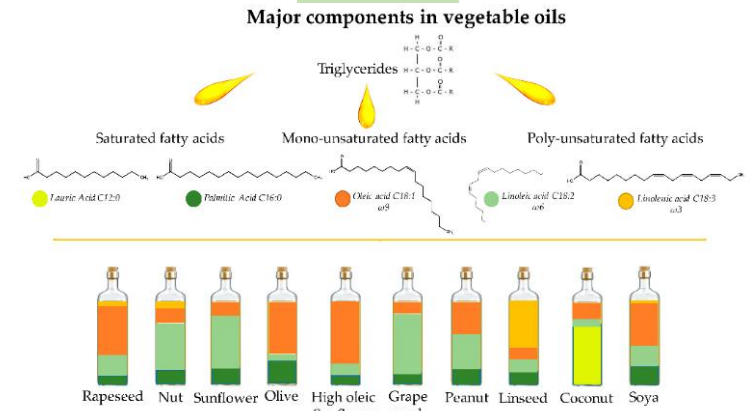
Vogt and Weckhuysen, *Chem. Soc. Rev.*, **44**, 7342-7370 (2015).

## 液化バイオマス (バイオオイル)



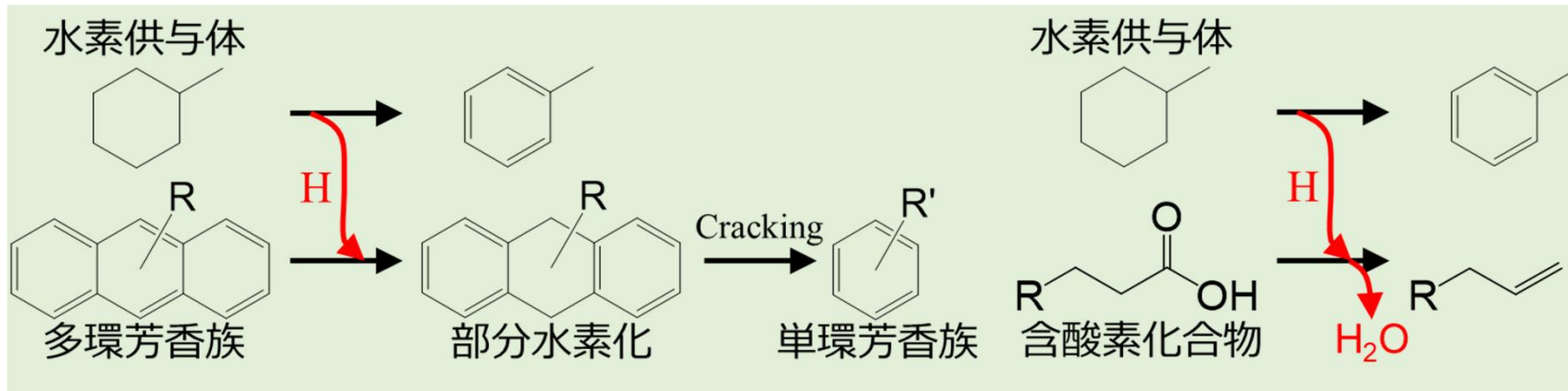
Tessarolo et al., *J. Chromatogr. A*, **1279**, 68-75 (2013).

## 油脂



Yara-Varon et al., *Molecules*, **22(9)**, 1474-75 (2017).

成分間での相互作用（特に水素の授受反応）が生成物に強く影響

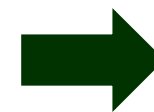


Shimada et al., *Fuel Process. Technol.*, **232**, 107267 (2022).

Shimada et al., *J. Jpn. Petrol. Inst.*, **63(1)**, 10-19 (2020).

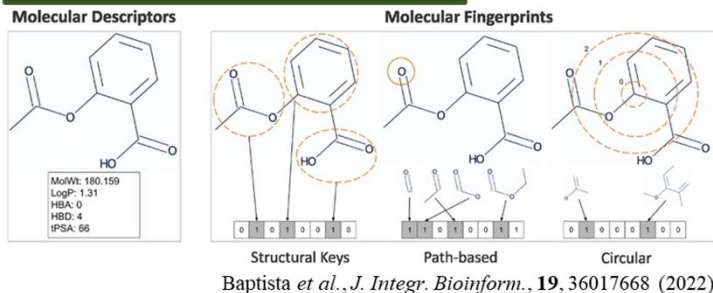
極めて複雑な反応システムの中で

- どんな生成物がどのくらいできるか？
- 重要な反応因子は何か？



機械学習の利用

## 分子フィンガープリント



Baptista et al., J. Integr. Bioinform., 19, 36017668 (2022)

## 原料組成の記述

## 分子フィンガープリント (MACCS fingerprint)

原料1	1	0	0	1	0	0	0	0	1	...
原料2	0	1	0	1	1	0	0	1	0	...
⋮										
原料M	1	1	0	1	0	0	0	1	0	...

重み付け足し合わせ



## 物理化学に基づく特徴量エンジニアリング

### 基本特徴量

反応温度  $T$   
 接触時間  $\tau$   
 原料濃度  $X_i$

### 濃度変化項 (微分反応器モデル)

1次反応  $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i \cdot \tau$   
 2次反応  $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i \cdot X_j \cdot \tau$

### 濃度交差項 $X_i \cdot X_j$

### 濃度変化項 (積分反応器モデル)

1次反応  $X_i \cdot \exp(-k\tau)$  ( $k = A \exp(-E_a/RT)$ )  
 2次反応  $X_i^2 / (X_i + (k\tau)^{-1})$   
 $X_i X_j (1 - \exp((X_j - X_i)k\tau) / (X_i - X_j \exp((X_j - X_i)k\tau)))$

### 反応速度項

1次反応  $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i$   
 2次反応  $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i \cdot X_j$

逐次反応項  $X_i / X_j$   
 $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i / X_j$   
 $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i / X_j \cdot \tau$

