

2020年度 JPECフォーラム

＜セッション5＞

プロセス技術関連（高効率石油精製研究開発）

セッション概要

2020年5月8日

ペトロリオミクス研究室

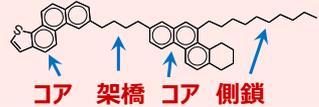
ペトロリオミクス技術開発の歩み

基礎研究から
活用ステージへ

基本モデル構築

重質油成分の同定技術

FT-ICR MSを核に分子の構造・組成を解明
構造属性に基づく
分子構造表記

コア 架橋 コア 側鎖

重質油プロセスの反応解析基盤技術

分子の反応挙動を
解析・モデル化



アスファルテン凝集挙動解析技術

アスファルテン凝集
析出をモデル化



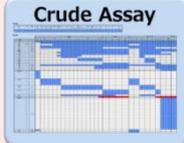
海外調査

重質油等高度対応
処理技術開発事業

基本モデルの実証と 実用モデル化

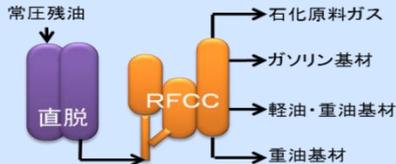
非在来型原油成分分析技術

超重質原油の評価

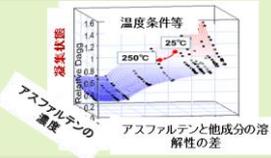
RDS/RFCCの全体最適化

RFCC原料の
最適供給



アスファルテン凝集制御技術

原油スラッジの発生
抑制等の現場課題
解決に貢献

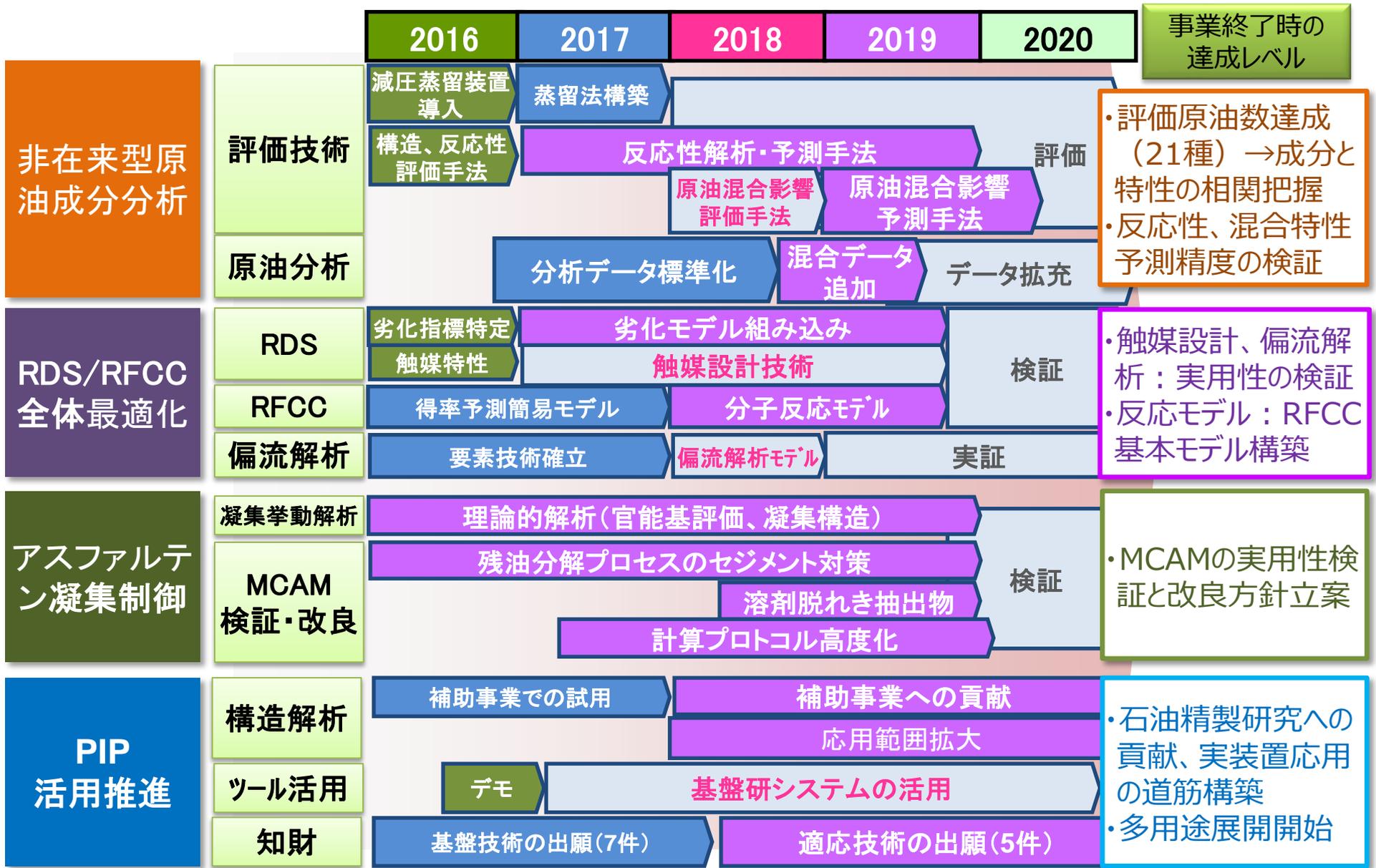


ペトロリオミクス技術活用推進

技術セミナーの実施、各種ツールの活用促進

高効率石油精製
研究開発事業

委託事業の全体計画



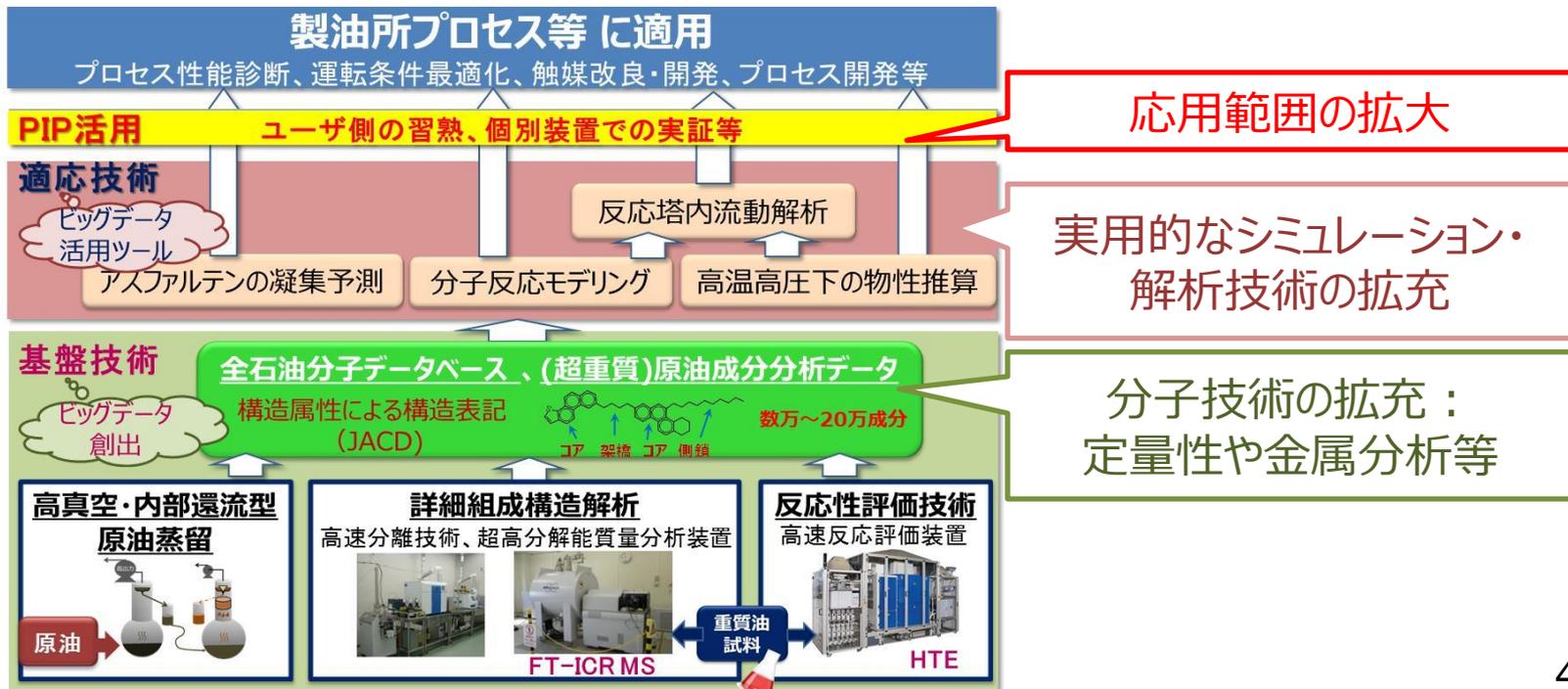
2019年度の研究方針

2018年度 「ペトロデータを使いこなす」

- ・分子構造情報やシミュレーション結果の解釈方法を示す。
- ・各種ツール（基盤技術、適応技術）の検証・精度向上

2019年度 「ペトロを広げよう」

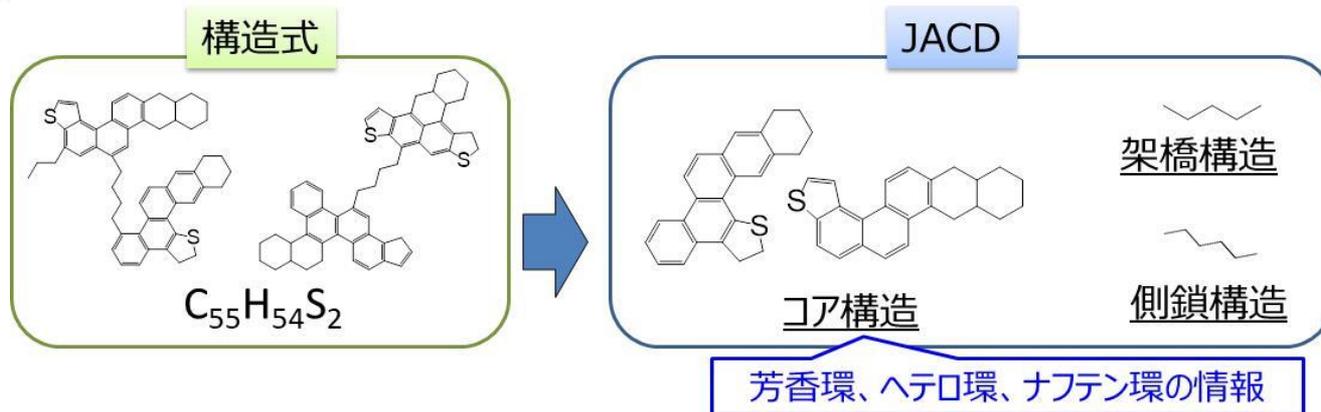
- ・分析技術の**拡充**：定量性や金属分析等
- ・実用的なシミュレーション・解析技術の**拡充**：ComCat、反応モデル、MCAM、統計解析等
- ・応用範囲の**拡大**（補助事業→石油会社、エンジ、触媒メーカー、備蓄、石油開発）



