

## 要 求 仕 様 書

### 1. 概要

本書は令和6年度「石油供給構造高度化事業費補助金（次世代燃料安定供給のためのトランジション促進事業）／製油所の脱炭素化研究開発事業」における、原油・原料油データベース（DB）システムで使用する「原油の成分情報・物性予測 AI アプリケーションの製作（残油留分モデル）」について定めたものである。

製油所の脱炭素化研究開発事業では、常圧蒸留装置（CDU）の最適化制御を高度化するため、CDU で処理する原油および各留分の一般性状・組成と成分情報をリアルタイムで予測する AI モデルの開発を行っている。

これまでに、当センターで原油の FT-IR・透過法スペクトルから原油および留分の成分情報を予測する AI モデルを開発したが、この成果を AI 技術の専門家以外でも容易に利用出来るよう、開発した AI モデルを組み込んだ Excel 形式のアプリケーションを製作するものである。あわせて、成分情報を基にした物性予測 AI アプリケーションを製作する。

### 2. 仕様

#### (1) アプリケーション

- アプリケーションは下記①②で構成される。
  - ① 成分情報予測 AI アプリケーションの製作（学習モデル部、未知原油 X 予測部）
  - ② 物性予測 AI アプリケーションの製作
- 今回のアプリケーション開発範囲は、原油の残油（AR）留分モデル 250 とする。
- 将来、残油留分以外のナフサ留分等が追加された場合にも対応可能な仕様とすること

#### (2) 成分情報予測 AI アプリケーションの製作

##### 1) アプリケーション実行環境の構築

- Python によって作成された成分情報予測 AI モデル（後述する教師学習モデル、予測モデルのプログラムファイル）が実行可能な環境を当センターが指定するノートパソコン上に構築すること  
なお、Python プログラムの実行環境は Anaconda3、あるいは同等性能を有する別のプログラムとすること
- ノートパソコンのスペックは以下のとおり
  - OS : Windows 10 Pro64bit 日本語
  - CPU : Intel Core i7-1165G7、メモリ : 16GB
  - HDD : SSD 512GB

その他：Office 2021 インストール済み

- ▶ ノートパソコンはスタンドアロン形式のオフライン環境を想定

※必要に応じて、当センター開発の別の予測 AI アプリケーションを開示する。実行環境が転用できるのであれば、上記仕様は削除でも構わない。

## 2) 教師データあり学習モデルの構築 (図 1)

- ▶ 当センターが提供する 50 原油以上の教師データ (透過法による FT-IR スペクトル、残油留分の成分情報データ)、および添付資料 1 に示す回帰分析手法から当センターが指定した手法を用いて、説明変数を原油の FT-IR スペクトル 15,000 データ、目的変数を残油留分の成分情報 250 とする学習モデルを構築すること
- ▶ 将来、教師データを拡張 and/or 回帰分析手法を添付資料 1 に記載した他の手法に変更した場合にも対応できる仕様とすること
- ▶ 学習モデルは Python によって作成すること