## 物理化学・反応工学のルールに基づいてすべての成分間の反応を表す記述子を作成

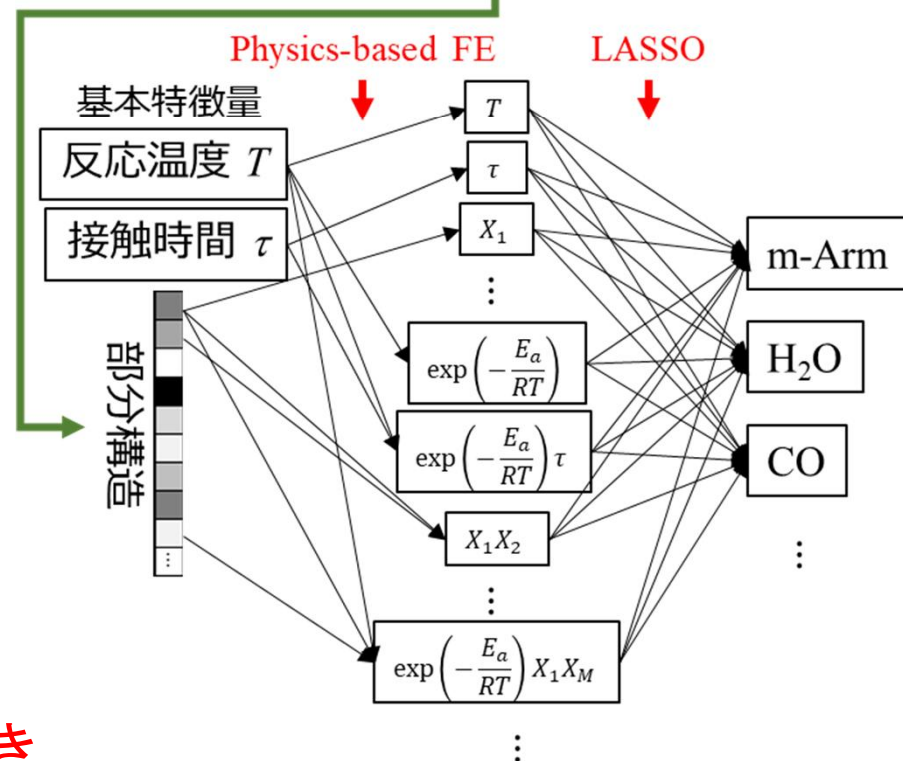
## LASSO回帰

$$\hat{y} = \sum_{m=0}^M w_m \phi_m = \mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi} \quad \boldsymbol{\phi} = \begin{pmatrix} T \\ t \\ X_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\tilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_{\text{train}}} (y_{\text{train},n} - \mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi}_{\text{train},n})^2 + \frac{\alpha}{2} \sum_{m=1}^M |w_m|$$

→最小化するwを探索

## データに基づき重要な記述子を選択



# 対象とする実験データ

実験データ: 約300点

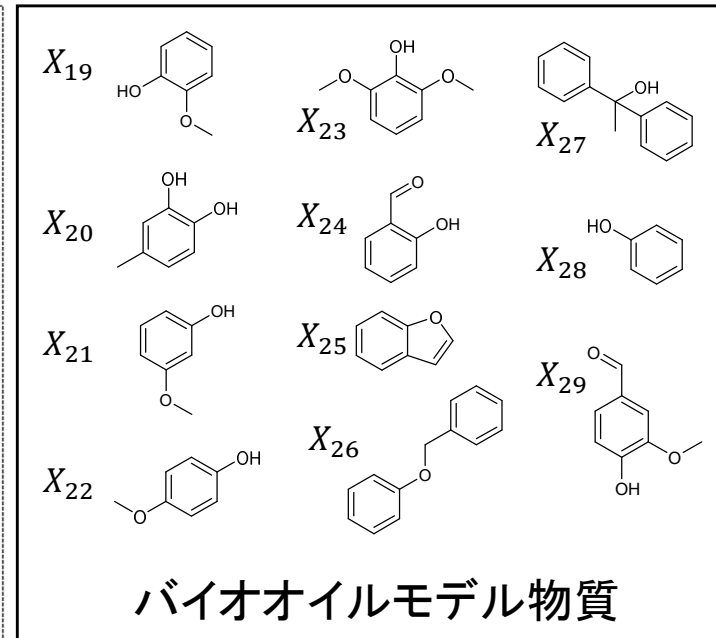
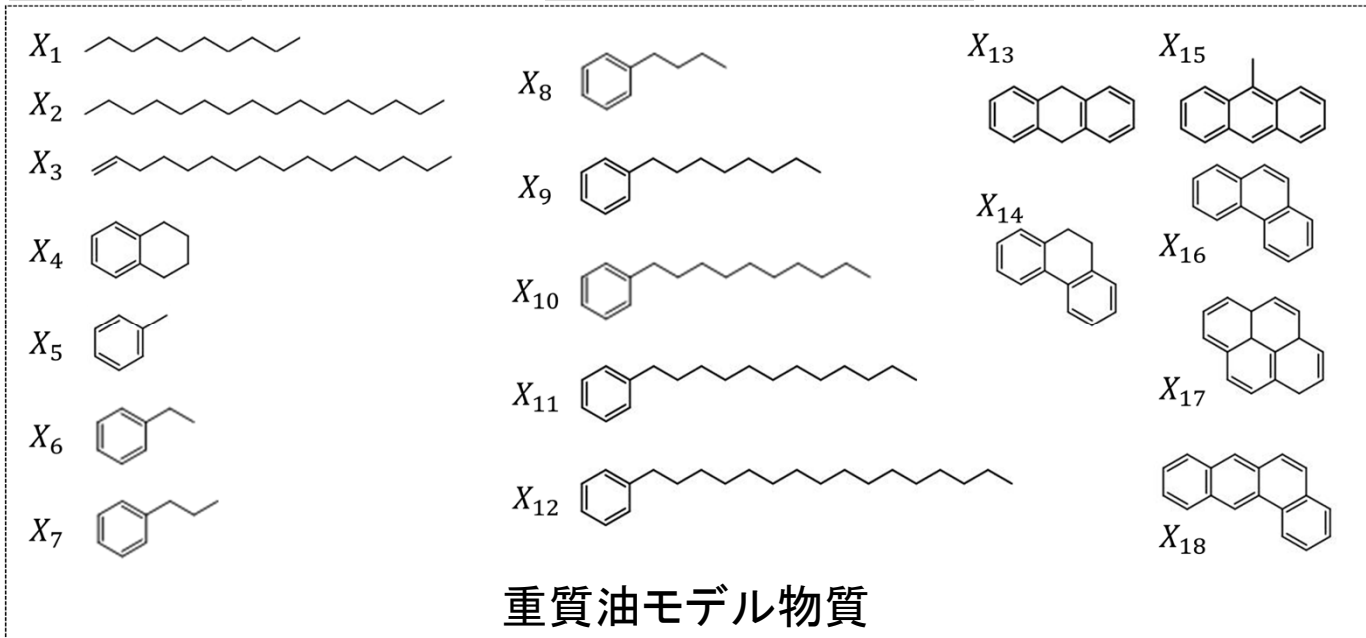
反応温度 450~550°C

接触時間(Cat/oil)

0.16~7.50 g/g

原料組成

35種類



- ココナッツ油 (飽和脂肪酸トリグリセリド)
- ヒマワリ油 (不飽和脂肪酸トリグリセリド)
- 廃食油 (不飽和脂肪酸トリグリセリド)

