

D 重質油高度対応処理技術開発

1—D. 事業の目的・政策的位置付け

1—1—D 事業の目的

原油の重質化、需要の白油化、国内需要の減少など、今後の石油を巡る厳しい内外環境の中で、我が国が中長期的にも持続的に石油の安定供給を維持するためには、残渣油やより重質な原油を効率的に精製できる体制を早急に整え、石油の有効利用を最大限進める取り組みが求められている。

複雑な混合物である原油や中間製品を含む石油成分の構造を特定・定量するとともに、コンピュータ技術を駆使し反応・分離挙動の分子レベルでの把握を実現すること等により、重質油分解を初めとする高度な石油精製プロセスにおける反応装置等の革新的な最適化を行い、石油の安定供給を図る。

本事業で実施する技術開発・研究開発は以下の4項目である。

(1) 詳細組成構造解析技術の開発

重質油は数万から数十万種の化合物で構成される複雑な化合物群であるが、これら個々の化合物の構造を明らかにする事で、分解反応性および副反応として生じるコークやスラッジ生成機構を解明する基礎を確立する事ができる。本研究開発においては、重質油中の個々の化合物の構造を明らかにする技術を確立する。

(2) 重質油分子反応モデリング技術の開発

上述の通り、重質油は超多成分からなる化合物で構成されており、脱硫及び分解装置内における反応も複雑である。これら、重質油の反応を分子レベルで解明する事で、新規高性能触媒開発技術、反応器設計技術および運転管理技術に活用する事が可能となる。本研究開発においては、重質油の脱硫反応及びコーク生成反応に関し、分子レベルでの反応挙動を明確化する技術を確立する。

(3) ペトロインフォマティクス技術の開発

詳細組成構造解析技術及び重質油反応モデリング技術は、超多成分を取り扱う技術である。従って、膨大なデータ（ビッグデータ）を効率的に取り扱う技術の開発が必須となる。本研究では、本事業で新たに開発した技術を既存のコンピュータシミュレーション技術と連動させるため、膨大なデータを適切かつ効果的に取り纏め、展開できるコンピュータ技術を確立する。

（４）アスファルテン凝集挙動解析技術の開発

アスファルテンは、残渣油に含まれる難溶解性物質であり、重質油処理装置の触媒劣化、或いは装置内コーキングやファウリング現象の要因の一つと考えられている。このアスファルテンの凝集／分散（緩和）挙動を種々の分析的手法で明確化し、要因を明らかにする事で、アスファルテンを効率的に分解させる技術へと繋げる事が出来るようになる。本研究開発では、アスファルテンの凝集／緩和挙動を解析する技術を確認する。

（５）実証事業に資する新規要素技術の開発

これまで述べてきた開発技術は、重質油の反応性を向上させる基盤技術であり、これらを実用化するためには新規な要素技術の開発が必須となる。本研究開発では、重質油中の超多成分からなる化合物の反応挙動が分子レベルで解明された際、新たなリファイナリープロセスを描き出し、そこに必要となる新規要素技術の実現可能性について調査を行うとともに、基礎的な技術を確認する。

１－２－Ｄ 政策的位置付け

（１）エネルギー基本計画

エネルギー政策基本法に基づき、エネルギー政策の基本的な方向性を示した「エネルギー基本計画（平成２２年６月１８日閣議決定）」において、以下のよう

●「エネルギー基本計画」（平成２２年６月）抜粋

第３章 第１節 資源確保・安定供給強化への総合的取組

２．国内における石油製品サプライチェーンの維持

（１）国内における石油の安定供給を担いうる石油精製業の維持強化

我が国の石油精製部門は、供給される原油の重質化や、国内石油製品需要の白油化及び構造的な減少、新興国を中心とした世界的な石油需要の増加、海外における大規模かつ最新鋭の製油所の新增設など諸情勢の変化に直面している。

このような環境変化に十全に対応し、国内における石油の安定供給を引き続き担うことが必要である。このため、重質油分解能力の向上や、石油コンビナート域内の連携を通じた競争力の強化に取り組むとともに、精製機能の集約強化による抜本的な構造調整等を進め、経営基盤の強化を図る。

また、重質油等を高効率に分解する精製技術など、革新的な石油精製技術の開発を促進する。

第３章 第２節 自立的かつ環境調和的なエネルギー供給構造の実現

３．化石燃料の高度利用

（２）石油の高度利用

①目指すべき姿

原油の重質化や国内石油製品需要の白油化等に対応しつつ、石油の有効な利用を促進するため、石油残渣等の高度利用の取組を推進する。

②具体的な取組

新興国を中心とした世界的な石油需要の増加、原油の重質化・石油需要の白油化等、石油をめぐる諸情勢を踏まえ、抜本的な重質油分解能力の向上を図る。

また、各コンビナートの特長を活かした連携を支援し、石油精製と石油化学等の異業種との戦略的連携支援を通じ、国際競争力・経営基盤を強化する。さらに、低品位な石油留分から付加価値の高い石油留分を製造する技術や、重質油やオイルサンド等非在来型原油の利用性を高めるための技術等、革新的な石油精製技術の開発を実施する。

(2) エネルギー供給構造高度化法

「エネルギー供給事業者による非化石エネルギー源の利用及び化石エネルギー原料の有効な利用の促進に関する法律【エネルギー供給構造高度化法】(平成21年7月8日閣議決定)」に基づき、「エネルギー供給事業者に対する基本方針(経済産業省告示第百六十号：平成22年7月5日告示)」及び「原油等の有効な利用に関する石油精製業者の判断の基準(経済産業省告示第百六十一号：平成22年7月5日告示)」が告示され、以下のように位置付けられている。

