

## 分子構造情報を活用した RFCC 反応モデルの構築（最終）

(JPEC) ○<sup>まつもとこうたろう</sup>松本幸太郎、<sup>させきよし</sup>佐瀬 潔、<sup>かとうひろし</sup>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、高付加価値留分得率増産に繋がる基礎技術の確立に取り組んできた。前報<sup>1)2)</sup>までの反応モデルを改良し、汎用性のある得率予測モデルを開発したので、その結果を報告する。

## 2. 実験：反応モデルの検討

原料油 3 種、反応温度 500～540℃、触媒/オイル比 5～8 の範囲でベンチ試験結果を行い、反応前後の JACD 部分構造存在量を解析することで、脂肪酸・側鎖・架橋・コア構造の分解反応モデル(反応モデル①)とコーク生成反応モデル(反応モデル②)を作成した。また、反応モデルから推定された生成物に沸点を割り当て、留分得率を計算した(図 1)。

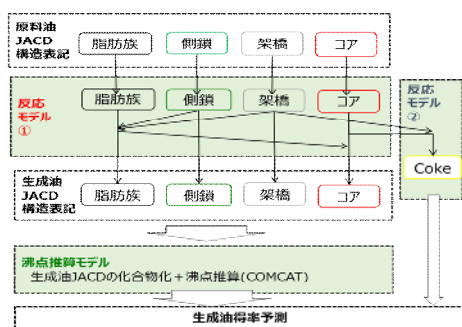


図 1 得率予測モデル全体と各モデル

## 3. 結果・考察

## 3-1. 反応モデル①

各条件における反応を解析した結果、脂肪酸・側鎖・架橋では分解反応、コア構造では主にナフテン環の分解・開環反応が起きていたことから、図 2 に示す分解反応パスを作成した。反応パスは反応条件に依らずほぼ同じであったことから、各条件(転嫁率)に応じて反応パス比率が変化する生成油各留分の組成・得率予測モデルを開発した。

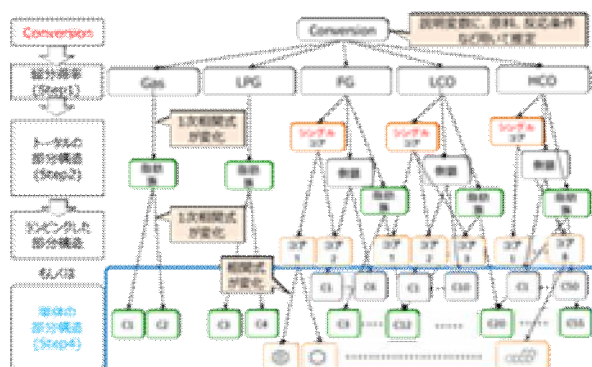


図 2 原料油・生成油の分解反応パス

その結果、得率予測精度は、原料油と反応条件固定のプロトモデル誤差率 5wt%以内から、汎用モデル 3wt%以内となり、誤差は改善された。

## 3-2. 反応モデル②

コーク生成量は原油由来の残炭素分、金属分などの一般性状と相関があることが知られているが、JPEC では新たなアプローチとしてコークの主成分がコア構造のモデルを検討してきた。本報では更なるモデルの予測精度・汎用性を改善するため、コア構造をシングル/ダブルコアと各環数に分けコアの挙動について詳細に検討した。その結果、RFCC 原料が重質(DSAR)な時は原料油の残炭に相当すると考えられる 8 環以上のダブルコアが主にコーク生成に寄与し、7 環以下は分解反応により HCO 留分より軽質化していること等が分かった(図 3)ことから、コーク生成モデルを改良した結果、誤差率 1wt%以内で予測出来るモデルまで開発することができた。

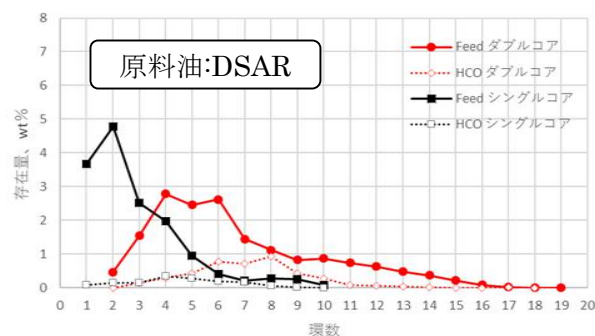


図 3 原料油・生成油のシングル/ダブルコア分布

## 4. まとめ

各種反応条件における RFCC 原料油/生成油の詳細組成構造解析結果に基づき汎用性のある RFCC 分子反応モデル及び同モデルに基づく得率予測モデルを開発した。特に分子レベルでコークの反応挙動を解析する手法は、今後の重質原料油の処理設計、RFCC 触媒開発等での活用が期待される。

## 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、謝意を表する。

## 参考文献

- 1) 高橋ら, 第 49 回石油・石油化学討論会, 2C13(2019).
- 2) 松本ら, 第 50 回石油・石油化学討論会, 2C13(2020).