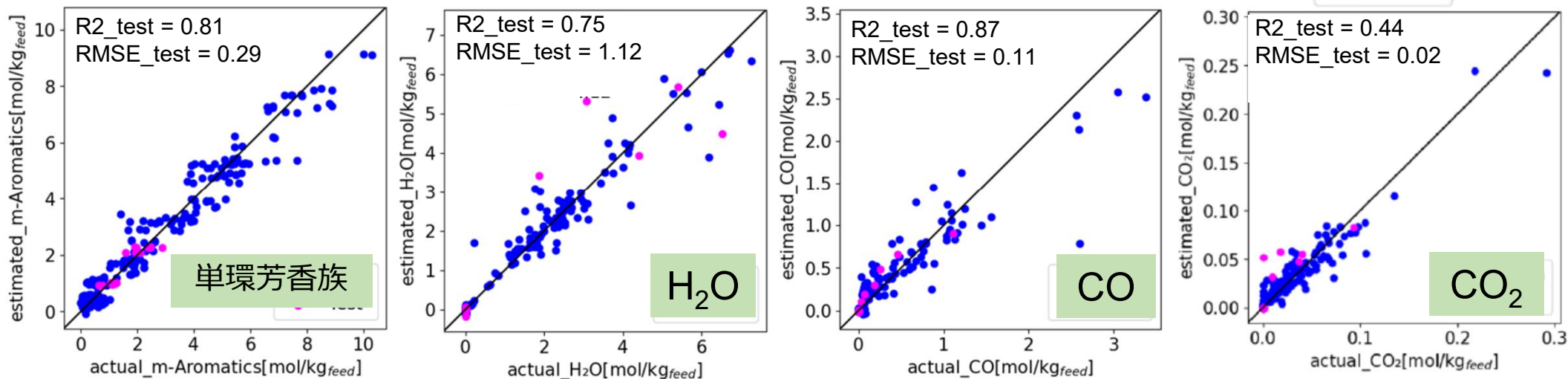
植物油

- FCC原料油
  - VGO\_I
  - VGO\_II
  - VGO\_III

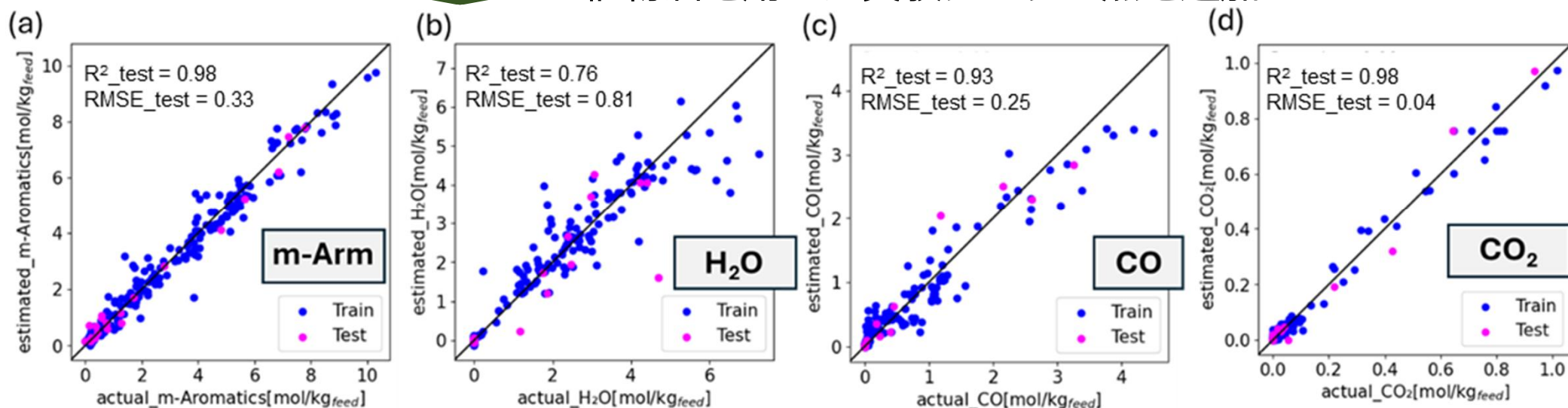
重質油

# 従来の研究成果

重質油モデル物質 + バイオオイルモデル物質 (実験データ257点)



↓ 植物油を用いた実験データ15点を追加



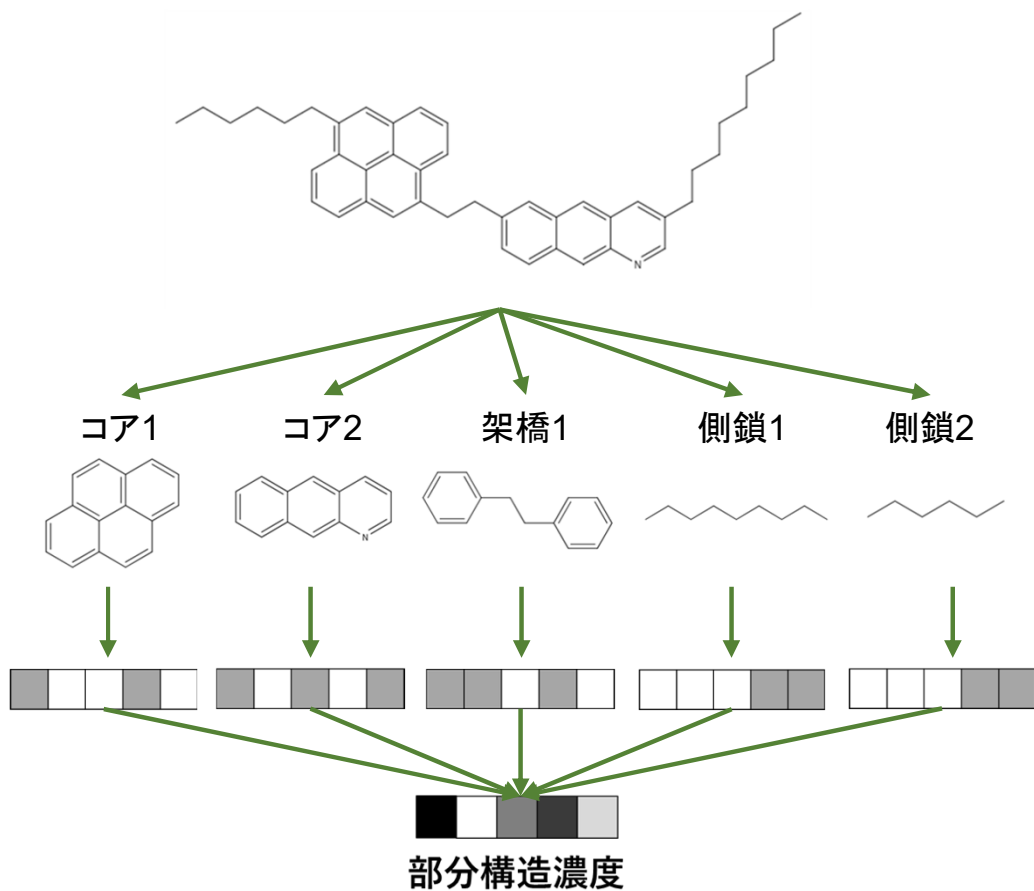
植物油を原料に用いたデータを含めて高い精度で予測が可能  
植物油由来の高いCO<sub>2</sub>収率にも対応

# FCC原料油 (VGO) の反応予測

## VGO組成をJACD形式で取得

Toyooka and Katada, *J. Jpn. Petrol. Inst.*, **68**, 1-9 (2025).