●エネルギー供給事業者による非化石エネルギー源の利用及び化石エネルギー原料の有効な利用の促進に関する基本方針(平成22年経済産業省告示第160号)(平成22年7月)抜粋

我が国のエネルギー供給事業者によって供給されるエネルギーの供給源の相当部分を化石燃料が占めており、かつ、エネルギー供給事業に係る環境への負荷を低減することが重要となっている状況下において、エネルギー供給事業者が、資源の枯渇のおそれが少なく、環境への負荷が少ない非化石エネルギー源の利用や、化石エネルギー原料の有効な利用を図ることが重要となっている。

このため、エネルギー供給事業者は、太陽光、風力等の再生可能エネルギー源、原子力等の非化石エネルギー源の利用及び化石エネルギー原料の有効な利用の促進に努めることが必要である。

このうち、太陽光については、再生可能エネルギー源の中でも潜在的な利用可能量が多く、需要の拡大や技術革新による発電コストの低減等を通じて、その利用の促進を図ることが重要である。この太陽光を変換して得られる電気(以下「太陽光発電による電気」という。)の調達を促進する見地から必要な事項は、以下の太陽光発電による電気の調達に関する基本方針に示すとおりとする。

また、化石エネルギー原料として利用される原油等(化石エネルギー原料として利用される原油その他の揮発油、灯油、軽油又は重油の原料をいう。以下

同じ。)については、国内の石油製品需要は減少傾向にあるものの、将来においても我が国の一次エネルギー供給の相当程度を占める重要なエネルギー源であり、重質油分解能力の向上（重質油分解装置の装備率の向上、設備の運転面の改善等をいう。以下同じ。）、コンビナート連携の促進、関連技術の開発の推進等を通じて、その有効な利用を図ることが重要である。原油等の有効な利用を促進する見地から必要な事項は、以下の原油等の有効な利用の促進に関する基本方針に示すとおりとする。

○原油等の有効な利用の促進に関する基本方針

第一 事業者が講ずべき措置に関する事項

特定燃料製品供給事業者のうち揮発油、灯油、軽油又は重油の製造をして供給する事業を行うもの（以下「石油精製業者」という。）は、石油をめぐる諸情勢を勘案し、重質油分解能力の向上、コンビナート連携の促進、関連技術の開発の推進等を通じて、原油等の有効な利用に取り組むこととする。

第二 施策に関する事項

国は、石油をめぐる諸情勢を踏まえ、石油精製業者による原油等の有効な利用に係る取組が適切かつ円滑に進むよう、重質油分解装置の装備率の向上に係る基準を定め、着実に運用するとともに、石油精製業者による重質油分解能力の向上のための設備の運転面の改善等を促し、コンビナート連携の促進、関連技術の開発の推進等に係る所要の環境整備を進めることとする。

●原油等の有効な利用に関する石油精製業者の判断の基準（平成22年経済産業省告示第161号）（平成22年7月）抜粋

エネルギー供給事業者による非化石エネルギー源の利用及び化石エネルギー原料の有効な利用の促進に関する法律（平成21年法律第72号）第2条第8項に規定する特定燃料製品供給事業者のうち同法施行令（平成21年政令第222号）第6条第2号に規定する揮発油、灯油、軽油又は重油（以下「揮発油等」という。）の製造をして供給する事業を行うもの（以下「石油精製業者」という。）は、新興国を中心とした世界的な石油需要の増加、原油の重質化・石油需要の白油化、国内石油需要の減少等の石油をめぐる厳しい内外環境の中で、原油等（化石エネルギー原料として利用される原油その他の揮発油等の原料をいう。以下同じ。）の有効な利用の重要性にかんがみ、その主たる取組として、抜本的な重質油分解能力の向上を図ることが重要である。

そのため、石油精製業者は、次に掲げる要領に従って、重質油分解装置の装備率（常圧蒸留装置の処理能力に対する重質油分解装置の処理能力の割合をいう。以下同じ。）を向上させるものとする。同時に、設備の運転面の改善等や技術開発を通じ、重質油分解能力の向上を図るものとする。

また、コンビナート連携の促進、石油残渣ガス化複合発電装置の導入に合わせた重質油のガス化及びその灯油、軽油等の合成燃料への転換又は関連する技術開発に取り組み、原油等の有効な利用を図るものとする

(2) 石油精製業者は、上記(1)に加え、次の①又は②に掲げる重質油分解能力の向上のための措置に取り組むこと。

①設備の運転面の改善等

i) 運転管理の改善

設備性能の維持管理に努めるとともに、運転温度・圧力、原料と循環油との比率等の運転条件の改善を通じて、重質油分解能力を向上させること。

ii) 触媒等の改良

触媒を使用している設備については、触媒やその添加剤に改良を加えることにより、重質油分解能力を向上させること。

②重質油分解能力の向上のための技術開発

次に掲げる重質油分解能力を向上させるための技術の開発を促進すること。

i) 残油から飛躍的に高効率に揮発油、灯油、軽油等を生産するための革新的な分解技術

ii) 超重質油、オイルサンド等の非在来型原油から揮発油、灯油、軽油等を効率的に生産するための技術

(3) 科学技術イノベーション総合戦略

我が国の現下の最大かつ喫緊の課題である経済再生に向けて、科学技術イノベーションの潜在力を集中して発揮し、この時局を打開し未来を切り拓くため、科学技術イノベーション政策の全体像として「科学技術イノベーション総合戦略」が策定され、平成25年6月7日に閣議決定された。本戦略の「エネルギー分野」で設定された8つの項目のうち「(3) エネルギー源・資源の多様化」において下図のとおり導入シナリオが示されている。(図1-1)