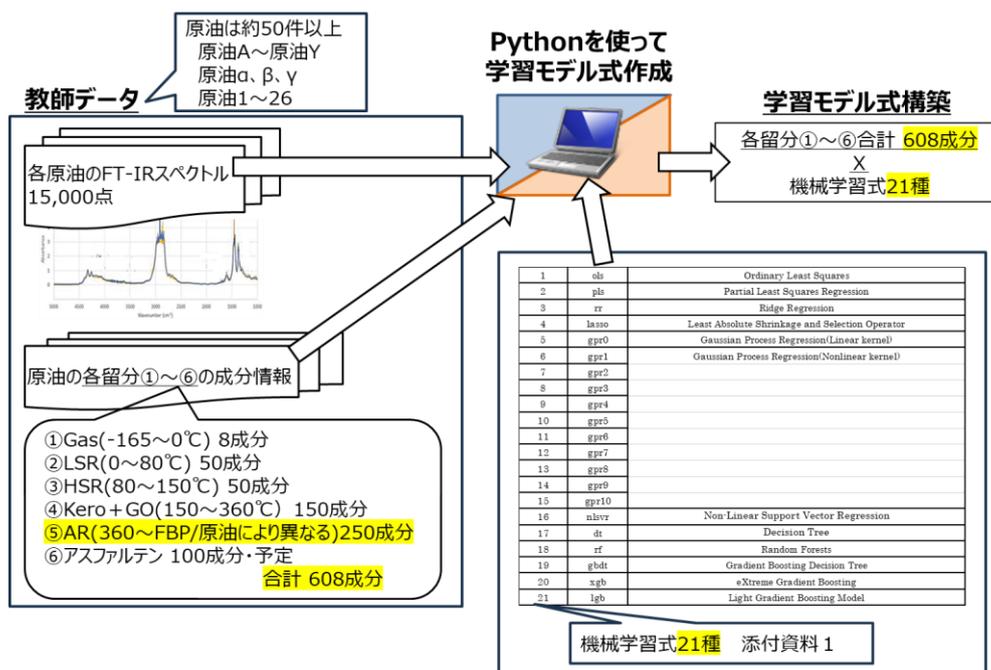


図 1 教師データあり学習モデルの構築

## 3) 2) で作成した学習モデルを用いた未知原油 X 予測部の構築 (図 2)

- ▶ 添付資料 2 に記載した未知原油 X (教師データ未使用) の説明変数 (透過法による FT-IR スペクトル) から、未知原油 X 留分の一般性状・組成を予測するアプリケーションソフトを製作すること
- ▶ アプリケーションソフトは Excel 形式とし、Office2021 バージョンの Excel で動作すること

- アプリケーションソフトは、説明変数データが入力された Excel シートから説明変数を読み込み、バックグラウンド上で2)で作成した学習モデルを用いて残油留分の成分情報 250 を計算し、結果を Excel シートに出力すること
- アプリケーションソフトは、計算結果が出力された Excel ファイルを指定のフォルダーに自動保存出来る仕様とすること  
 なお、Excel ファイルの名称は、日付 + 時間 + PC ユーザー名（例：202312021730UserName）等とすること
- 将来、説明変数が追加または削減された場合にも対応可能な仕様とすること  
 （例）使用する FT-IR スペクトルデータ (15,000) の削減  
 原油の一般性状データ（密度、硫黄分、残炭など）の説明変数への追加

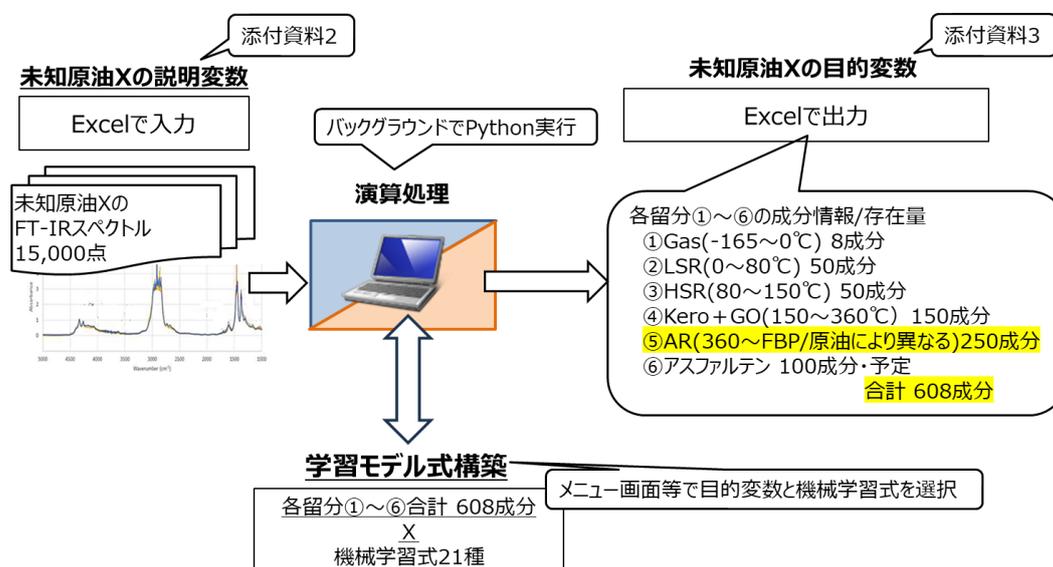


図 2 未知原油 X 予測部 (イメージ)

(3) 物性予測 AI アプリケーションの製作 (図 3)

- (2) 2)の成分情報または、当センターFT-ICR MS 装置から得られる 10 万成分上の実測データを取り込み、後述する物性値を予想する AI アプリケーションを製作すること



② 「一般性状推算シート」の作成

- 既設物性計算 Excel は、「一般性状推算シート」と読み替えるものとする。

<入力部の製作>

- 1)の Input 情報は、図 5 の一般性状推算シート・入力部に表示させること
- 現行 25 万行に対し、Excel で可能な最大行数 100 万行まで拡張させること