成分		コア		架橋		側鎖		濃度		
Molecular weight	Composition formula	ID								
617.921	C46H51N	006107	002001	000000	08C004	000000	05C006	08C003	000000	0.01 mol/kg <sub>feed</sub> 0.02 mol/kg <sub>feed</sub> × 10,000以上
615.905	C46H49N	021008	024001	000000	08C004	000000	05C006	08C002	000000	
615.905	C46H49N	003108	023000	000000	08C004	000000	05C006	000000	000000	



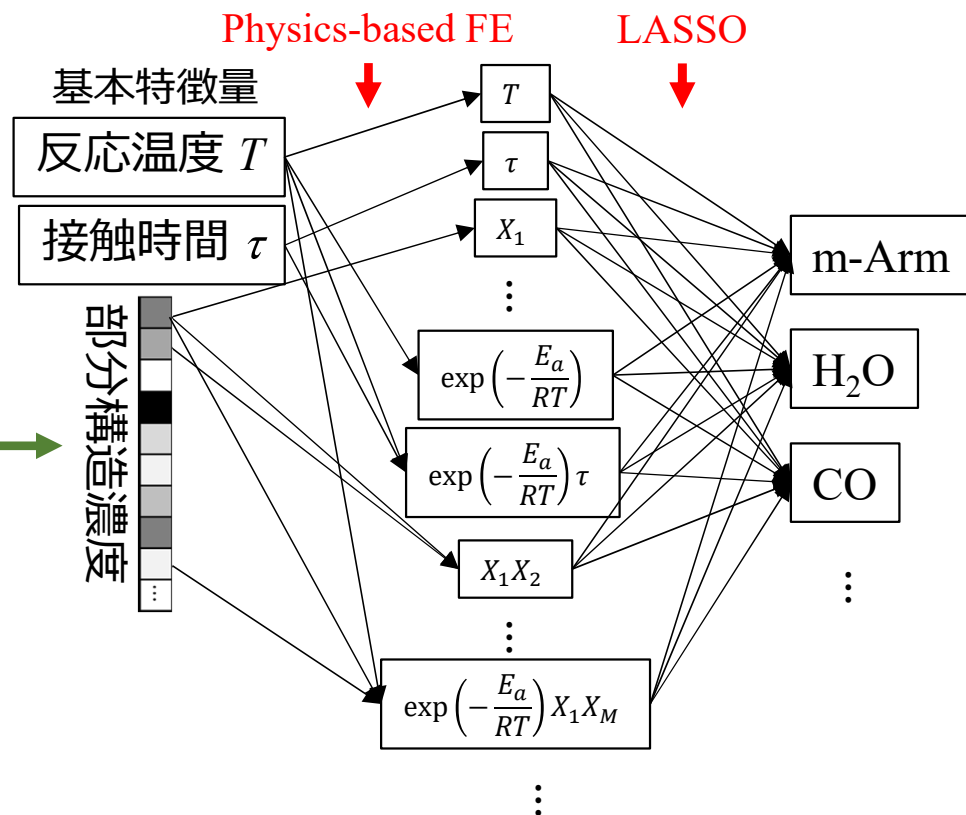
VGO I : 230構造  
VGO II : 250構造  
VGO III: 241構造

分子フィンガープリント  
(MACCS fingerprint)

原料1	1	0	0	1	0	0	0	0	1	...
原料2	0	1	0	1	1	0	0	1	0	...
⋮										
原料M	1	1	0	1	0	0	0	1	0	...

重み付け足し合わせ

部分構造濃度ベクトル



## 訓練データ

- モデル物質30種、植物油、廃食油(288点)
- VGO I(2点)
  - T=450°C、Cat/oil=4.5 g/g
  - T=550°C、Cat/oil=4.5 g/g

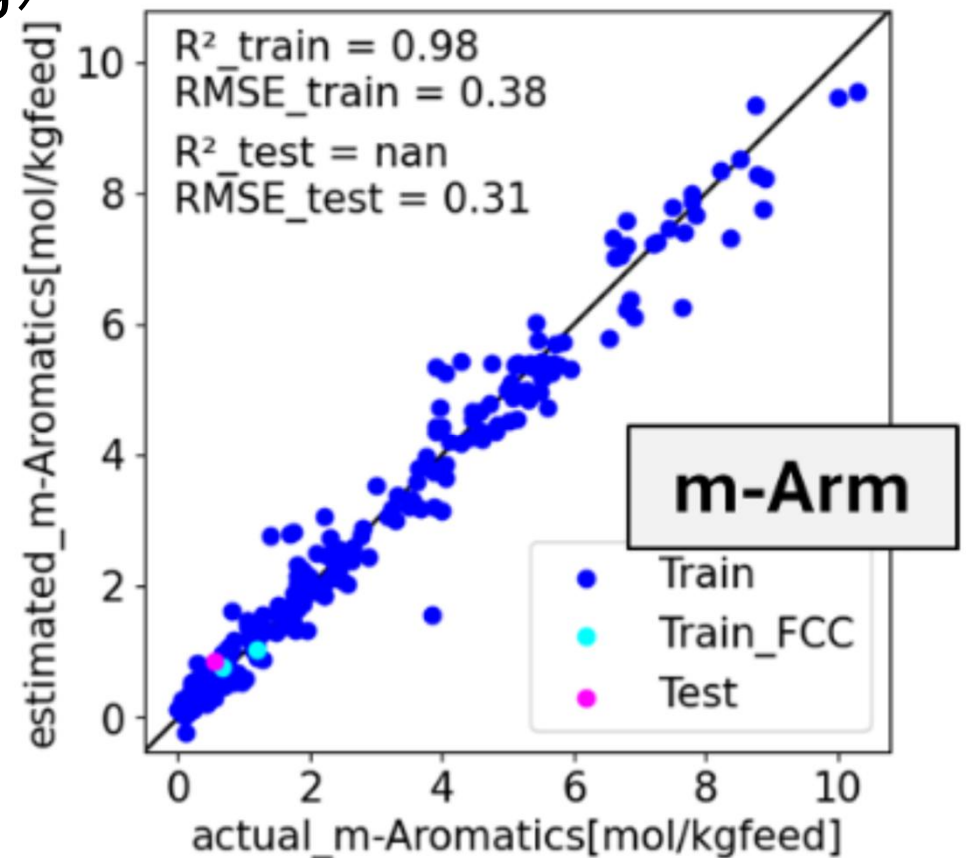


## テストデータ

- VGO I(T=500°C、Cat/oil=3.1 g/g)

FCC原料油の反応を学習することで  
他の条件での反応予測を達成

JACD形式で表現されたVGO組成の  
反応予測に適用可能



## 訓練データ

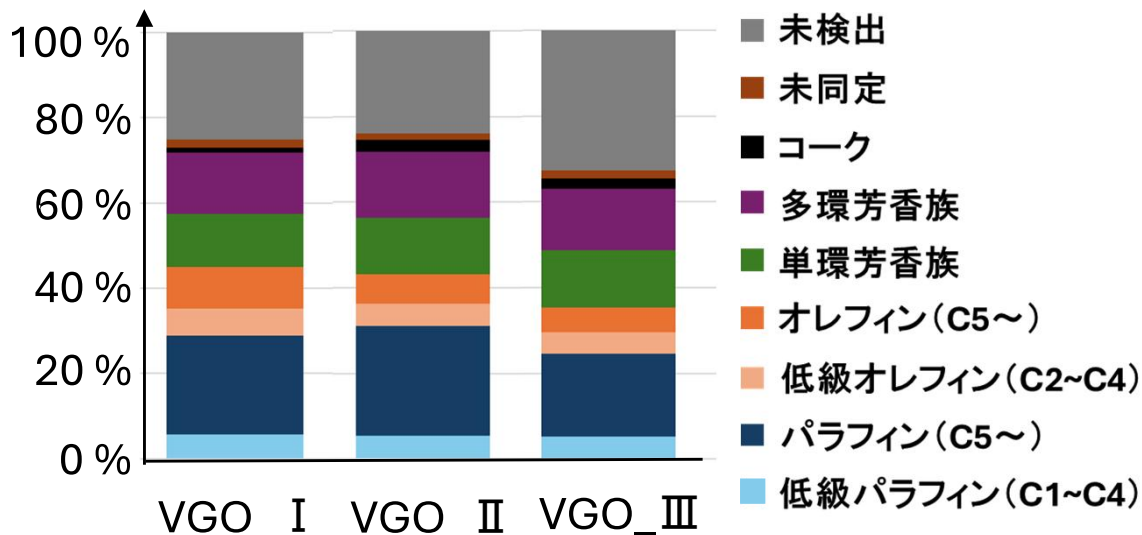
- モデル物質30種、植物油、廃食油(286点)
- VGO I(11点)



