

分子構造情報を活用した RFCC 反応モデルの構築（第2報）

(JPEC) ○^{まつもとこうたろう}松本幸太郎、^{たかはしゆうき}高橋祐樹、^{さきせきよし}佐瀬 潔、^{かとうひろし}加藤 洋

1. 緒言

JPEC では、ペトロリオミクス技術の活用により RFCC 装置内で生じている全体反応を分子レベルで明らかにし、高付加価値留分の得率増産に繋がる基礎技術の確立に取り組んでおり、これまでに Coke 生成機構解析、コアの反応モデル作成を行ってきた。¹⁾²⁾ 本報告では、原料油から生成油組成を推定する反応モデル、および反応モデルを用いた得率予測について報告する。

2. 反応モデル

2-1. 実験

2 種類の原料油（試験 A：DSVGO、試験 B：DSAR+DSVGO）を用いて行ったベンチ試験結果について、ペトロリオミクス技術を用いて解析し、コア、側鎖・脂肪族存在量を評価することで、反応モデルを作成した（図 1）。

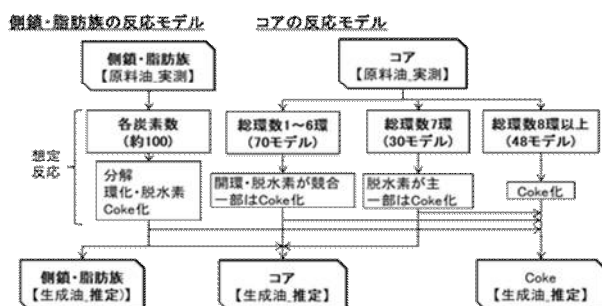


図1 反応モデルの基本的考え方

2-2. 側鎖・脂肪族の反応

側鎖・脂肪族の炭素数分布を図2に示す。原料油中の側鎖は殆どがβ位で切断されて脂肪族を生成した。一方、原料油中の脂肪族（含む側鎖の分解物）は逐次的に分解されて炭素数6前後になると考えられ、炭素数6前後の存在量に試験A、Bの原料影響が見られた。

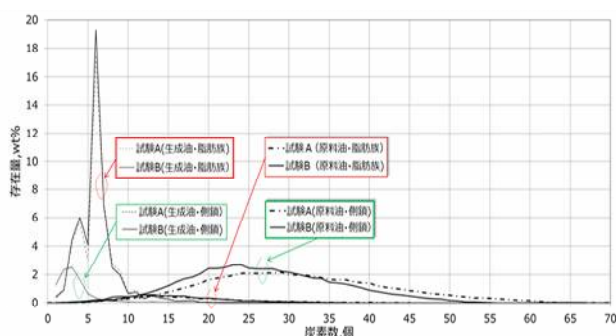


図2 原料油、生成油の側鎖・脂肪族分布

2-3. コアの反応

総環数 1〜6 環コア分布を図2に示す。総環数 3〜6 環コアは開環反応により総環数が低下するコア

と脱水素反応により総環数が変化しないコアの両方が存在すると考えられ、1・2 環コアは開環反応による低環数化以外に側鎖・脂肪族炭化水素の環化によるコア生成も考えられた。また、生成油の高付加価値留分得率に原料影響が見られた。

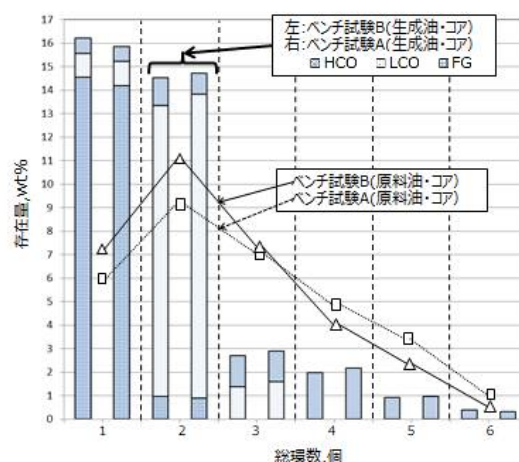


図3 原料油、生成油のコア分布

3. 反応モデルを用いた得率予測

作成した反応モデルから推定した生成油の分子組成と存在量、および JPEC が保有する物性推算システムで算出した沸点リストから生成油各留分の得率を推定したところ、実測と推定値はほぼ一致した（表1）。

表1 生成油の得率予測

留分	生成油, wt%	
	実測値	推定値
H ₂ Gas	11.6	11.8
FG	56.2	52.3
LCO	21.0	20.9
HCO	8.8	12.8
Coke	2.2	2.2

4. まとめ

ペトロリオミクス技術を用いて RFCC 反応の生成油得率を推定できるプロトタイプモデルを構築した。今後は、RFCC 装置で重要な FG 留分の得率予測精度とモデルの汎用性を更に向上させる予定である。

謝辞

本研究は経済産業省・資源エネルギー庁の委託事業の一環として実施された。ここに記し、謝意を表す。

参考文献

- 1) 高橋ら，第 48 回石油・石油化学討論会，2G13(2018)。
- 2) 高橋ら，第 49 回石油・石油化学討論会，2C13(2019)。