(3)エネルギー源・資源の多様化

エネルギー(3)



図 1-1 「エネルギー分野(3) エネルギー源・資源の多様化」における導入シナリオ

出典：「科学技術イノベーション総合戦略」（平成25年6月）内閣府

(4) 環境エネルギー技術革新計画

総合科学技術会議環境エネルギー技術革新計画（2008年総合科学技術会議）の改訂が行われた。この中で、37の「革新的技術」を特定し（図1-2、図1-3）、「いつまでに」「どのレベルまで」技術を向上させるのかを時間軸に沿った指針として2050年までのロードマップが示されている。

本ロードマップの27項目目に「革新的製造プロセス」として石油精製分野にペトロリオミクス技術が明記されている（図1-4）。



出典：「環境エネルギー技術革新計画の改定案について」（平成25年8月）内閣府

(別添2)

出典：「環境エネルギー技術革新計画の改定案について」（平成25年8月）内閣府



図1-4 革新的製造プロセス(その他製造プロセス)のロードマップ

出典：「環境エネルギー技術革新計画の各技術項目のロードマップ等について」

(平成25年7月) 内閣府

1-3-D 国の関与の必要性

我が国では、燃料油の需要は中長期的に減少する方向にあるものの、備蓄や輸送が容易であることから、今後とも一次エネルギー供給における重要なエネルギー源であると想定されている。

一方で、世界では、アジア地域の旺盛なエネルギー消費、シェールオイルをはじめとする非在来型化石燃料の出現、インド等の新興国における大型製油所の新設等、石油を取り巻く環境は大きく変化している。

このような厳しい内外環境の中で、我が国が中長期的に石油の安定供給を維持するためには、運営面での対応にとどまらず、設備面においても、より重質な原油を効率的に精製できる体制を整備し、石油の有効利用を最大限進めることが必要である。

このため、国においては、「エネルギー供給構造高度化法」に基づき、石油精製業者に対して重質油分解装置の装備率の改善を求めるとともに、同法の基本方針において、「関連技術の開発の推進等に係る所要の環境整備を進める」事が国のとるべき施策として明示されている

本研究開発事業は、このような国の政策に合致するものであり、また技術的な難易度も極めて高いことから、国の関与の下で推進することが妥当である。

2-D. 研究開発目標

2-1-D 研究開発目標

本技術開発事業は平成23年度から平成27年度までの5年間で実施する予定である。本事業は、5つの要素技術で構成されており、革新的な重質油処理技術開発に資する基盤技術の確立を目指している。

5つの要素技術は図2-1に示す通り、複合的に結びつける事により、従来にはない重質油各個成分に関する分子レベルでの反応性評価が可能となる。また、本技術で得られた反応性を活用する事で、新規な触媒反応場の設計技術開発に繋げる事が可能となるばかりでなく、原油の組成を分子レベルで理解する事による新規なりファイナリープロセスの構築をも可能とする。