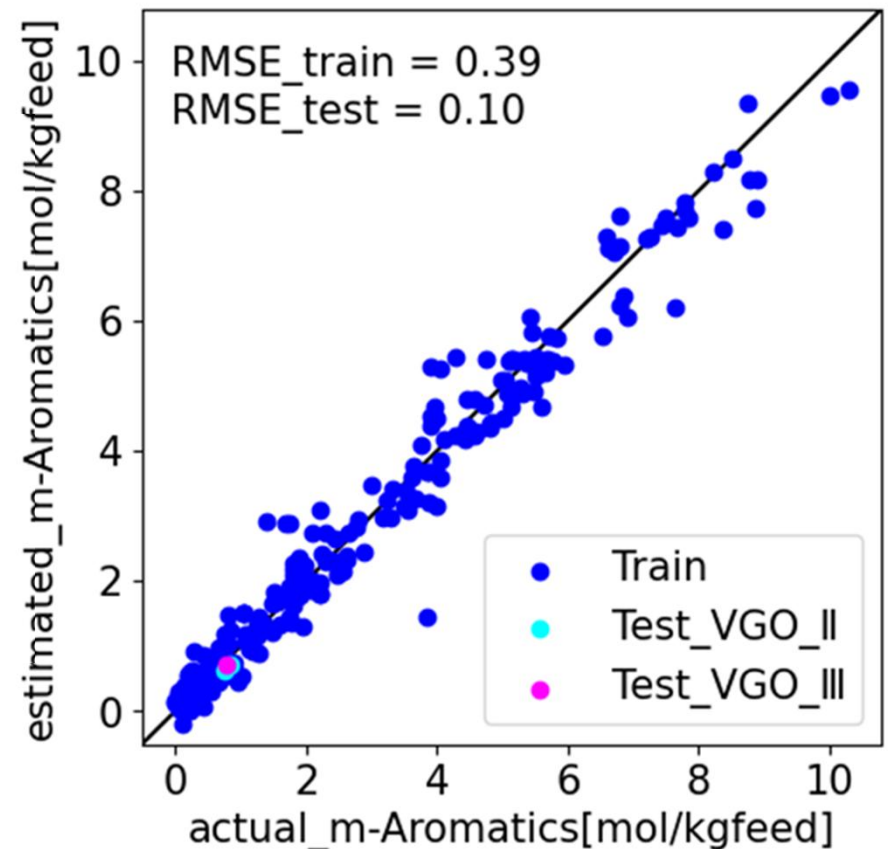
## テストデータ

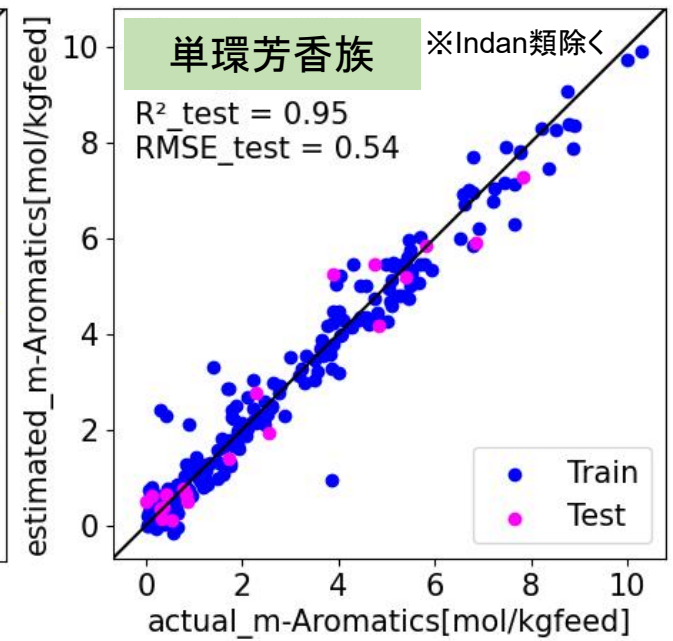
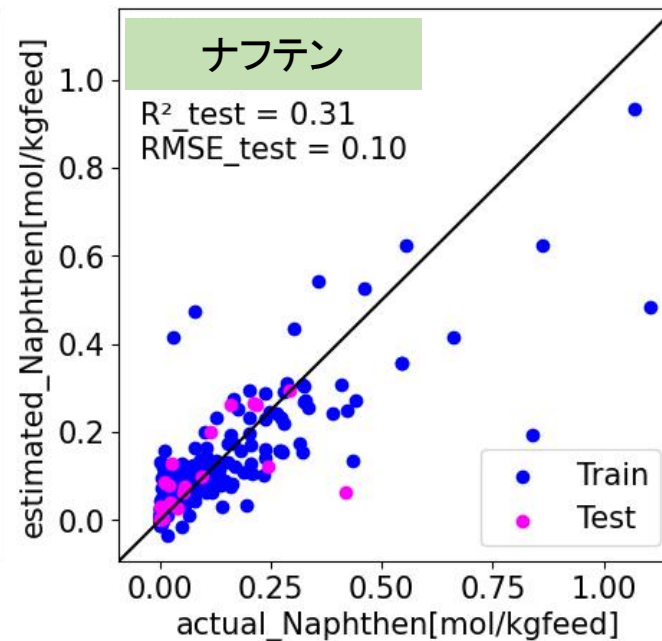
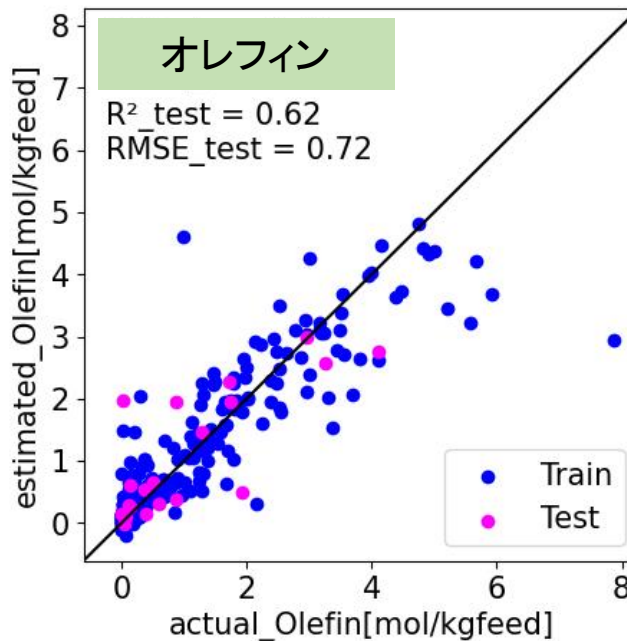
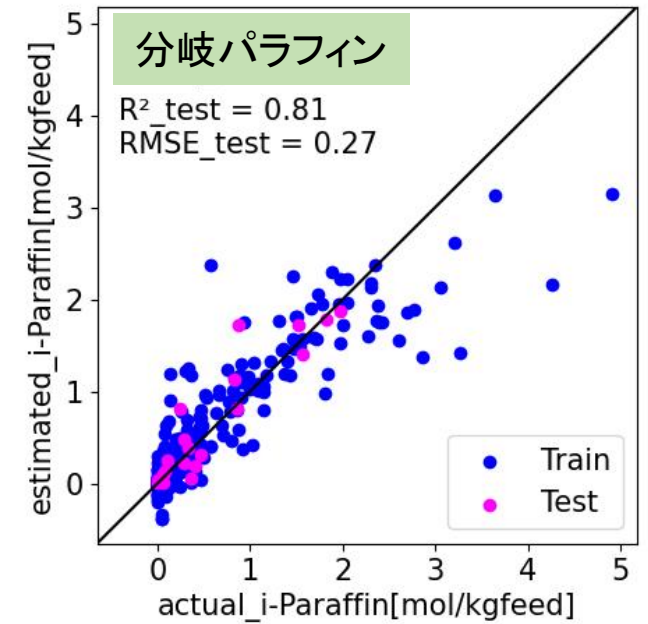
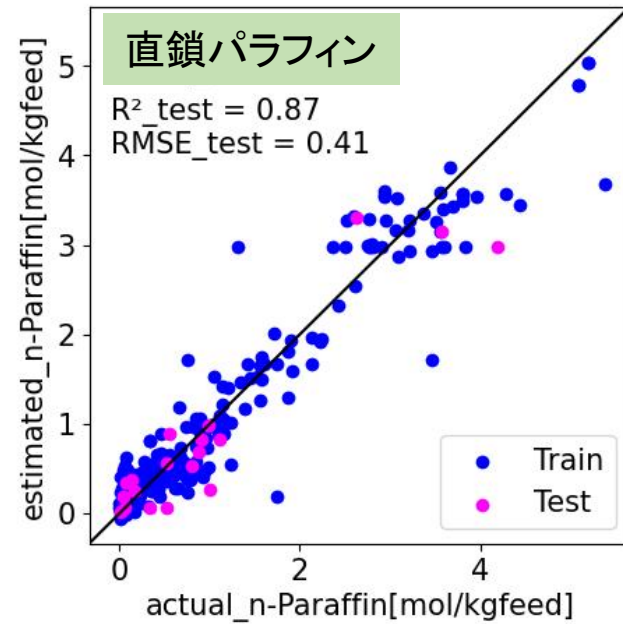
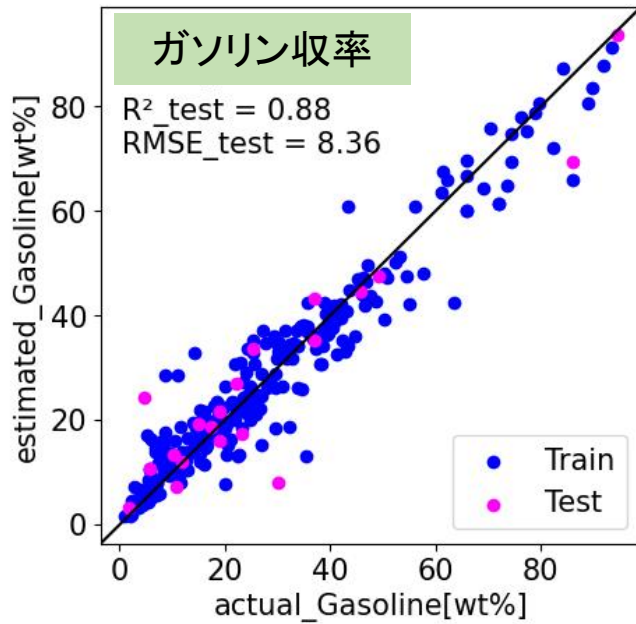
- VGO II(3点)
- VGO III(1点)