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
	C	H	N	O	S	分子式	コア1	コア2	コア3	架構1	架構2	倒壊1	倒壊2	倒壊3	JCAD	x1 [mol]
1	[-]	[-]	[-]	[-]	[-]											
2	28	43	1	1	0	C28H43NO	001013	001001	000000	0BC004	000000	0SC005	000000	000000	0010130010010000000BC0040000000SC0050000000000000	0.00
3	29	45	1	1	0	C29H45NO	001013	001001	000000	0BC004	000000	0SC006	000000	000000	0010130010010000000BC0040000000SC0060000000000000	0.00
4	30	47	1	1	0	C30H47NO	001013	001001	000000	0BC004	000000	0SC006	0SC001	000000	0010130010010000000BC0040000000SC0060SC001000000	0.00

注) 紺色箇所は既設の入力部

図 5 一般性状推算シート・入力部 (イメージ)

<演算部の製作>

- 当センターが開発した一般性状推算シート・演算部は図 6 に記載の現状 23 項目であること
- 現行 25 万行に対し、Excel で可能な最大行数 100 万行まで拡張させること
- すべての Excel セルに複雑な計算式が組みこまれているため、Excel 計算方法・制御方法等を改善させること。方法の指定は無いが、Excel VBA、C 言語等が好ましい。
- 今後、23 項目物性式の改良および 23 項目以外への拡張が可能な仕様すること

無かった事に...					温度 [°C]										密度 ρ [kg/m <sup>3</sup> ]		比熱 Cp [J/mol/K]		比熱 Cv [J/kg/K]		粘度 μ [mPa·s]		熱伝導 λ [W/m/K]		表面張力 σ [mN/m]		蒸気圧 P <sup>s</sup> [kPa]		
C	H	N	O	S	x1 [mol]	vi [vol/vol]	wi [wt/wt]	xi [mol/mol]	DBE [-]	(DBE+S)/N/(O+S+N) [-]	Mw	Tb (元素組成) [K]	Tc (元素組成) [K]	Pc (Tb,Tc相関) [kPa]	ω [-]	DBE+1+S+2N/C+S+N	T/Tc (Tr)	ρ [kg/m <sup>3</sup> ]	1/ρ	λ [W/m/K]	λ <sup>-2</sup>	μb	μc	μ [mPa·s]	ln(μ)	Cp [J/mol/K]	Cv [J/mol/K]	σ [mN/m]	P <sup>s</sup> [kPa]
3	8	0	0	0	0.00	1.0E-3	1.4E-3	8.4E-3	0	0.00	44	133	352	189206	-0.12	0.00	0.85	530	0.0019	0.079	160.511	3.058	0.256	0.33	-1.104	107	5.08	6.91E+04	
4	10	0	0	0	0.00	1.2E-3	1.8E-3	8.4E-3	0	0.00	58	205	413	22544	-0.01	0.00	0.72	612	0.0016	0.097	109.246	0.791	0.148	0.26	-1.277	137	10.81	2.88E+03	
5	12	0	0	0	0.00	1.3E-4	2.2E-4	8.2E-4	0	0.00	72	291	491	3051	0.08	0.00	0.65	637	0.0015	0.108	83.904	0.462	0.119	0.32	-1.155	198	14.64	3.17E+02	
6	14	0	0	0	0.00	1.5E-3	2.7E-3	8.4E-3	0	0.00	86	307	500	5325	0.16	0.00	0.60	686	0.0015	0.115	75.374	0.344	0.104	0.38	-0.976	198	17.33	7.27E+01	
7	16	0	0	0	0.00	6.4E-3	1.2E-2	2.4E-2	0	0.00	100	347	534	3747	0.24	0.00	0.56	707	0.0014	0.121	68.788	0.285	0.095	0.46	-0.762	228	19.31	1.88E+01	
8	18	0	0	0	0.00	1.6E-2	3.0E-2	3.3E-2	0	0.00	114	381	563	2911	0.31	0.00	0.53	723	0.0014	0.125	64.270	0.250	0.089	0.56	-0.566	237	20.80	4.38E+00	
9	20	0	0	0	0.00	1.8E-2	3.3E-2	3.6E-2	0	0.00	128	411	588	2404	0.37	0.00	0.51	735	0.0014	0.128	60.961	0.226	0.084	0.68	-0.390	287	21.85	1.17E+00	

注) 右側 6 列 (紺色箇所) は既設の入力部

図 6 一般性状推算シート・演算部の 23 項目 (既設)

(4) 取扱い説明書

- (1) (2) (3)の利用方法について記載した取扱い説明書を作成し、説明を行うこと

3. 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 (2 階)