そのため、本事業では重質油及び劣質油の高度処理を目的とした実証化事業に適宜適用し、開発した各要素技術の有効性を検証しながら進める事を骨子としている。

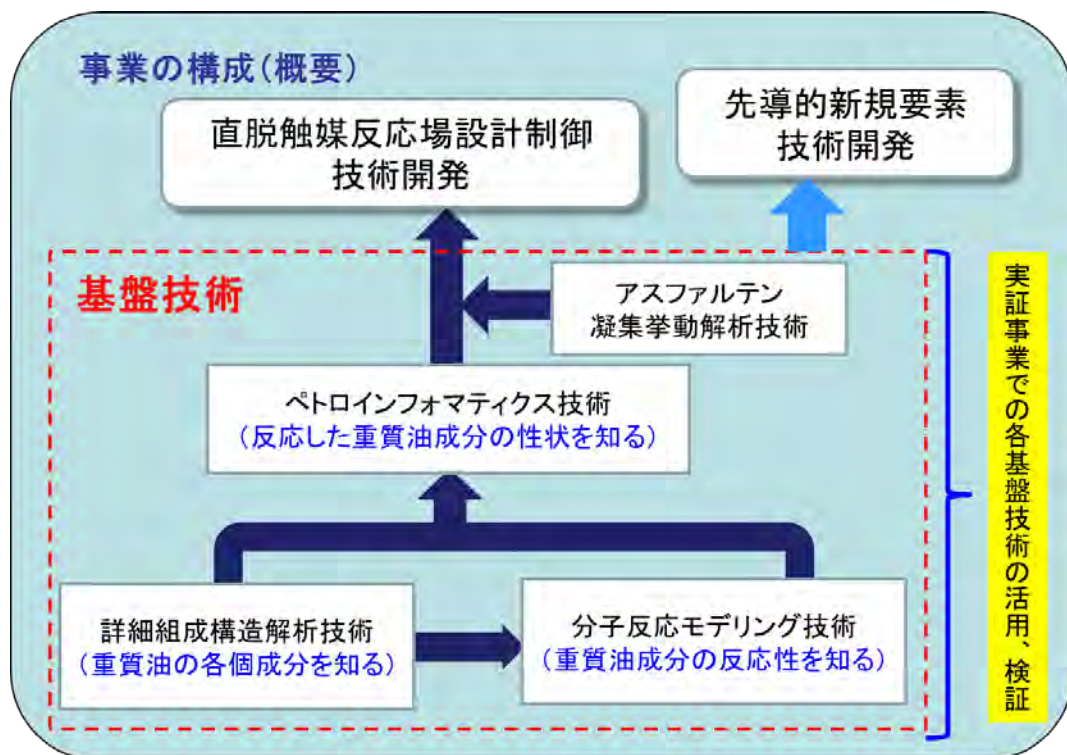


図2-1 本事業における各要素技術の構成（位置付け）図

基盤技術を確立する本事業の全体目標を表2-1に、各要素技術の目標を表2-2から表2-5に示した。

2-1-D 全体の目標設定

表 2-1 全体の目標

目標・指標 (事後評価時点)	目標・指標 (中間評価時点)	設定理由・根拠等
基盤技術である「詳細組成構造解析技術」、「分子反応モデリング」及び個別要素技術として「アスファルテン凝集挙動解析技術」が確立し、一連のものが「ペトロインフォマティクス」に取り込まれ、詳細組成構造を起点とする重質油の反応性、物性推算技術が体系的に構築されている。 ・重油直接脱硫装置の反応器内の流動と反応を連成させたシミュレータが開発され、触媒、反応器の設計指針及び運転管理技術に活用できる基盤技術が確立している。	・重質油に含まれる化合物を分子レベルで解明する「詳細組成構造解析技術」及び分子レベルで反応を解析する「分子反応モデリング技術」の基礎が確立され、これらをITにより有機的に結合する「ペトロインフォマティクス」の基本設計が完了し、この中のデータベースの仕様が固まっている。 ・重質油の反応における反応阻害物質の一つであるアスファルテンに対し、凝集及び緩和状態を評価する手法が整理され、基礎的な技術開発に着手している。 ・重油直接脱硫装置のシミュレータ開発に必要な要件が明示され、開発手順が具体化されている。 ・開発した各要素技術を活用し、実証化事業との連携の仕組みが構築されている。	・原油の重質化、燃料油需要の白油化、国内の燃料油需要の長期低落など、今後の石油産業を巡る厳しい内外環境の中で、我が国が中長期的にも持続的に石油の安定供給を維持するためには、残渣油や更なる重質原油を効率的に精製できる体制を早急に整え、石油の有効利用を最大限進める取り組みが求められている。 ・複雑な混合物である原油や重質油に含まれる化合物の構造を特定・定量し、反応・分離挙動を分子レベルで把握することにより、重質油分解を始めとする石油精製プロセスにおける反応装置等を真に革新的なレベルで改良あるいは新規開発し、石油の安定供給に資する意義は極めて大きい。

2-2-D 個別要素技術の目標設定

表 2-2 「重質油の詳細組成構造解析技術開発」の目標

要素技術	目標・指標 (事後評価時点)	目標・指標 (中間評価時点)	設定理由・根拠等
(1) 重質油の詳細組成構造解析技術開発	・重質油に含まれる化合物を細かく分画する分離前処理技術を確立し、ここからの分画物を超高分解能質量分析計により詳細組成分析構造解析技術を確立する。合わせて、技術開発の促進支援のため可視化ツールを開発する。	・分離前処理技術の基礎（7分画）を確立すると共に、3～4環程度の芳香環を有する化合物及び窒素、硫黄を含むヘテロ化合物の組成を明らかにする技術を確立する。	・我が国の製油所で装備率が高い重油直脱装置と RFCC 装置のパフォーマンスを上げるには、原料油の性状を細かく評価し反応を詳細にシミュレーションする必要がある。しかし既存技術は沸点分布や極性の相違などによる大括りの分画に基づくため、満足度は総じて低い。 ・本技術開発によって重質油を分子レベルで評価し、反応阻害要因等も詳細に解明できる。これにより、触媒性能や反応器内流動状態の異次元レベルでの改善、あるいは最適な運転管理技術の実現など、先進的な技術開発に繋げる事ができる。
①分離、前処理技術の開発	・重質油を分子量及び物性の違いで30分画出来る詳細分離方法を確立する。 ・金属含有化合物を高濃度に濃縮する技術を確立する。	・回収率90%以上で、重質油を物性の違いにより7分画する分離方法を確立する。	・本技術開発によって重質油を分子レベルで評価し、反応阻害要因等も詳細に解明できる。これにより、触媒性能や反応器内流動状態の異次元レベルでの改善、あるいは最適な運転管理技術の実現など、先進的な技術開発に繋げる事ができる。
②詳細組成分析法の開発	・前処理分画（30分画）された試料を用い、減圧残油相当の重質油においても、化合物の分子式と新規分子記述法にて解析する技術を確立する。 ・アスファルテンの構造を解析する技術を確立する。	・減圧軽油相当の重質油中の化合物をヘテロ原子・金属原子を含めた分子式にて解析する技術を確立する。	・本技術開発は我が国の石油精製技術の高度化には必須のものと言える。
③可視化ツールの開発	・超高分解能質量分析から数万ピークデータを、分子構造ごとに分類・作図する可視化ツールを開発する。	・超高分解能質量分析の数万ピークデータを可視化出来るツールのプロトタイプを構築する。	