同条件での反応でのVGOによる生成物の違い



訓練に使用していない未知原料の  
反応予測(外挿的予測)も可能





- 様々な生成物の生成量の予測が可能
- 反応中間体(オレフィン類、ナフテン類)の予測精度向上が課題

## これまで構築してきたモデルの課題

- 1つの触媒に対して300点以上の実験データ
- 新たな触媒に対しては改めて数百点の実験が必要？



少数データから高精度のモデルを構築するため**転移学習**に着目

## 転移学習

既存データから得た知見を再利用  
→ 限られたデータでも予測精度を向上

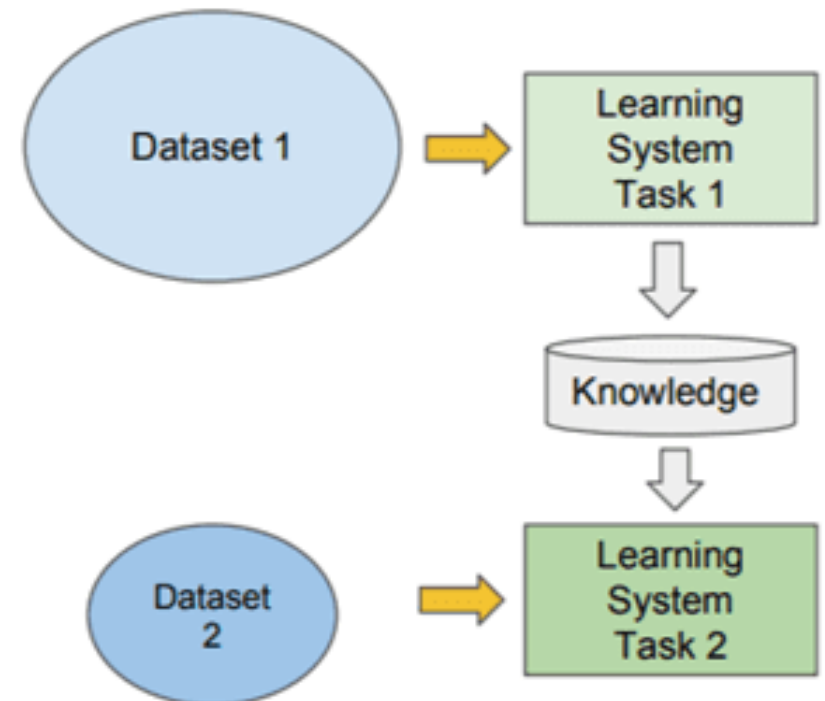
少数の新触媒での実験データ

+

大量に取得した旧触媒データから得た知識



新触媒での高精度予測モデル





## 基本特徴量

反応温度  $T$   
 接触時間  $\tau$   
 原料濃度  $X_1$   
 $X_2$   
 $X_3$   
 $X_4$   
 $X_5$   
 $X_6$



## 物理化学に基づく特徴量エンジニアリング

### 基本特徴量

反応温度  $T$   
 接触時間  $\tau$   
 原料濃度  $X_i$

### 濃度交差項 $X_i \cdot X_j$

### 反応速度項

1次反応  $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i$   
 2次反応  $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i \cdot X_j$

### 濃度変化項 (微分反応器モデル)

1次反応  $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i \cdot \tau$   
 2次反応  $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i \cdot X_j \cdot \tau$

### 濃度変化項 (積分反応器モデル)

1次反応  $X_i \cdot \exp(-k\tau)$  ( $k = A \exp(-E_a/RT)$ )  
 2次反応  $X_i^2 / (X_i + (k\tau)^{-1})$   
 $X_i X_j (1 - \exp((X_j - X_i)k\tau)) / (X_i - X_j \exp((X_j - X_i)k\tau))$