JACD (Juxtaposed Attributes for Chemical-structure Description)

- 分子を構造属性の組合せで表す分子記述式（新規化学式）
- 結合位置の異なる多数の異性体は区別しない（化学構造属性並列表記法）

⇒ 構造情報(構造属性の組み合わせ)を反応解析や物性推算へ活用

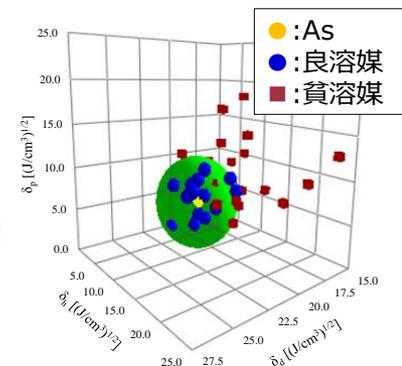
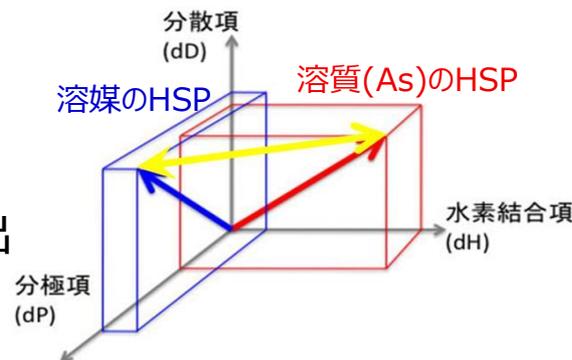


Molecular formula	JACD ID							Mol. fraction	
	Core 1	Core 2	Core 3	Bridge 1	Bridge 2	Side Chain 1	Side Chain 2	Side Chain 3	
C19H36	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	30000000	000000	000000	0.0000000115
C20H38	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	40000000	000000	000000	0.0000000156
C21H40	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	50000000	000000	000000	0.0000000258
C22H42	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60000000	000000	000000	0.0000000306
C23H44	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60SC00	100000	000000	0.0000000447
C24H46	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60SC00	200000	000000	0.0000000550
C25H48	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60SC00	300000	000000	0.0000000620