表 2-3 「分子反応モデリング技術開発」の目標

要素技術	目標・指標 (事後評価時点)	目標・指標 (中間評価時点)	設定理由・ 根拠等
(2) 分子反応 モデリング技術 開発	・直留／分解軽油の水素化脱硫反 応を、分子レベルの反応式で定量 的に解析できる反応モデリング 技術を確立する。 ・重油の直接脱硫反応を、分子レ ベルの反応式で定量的に解析で きる反応モデリング技術を確立 する。 ・触媒活性劣化の主要因であるコ ーキング反応につき、触媒の超長 寿命化を目的として、分子レベル でのモデリング技術を構築する。	・軽油の超深度脱硫反 応を、分子間の反応式 として解析できる反応 モデリング技術を確立 する。 ・高速反応評価装置を 立ち上げ、反応モデリ ングに必要となる反応 の速度定数を得ること ができる技術を確立す る。	・これまでの実 験手法に基づく 触媒の反応性を 解析する方法で は、試行錯誤的 なアプローチに よるため、真の 最適化は図れな い。 ・これに対して、 重質油を構成す る化合物が、反 応条件や触媒作 用により、どの ように分解、改 質等されるかを 分子反応レベル で解析した結果 は、真に最適な 触媒開発およ び、超安定的な 運転管理技術の 確立等に活用で きる。 ・本技術は、我 が国の石油精製 の国際的な競争 力を飛躍的に高 めるものであ り、重質油を効 果的に活用する ために必須の技 術である。
① 分解系軽油 ブレンド処理に 対応する軽油超 深脱モデルの開 発	・高速反応評価装置を活用して、 直留軽油／分解軽油混合油の超 深度脱硫を分子反応として解析 し、生成油組成を高精度に推定し うる反応モデルを確立する	・軽油脱硫反応を分子 間の反応式として解析 できる反応基本モデル を確立する ・高速反応評価装置を 立ち上げ、反応モデリ ングに必要となる素反 応の速度定数を評価で きる技術を確立する	
② 各種重質油 ブレンド処理に 対応する直脱モ デルの開発	・高速反応評価装置を活用して、 様々な重質油の直接脱硫を分子 反応として解析し、生成油組成を 高精度に推定しうる反応モデル を確立する		
③触媒活性劣化 モデルの開発	・上記反応モデルに連動した触媒 寿命低下を引き起こすコーキン グ現象を分子レベルで定式化し たモデルを確立する		

表 2-4 「ペトロインフォマティクスの構築」の目標

要素技術	目標・指標 (事後評価時点)	目標・指標 (中間評価時点)	設定理由・ 根拠等
(3) ペトロ インフォマ ティクスの 構築	・本事業で開発した各要素技 術を活用して生み出される 膨大な分子レベルの情報を、 適切に管理するシステムを 構築し、さらにこれらの情報 を加工し組み合わせて次の 革新的な技術開発等に活用 するための新規ツールを構 築する。	・ペトロリオミクスの膨大 な情報を適切に管理し、次 の技術開発でストレスなく 活用できるデータベースシ ステムの基本設計を行うと 共に、基盤的な要素技術お よび実証技術開発等からの 情報を有機的に連結させる ために必要となる新規ツ ールの抽出を行う。	・各要素技術で新規 に開発された技術 は、定性的および定 量化された膨大な 情報を生み出す。こ れらを効率的かつ 効果的に活用する ことがペトロリオ ミクス技術開発の、 ある意味での帰着 点となる。
① データベ ースシステ ムの開発	・ペトロリオミクス関連の膨 大な情報、数値データの格納 と活用を適切に行なうため のデータベースを構築する。	・データベースシステム、 新規ツール、統合化技術な どペトロインフォマティッ クスの中核を構成する技術 の要件を具体化し、開発計 画を策定する。	・そのための情報管 理システム(データ ベースシステム)、 情報加工システム (新規開発ツール) および情報活用シ ステム(新規要素技 術)等の一連のもの を有機的に結合さ せることは必須で ある。
② 新規ツ ールの開発	・重質油中の各化合物、反応 生成物の情報を基に、物性及 び反応性に基づくランピン グ技術を確立する。 ・ランピングされた化合物群 に対するバルクの物性推算 技術を確立する。		・これが新規技術を 創出する発射台(プ ラットフォーム)と しての機能を備え ることより、ペトロ インフォマティッ クスとして共通の 概念、思想のもとに 開発する意義は極 めて大きい。
③ 統合化技 術の開発	・各要素技術を有機的に連結 するため、化合物の新規化学 記述式を考案し、測定情報の 新規化学記述式への変換技 術、さらに石油成分値への変 換手法等を開発する。		

表 2-5 「アスファルテン凝集挙動解析技術確立」の目標

要素技術	目標・指標 (事後評価時点)	目標・指標 (中間評価時点)	設定理由・根拠等
(4) アスファルテン凝集挙動解析技術の確立	・アスファルテンの凝集と緩和の挙動を解析して基本的な評価方法を確立する。 ・これに基づき、分子反応モデリング手法を活用して、直脱のモデリングと連成させ、最適な凝集緩和条件を提示できる技術を確立する。	・種々の実験手法を用い、高温・高圧下におけるアスファルテン凝集挙動を把握する。 ・ハンセン溶解度パラメータを用いて、アスファルテンの凝集状態の定量的評価の可能性を検証する。	・重質油のアスファルテンは反応器内でコーク化するため、水素化反応および接触分解反応等の阻害要因となることが知られている。また、反応器以外の場所でも汚れや詰まりの原因物質のひとつとなっている。 ・アスファルテンは通常、凝集状態で超分子を形成しているため、この凝集を解きほぐすことができれば、反応器内等でのコーク化が抑制でき、一連の反応のパフォーマンスが一挙に向上することが期待されている他、汚れや詰まりの改善にも十分効果が期待される。