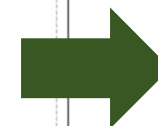
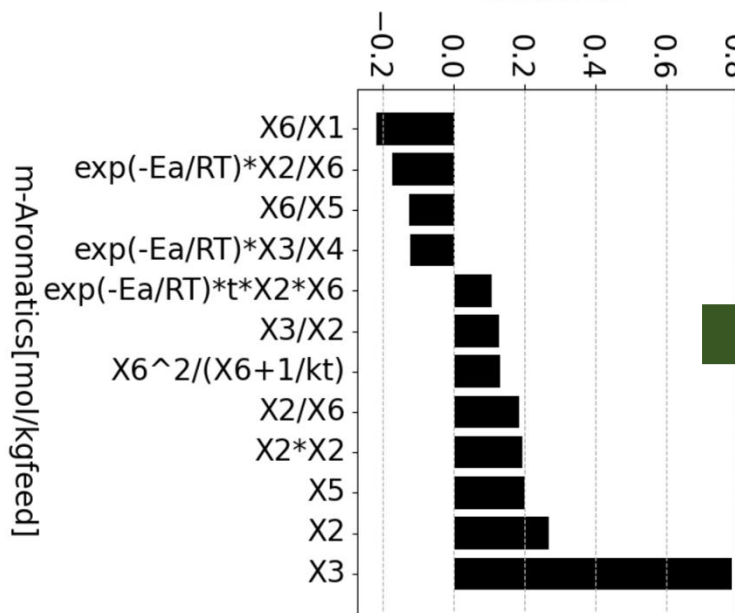
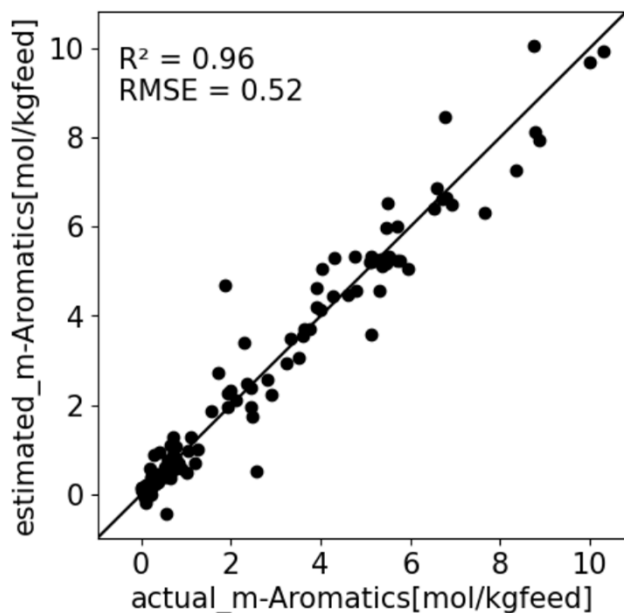
### 逐次反応項 $X_i / X_j$

