2020年度 JPECフォーラム

アスファルテン凝集制御技術開発

2020年5月8日

ペトロリオミクス研究室



ー禁無断転載・複製 ©JPEC 2020-





1. 背景と目的

2.2019年度成果 2.1 MCAM検証 新物性推算システム 減圧残油溶剤脱れき装置の抽出物予測 減圧残油水素化分解装置のセジメント析出予測

2.2 凝集挙動解析(共同研究)

3. まとめ





アスファルテン(As)は凝集しやすく、その凝集・析出を適切に制御することは、 石油産業にとって重要な課題



Asの凝集挙動は非常に複雑であり、定量的・汎用的な予測技術は存在しなかった ⇒HSP(ハンセン溶解度パラメータ)を元にした多成分の凝集モデル(MCAM*)を 開発 *Multi-Component Aggregation Model

MCAMについて



多成分系の凝集モデル (MCAM)

…系内の分子を、液相/凝集相/固相に分類するモデル

基本コンセプト

詳細組成構造解析により得られた全組成・構造から、融点とHSP値を推算して計算に使用
 各成分の溶解/凝集/析出の判定は、凝集度(DAgg)に従い決定

DAgg=f(液相のHSP値と対象分子のHSP値の差、濃度、温度)

①温度≧融点の場合、溶媒とし、液相として存在するものとする
 ②温度<融点の場合、溶質とし、HSP値から溶解と判断されたものを液相に追加
 ③凝集相は凝集体として液相中に分散、固相は析出・沈殿と判定







①重質油を構成する超多成分系の溶解・凝集・析出理論を体系的に整理 ②MCAMシミュレーションをアスファルテン凝集の課題解決に活用可能なツールとして確立







- 1. 背景と目的
- 2.2019年度成果
 2.1 MCAM検証
 新物性推算システム
 減圧残油溶剤脱れき装置の抽出物予測
 減圧残油水素化分解装置のセジメント析出予測
 - 2.2 凝集挙動解析(共同研究)
- 3. まとめ



MCAM計算には、系内のすべての分子の融点とHSPのデータが必要で あるが、すべての分子の物性値データはなかった ⇒新物性推算システムにて全分子の物性値を入手



従来は物性値のない分子を排除してMCAM計算していたが、新物性推 算システムによって排除していた分子に物性値を与えてMCAM再計算し た際の効果を検証

MCAM検証: VR溶剤脱れきプロセスの抽出油予測



MCAM検証:新物性推算システムでの検証





新物性推算システムにて実測値をほぼ再現

MCAM検証:原料油違いでの検証(新物性推算システム)





抽出条件変更時の抽出率の増減の方向性はあっているが、 絶対値には相違がある →VR-4のMCAM抽出油と実測との違いを比較検証

MCAM検証: MCAM抽出油と実測との相違検証

⇒2020年度に原因と対策を検討









- 1. 背景と目的
- 2.2019年度成果
 2.1 MCAM検証
 新物性推算システム
 減圧残油溶剤脱れき装置の抽出物予測
 減圧残油水素化分解装置のセジメント析出予測
 - 2.2 凝集挙動解析(共同研究)
- 3. まとめ

MCAM検証: VR水素化分解装置でのセジメント析出予測





減圧残油水素化分解装置のセジメント析出予測における実機VRのセジメント 試験値との対比



新物性推算システムによるMCAM計算の対象分子数増加により、セジメント試験とMCAM計算値の相関性が改善した





- 1. 背景と目的
- 2.2019年度成果
 2.1 MCAM検証
 新物性推算システム
 減圧残油溶剤脱れき装置の抽出物予測
 減圧残油水素化分解装置のセジメント析出予測
 - 2.2 凝集挙動解析(共同研究)
- 3. まとめ

共同研究における担当分野

- ①代表分子構造の決定(極性成分): 産総研、関大、JPEC
 ②凝集構造の視覚化: 東大、千葉大、産総研
- ③凝集度およびD_{agg}の物理的意味の明確化:産総研、JPEC
- ④分子構造タイプによる凝集挙動の差異明確化:千葉大、北大、

産総研

- ⑤液相/凝集相/固相の定量化:北大、JPEC
 - ※)次ページ以降に②と④の成果を紹介





アスファルテンの原子分解能TEMによる観察

50 mg/L

500 mg/L



アスファルテンの凝集状態を原子分解能TEMにて観察。層状に凝集 した約3nmの粒子が観察できた(小角X線散乱にて同一サンプルの 凝集体の慣性半径とほぼ同等の大きさ) ④分子構造タイプによる凝集挙動の差異明確化

なる微小な一次粒子が影響していると示唆される



小角/極小角散乱の温度依存性



④分子構造タイプによる凝集挙動の差異明確化



アスファルテンの凝集構造(MD計算)



COMPASS II -ff (Materials studio 2019)



D2 PHASER (Bruker) Cu管球 Lynxeye(1次元モード) 2θ=10~40° スキャン 0.02°/sec

分子動力学(MD)にてXRD実測値の再現ができたことから、 今後は、アスファルテン分子の凝集状態の検証に活用する





- 1. 背景と目的
- 2.2019年度成果
 2.1 MCAM検証
 新物性推算システム
 減圧残油溶剤脱れき装置の抽出物予測
 減圧残油水素化分解装置のセジメント析出予測
 - 2.2 凝集挙動解析(共同研究)
- 3. まとめ



まとめ

①MCAM検証

- ・新物性推算システムでの結果を基に、MCAMを減圧残油溶剤脱れき装置の抽出物予測に適用した結果、同一原料では定量性良く抽出油を計算できることを確認した。また、減圧残油水素化分解装置でのセジメント析出成分予測においては、析出物の予測精度の改善を実現した。
- ・2020年度はモデルの検証・改良を行い、MCAMによる予測精度の 改善を実現する。

②凝集挙動解析(共同研究)

- ・アスファルテンの凝集状態の観察、分析、計算により、アスファルテンの分子レベルでの凝集挙動や凝集構造の情報が入手できた。
- ・2020年度は、MCAMが反映出来ていない凝集因子とその反映 方法を決定し、MCAMの改良を行う。