表 2－6 「基盤技術を実証技術開発に活用するための新規要素技術の開発」
の目標

要素技術	目標・指標 (事後評価時点)	目標・指標 (中間評価時点)	設定理由・根拠等
(5) 基盤技術を実証技術開発に活用するための新規要素技術の開発	・現行の直脱装置の触媒設計、反応器設計、運転制御の改善課題等を、ペトロリオミクス技術に基づく新規要素技術で解析し、各々の改善のための技術指針等を提示する。 ・主要プロセスを分子レベルで制御する超革新的製油所に必要となる新規要素技術を提示し、開発の方向性を提示する。	・ペトロリオミクス技術が開発された事を想定し、次世代型製油所の全体像及び新規開発項目を具体化する。 ・超革新的製油所の全体像及び新規開発項目を具体化する。	・本事業で開発された各要素技術を実プロセスで個別に活用する場合、効果は限定的である。複数の要素技術を組み合わせることで面展開することにより重層的な効果が期待できるため、①直脱触媒、反応器等の新規設計指針を提示することで本技術が「もたらす変革の大きさ」を示し、次に、②ペトロリオミクス技術を活用する事で想定される超革新的製油所の全体概念と新規開発技術の方向性等を明らかにする。
①直脱触媒反応場設計制御技術開発	・直脱触媒を真に革新的に性能向上するための触媒設計指針を提示する。 ・反応器内の固化偏流等を可視化し性能向上するシミュレータを構築する。		
②先導的新規要素技術開発	・超革新的製油所での設備が期待される新規技術を抽出し、開発の可能性を明らかにする。		

3－D. 成果、目標の達成度

3－1－D 成果

3－1－1－D 全体成果

本技術開発は平成23年度から平成27年度までの5年間の計画で実施しており、5つの要素技術ごとに最終目標および中間目標を設定して、研究開発を進めている。

5年間の大まかな流れは、①黎明期（平成23年度）、②成長期（平成24～25年度）、③収穫期（平成26～27年度）に大別される。

①黎明期は、「分子レベルで石油留分を評価し、実プロセスに応用できる技術に仕上げる」というグランドデザインの策定や各要素技術に求められる個々の技術の選定及び獲得に向けた準備段階である。

②成長期は、「各要素技術の基盤を固め、個々の技術の有効性を明示する」段階であり、技術の使いこなしや定めた目標を達成するための技術を確立する段階である。

③収穫期は、「各要素技術を融合させ、最終目標を達成するための技術に仕上げる」段階であり、図2－1に示した各技術の連携を図り、最終目標を達成する段階である。

現時点（中間評価）は、①黎明期から②成長期に移行した段階に当り、各要素技術の基盤を固める事を目標としている。

詳細組成構造解析技術では、分離・前処理技術を確立すると共にFT-IR-MSを使いこなし、重質油中の個々の化合物の構造を規定する方法を確立しつつある。また、触媒寿命に影響を及ぼす窒素、硫黄及び金属化合物などの構造同定方法の開発も着実に進め、基礎を固めるに至っている。

また、他の要素技術についても、後述の通り技術基盤を固めつつあり、研究開発は順調に進められ、現時点までに各個別要素技術において当初設定した中間目標を達成、或いは達成できる見込みが得られている。

以下に、各要素技術の成果概要を示す。

3－1－2－D 個別要素技術成果

(1) 詳細組成構造解析技術

ペトロリオミクス技術開発の根幹を成す、重質油中の成分を分子レベルで解明する技術であるが、重質油は含まれる化合物数が数十万から数百万と非常に多数の成分で構成される。これらの成分を効率的かつ効果的に解析するためには①高度な分離・前処理技術と②詳細組成分析法の技術を確立する必要がある。



そこで、従来用いられているSARA分画法を改良し、詳細な分離方法を確立すると共に、超高分解能質量分析計を活用し、分画された留分に含まれる個々の化合物について組成を同定する技術を確立する。（図3-1）

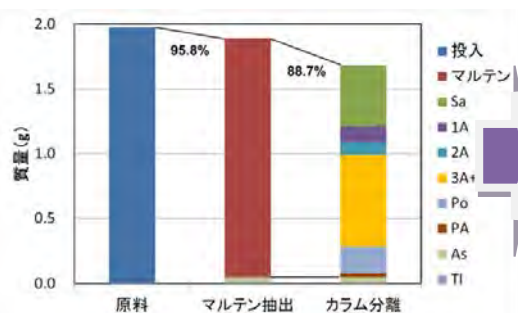
※SARA：飽和分（S）、芳香族分（A）、レジン分（R）、アスファルテン分（A）の略

図3-1 詳細組成構造解析技術の概要

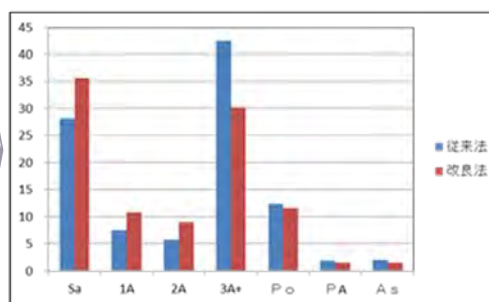
現在までに得られた成果を以下にまとめる。

○分離・前処理条件の確立

従来の4分画法（SARA分画）より詳細な7分画法を確立した。回収率は検討開始時には88.7%であったが、①カラム分画法の改良および②カラム分画に使用した充填剤（シリカ及びアルミナ）からのソックスレー抽出法を併用する事により、回収率を93.0%～95.0%に向上させた（図3-2）。



従来法による各手法の回収率比較



カラム分離の従来法と改良法の比較

（回収率：2%増）

試料	①Run-6 (CLO)	②Run-9 (VR)
シリカゲル(mg)	11	9
中性アルミナ(mg)	14	28
合計(mg)	25	37
回収率(質量%)	27	45