$\exp(-E_a/RT) \cdot X_i / X_j$   
 $\exp(-E_a/RT) \cdot X_i / X_j \cdot \tau$

LASSO回帰

140点のデータを学習

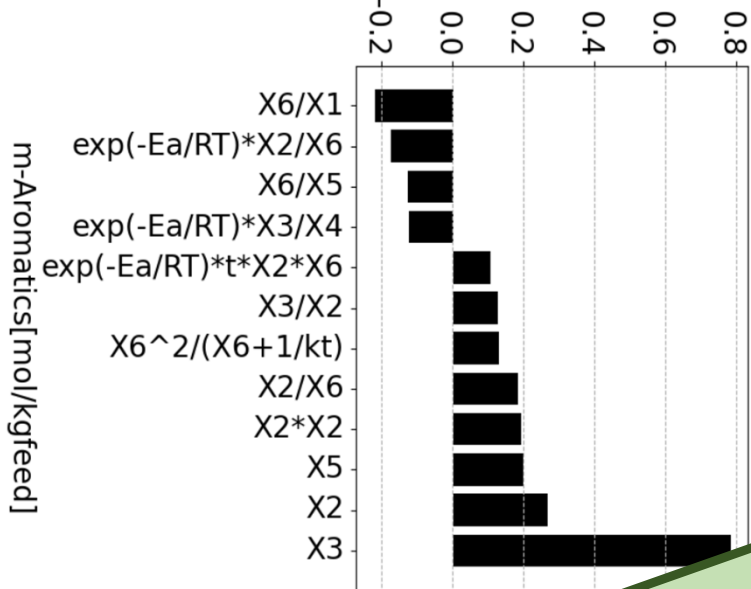
## 単環芳香族生成量



ソースモデル

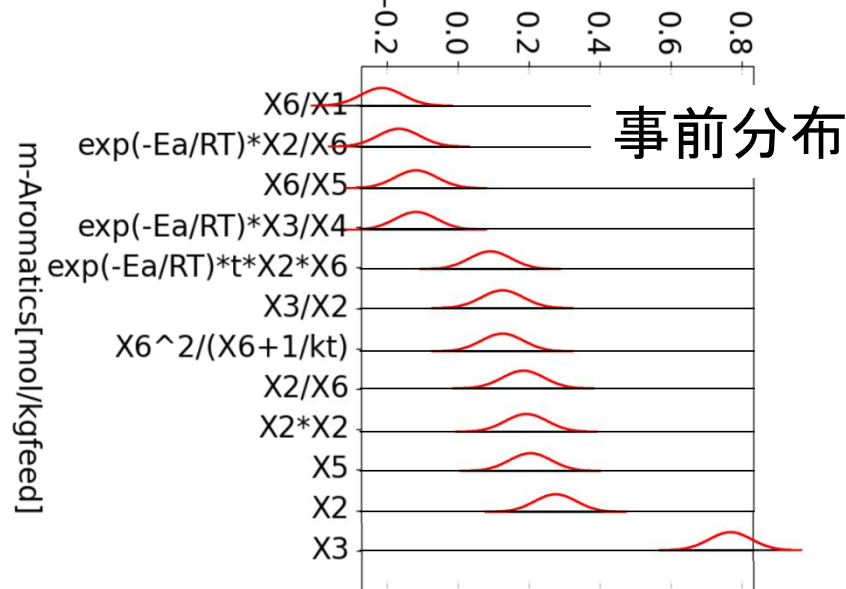
ソースモデル

coefficient



ターゲットモデル

coefficient



ソースとターゲットの類似性を仮定

$$p(\mathbf{w}_t) = \mathcal{N}(\mathbf{w}_s, \sigma^2)$$

$\mathbf{w}_s$  : ソースの標準回帰係数

$\mathbf{w}_t$  : ターゲットの標準回帰係数

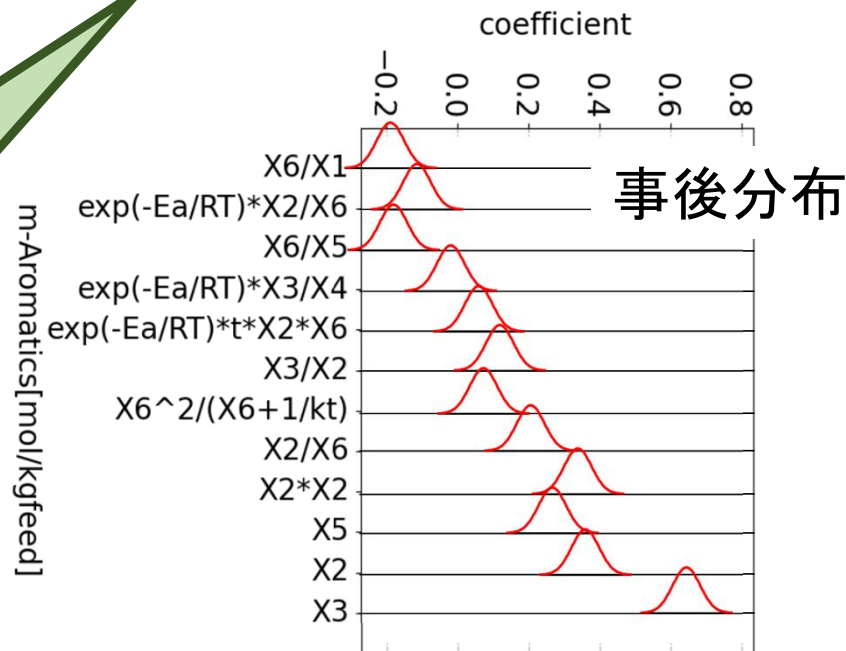
$\sigma$  : ハイパーパラメータ

ベイズ線形回帰

$$p(\mathbf{w}_t | \mathcal{D}_t) = \frac{p(\mathcal{D}_t | \mathbf{w}_t) p(\mathbf{w}_t)}{\int p(\mathcal{D}_t | \mathbf{w}_t) p(\mathbf{w}_t) d\mathbf{w}_t}$$

$\mathcal{D}_t$  : ターゲットデータ

Cat-Bのデータを学習

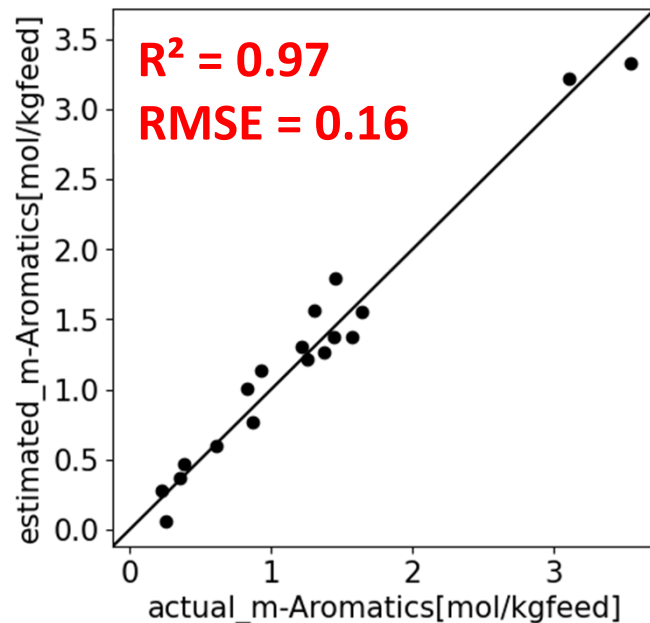


## 単環芳香族の生成量予測

ソースデータ140点  
ターゲットデータ17点



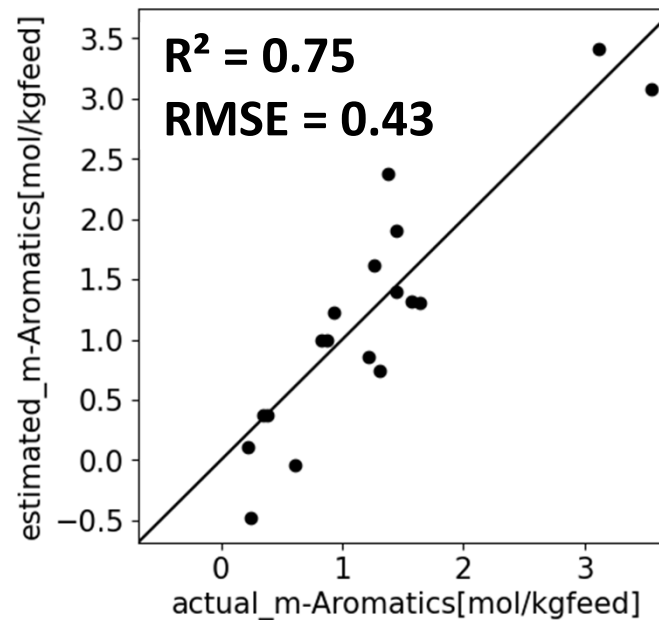
転移学習モデル



ターゲットデータ17点



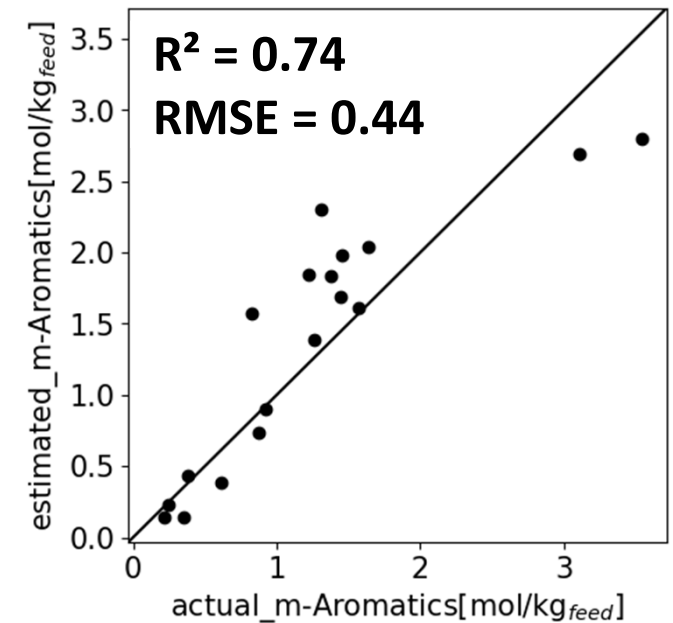
非転移学習モデル



ソースデータ140点



ソースモデル



転移学習を用いることで  
少数データから高精度な生成物組成予測モデルの構築が可能

重質油とバイオオイルの混合接触分解を対象として、機械学習を用いた反応生成物組成予測モデルの構築に取り組んだ。

- JACDによって組成が表現されたVGO原料の反応予測を可能とするため、コア・架橋・側鎖の構造から原料中の部分構造濃度を算出できるようにした。結果として、訓練データの作成に用いたVGOの反応予測だけでなく訓練に使用していない未知原料の反応予測もできることを確かめた。
- これまで我々が取り組んできた単環芳香族生成量予測のみならず、他の生成物の収率も予測できることを確かめた。
- 触媒変更時に少数データから生成物組成予測モデルを構築するため、ベイズ線形回帰を用いた転移学習に着目してその導入効果を調査した。結果として、旧触媒上での実験データから構築されたソースモデルの知識を転移することで、新触媒上での少数の実験データから高精度な生成物組成予測モデルが構築できる可能性を確かめた。

## **謝辞**

**本研究は経済産業省の補助により  
(一財)カーボンニュートラル燃料技術センターが  
実施する技術開発事業の一環として  
行われたものです。**

**ここに記し謝意を表します。**