C26H50	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60SC00	400000	000000	0.0000000797
C27H52	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60SC00	500000	000000	0.0000001111
C28H54	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60SC00	600000	000000	0.0000001060
C29H56	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60SC00	60SC00	100000	0.0000001204
C30H58	00100000	10000000	000BC00	40000000	00SC00	60SC00	60SC00	200000	0.0000001528

ハンセン溶解度パラメータ(HSP)による凝集/緩和挙動の定量・定式化

基本的な考え方

- 分子構造からHSP(3次元ベクトル)を算出
(原子団寄与法による算出)
- HSPの差が小さいと溶解、大きいと凝集/析出



多成分系凝集モデル (MCAM*) *Multi-Component Aggregation Model

インプット

- 重質油 (+溶剤) の分子組成
- 全分子の融点、HSP
- 温度

MCAM

アウトプット

- 液相(溶解)の量、分子組成
- 凝集相の量、分子組成、凝集度
- 固相(析出)の量、分子組成

分子レベルで溶解、凝集、析出挙動が評価可能なモデル
 ファウリング、コーキング、スラッジ生成、抽出プロセスの解析に適応可能

1. 重質油の構造情報（JACD）を反応解析に適用した成果
 - 【16】RDS/RFCC全体最適化技術開発（RFCC得率予測モデル）
 - 【17】RDS/RFCC全体最適化技術開発（RDS触媒設計技術）

2. 残油処理プロセスの抽出油やセジメント析出物の予測にMCAMを応用した成果
 - 【18】アスファルテン凝集制御技術開発

3. 重質油反応解析とMCAM技術の双方を適用した成果
 - 【15】非在来型原油成分分析技術開発
（反応性予測技術、混合特性評価技術）