手法	回収率(%)
従来法	88.7
改良法	90.4
改良法+ソックスレー法	93.0~95.0

ソックスレー法によるカラム充填剤から油分回収状況（回収率：ロス分に対する割合）

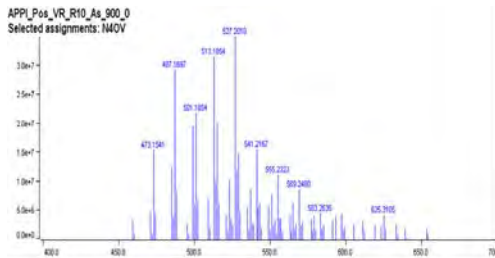
（回収率：2～5%増）

従来法と改良法の回収率の総合比較

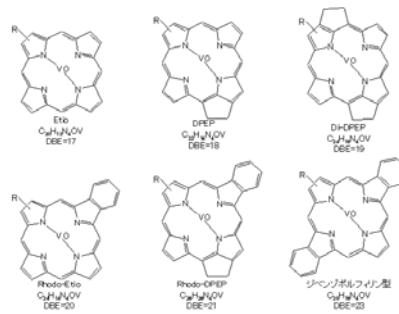
図3-2 分離・前処理法の改良による回収率の向上

○ F T - I C R - M S による詳細分析法の開発

F T - I C R - M S を用いた詳細組成分析法の検討より、アスファルテン中に含まれるバナジウム (V) 含有化合物の詳細構造を明らかとした (図 3 - 3) 。また、得られたデータを炭素数と不飽和度の相関及び窒素・硫黄元素の含有状態を可視化するツールを開発した (図 3 - 4) 。



アスファルテン中のV系ポルフィリンのマススペクトル



アスファルテン中のV系ポルフィリン

ポルフィリン 骨格名称 (炭素数)	DBE	分子量	アルキル鎖 R 炭素数	濃度 (mol%)
Etio (20)	17	459.1385 ~ 599.2947	6 ~ 16	1.55
DPEP (22)	18	471.1384 ~ 653.6418	5 ~ 18	2.08
Di-DPEP (24)	19	525.1855 ~ 623.2948	7 ~ 10, 14	0.14
Rhodo-Etio (24)	20	495.1384 ~ 635.2950	5 ~ 15	0.73
Rhodo-Etio (26)	21	521.1541 ~ 633.2793	5 ~ 13	0.41
ジベンゾポルフィリン型 (28)	23	573.1853 のみ	7	0.03

アスファルテン中のV系ポルフィリンの存在量 (対アスファルテン)

図 3 - 3 F T - I C R - M S による金属含有化合物の構造同定

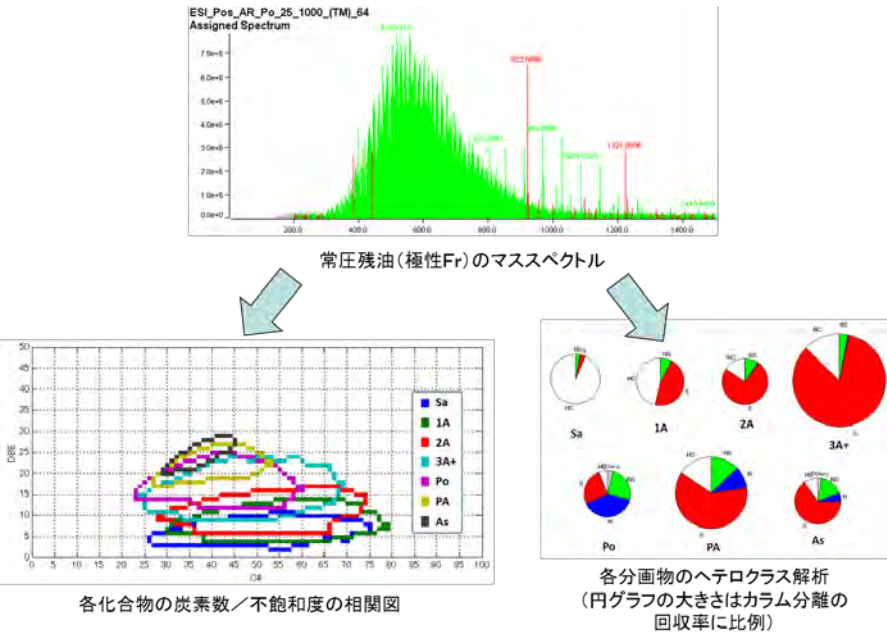
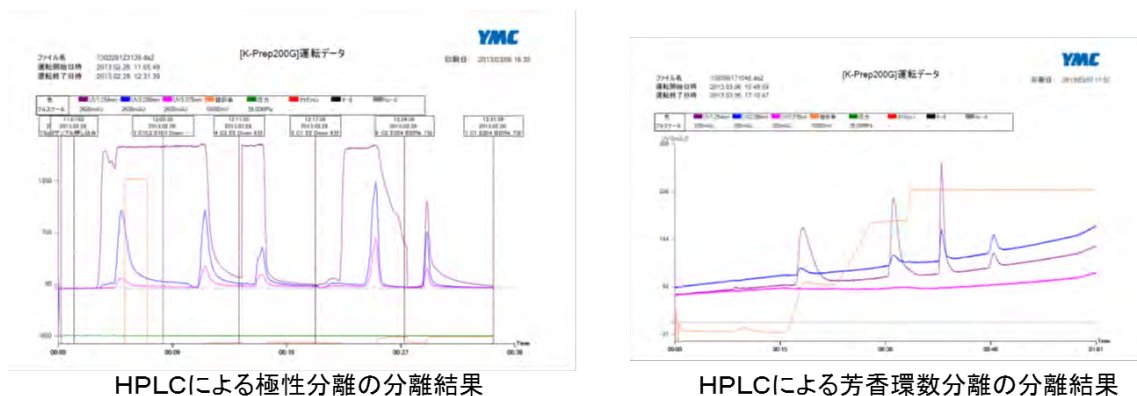