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

#### 4. 納期

2024年12月28日まで

#### 5. 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

#### 6. 提出書類および記載事項

- (1) アプリケーションの開発費用
- (2) アプリケーションの取り扱い説明費用
- (3) 上記5の作業にかかる全ての費用（設置費用等も含めること）

#### 7. 一般事項

##### 7. 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。

##### 7. 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
    - ・アプリケーション仕様書
    - ・アプリケーション操作マニュアル
    - ・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、さらに当センターの検収を受けなければならない。

## 7. 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。

## 7. 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

学習モデル作成で使用する回帰手法

No	略称	名称
1	ols	Ordinary Least Squares
2	pls	Partial Least Squares Regression
3	rr	Ridge Regression
4	lasso	Least Absolute Shrinkage and Selection Operator
5	gpr0	Gaussian Process Regression(Linear kernel)
6	gpr1	Gaussian Process Regression(Nonlinear kernel)
7	gpr2	
8	gpr3	
9	gpr4	
10	gpr5	
11	gpr6	
12	gpr7	
13	gpr8	
14	gpr9	
15	gpr10	
16	nlsvr	Non-Linear Support Vector Regression
17	dt	Decision Tree
18	rf	Random Forests
19	gbdt	Gradient Boosting Decision Tree
20	xgb	eXtreme Gradient Boosting
21	lgb	Light Gradient Boosting Model

未知原油Xの予測で使用する説明変数の入力データ詳細

## &lt;FTデータパラメータ&gt;

最小周波数	最大周波数	周波数間隔
349.5346	7800.1665	0.4824

## &lt;原油一般性状&gt;

一般性状項目	値
CrudeIBP (°C)	※今回は未使用
CrudeFBP (°C)	※今回は未使用
CrudeGravity (API)	※今回は未使用
CrudeViscosity (cSt at 30°C)	※今回は未使用
CrudeViscosity (cSt at 50°C)	※今回は未使用
CrudeSulfur Content (% Wt.)	※今回は未使用
CrudeCCR (% Wt.)	※今回は未使用

未知原油Xの予測で使用する目的変数出力イメージ

添付資料3

No	JACD Ramp Tag	Core/Saturate	HC/S/その他	環数			側鎖数範囲		JACDデータ														モル分率(補正後)															
				合計	アロ マ環	ナフ テン	Min	Max	C	H	N	O	S	分子式	コア1	コア2	コア3	架橋1	架橋2	側鎖1	側鎖2	側鎖3		JACD														
				1	Newmonoadd2_HC_1Ar_5_9	Single Core	HCのみ	1	1	0	5	9	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000		000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000
2	Newmonoadd2_HC_1Ar_10_14	Single Core	HCのみ	1	1	0	10	14	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460	
3	Newmonoadd2_HC_1Ar_15_19	Single Core	HCのみ	1	1	0	15	19	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460
4	Newmonoadd2_HC_1Ar_20_24	Single Core	HCのみ	1	1	0	20	24	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460
5	Newmonoadd2_HC_1Ar_25_29	Single Core	HCのみ	1	1	0	25	29	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460
6	Newmonoadd2_HC_1Ar_30_39	Single Core	HCのみ	1	1	0	30	39	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460
7	Newmonoadd2_HC_1Ar_40_49	Single Core	HCのみ	1	1	0	40	49	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460
8	Newmonoadd2_HC_1Ar_50_	Single Core	HCのみ	1	1	0	50	150	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460
9	Newmonoadd2_HC_1Np_5_9	Single Core	HCのみ	1	0	1	5	9	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460	
10	Newmonoadd2_HC_1Np_10_14	Single Core	HCのみ	1	0	1	10	14	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460	
11	Newmonoadd2_HC_1Np_15_19	Single Core	HCのみ	1	0	1	15	19	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460	
12	Newmonoadd2_HC_1Np_20_24	Single Core	HCのみ	1	0	1	20	24	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460	
13	Newmonoadd2_HC_1Np_25_29	Single Core	HCのみ	1	0	1	25	29	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460	
246	C69	Saturate	HCのみ	0	/	/	69	/	69	140	0	0	0	C69H140	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002460		
247	C70	Saturate	HCのみ	0	/	/	70	/	70	142	0	0	0	C70H142	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000002152		
248	C71	Saturate	HCのみ	0	/	/	71	/	71	144	0	0	0	C71H144	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000000900		
249	C72	Saturate	HCのみ	0	/	/	72	/	72	146	0	0	0	C72H146	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000000900		
250	C73	Saturate	HCのみ	0	/	/	73	/	73	148	0	0	0	C73H148	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	000000	0.000000900		

未知原油の  
目的変数