図 3 - 4 F T - I C R - M S による重質油成分の詳細解析方法

○分離・前処理条件の改良（３０分画法）

前述の７分画法では、重質油に含まれる化合物について詳細分析を行うには分離が不十分であるため、極性による分離及び芳香環の環数別の分離法を検討し、詳細分画のフローを具体化した（図３－５）。現在、高精度分離装置及び高速分離装置を活用した３０分画の条件検討を実施しており、次年度には本法を用いた詳細に分離された重質油分画物による分析及び解析を実施する予定である。



HPLCによる極性分離の分離結果

HPLCによる芳香環数分離の分離結果

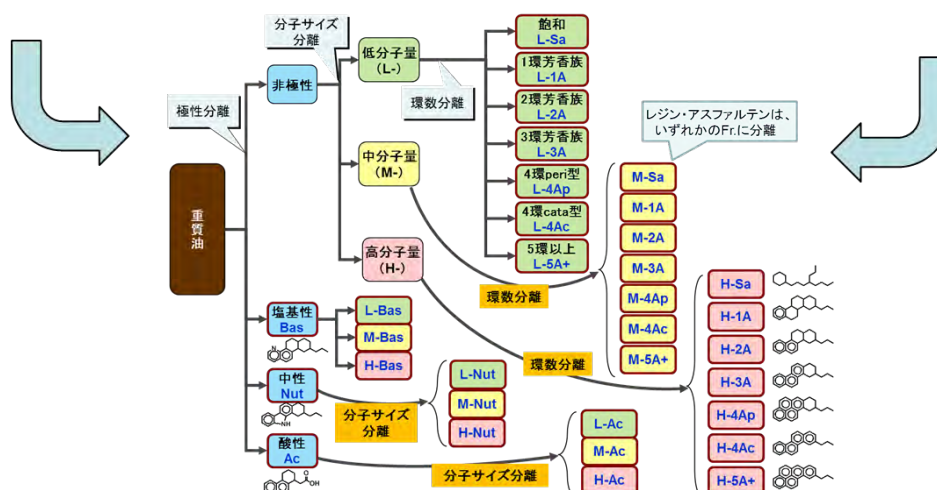


図３－５ 重質油の詳細分画法（３０分画法）のフロー

○FT-ICR-MSによる詳細構造解析法の開発

FT-ICR-MSにより得られた重質油化合物の組成式データ及び不飽和度 (DBE) と、CID-MSにより得られた重質油化合物の主骨格構造 (コア構造) の組成式データを組み合わせる事で、重質油中の各化合物の構造を同定する方法を確立した (図３－６)。今後、芳香環数の多いレジン分およびアスファルテン分への展開を図り、重質油中の全組成について構造を明らかにする。

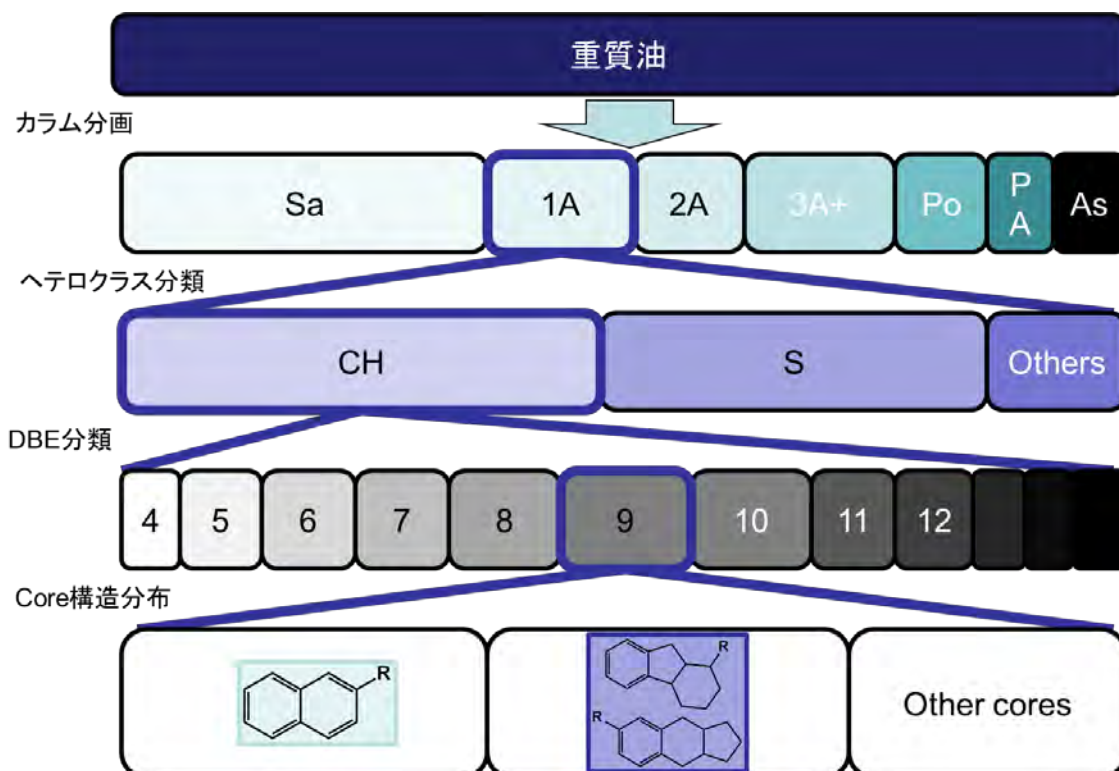


図 3 - 6 詳細組成構造技術による構造決定までの流れ

(2) 分子反応モデリング技術

詳細組成構造解析技術を駆使する事で、重質油中の成分を分子レベルで解明する事が出来る。当該技術を活用し、分子レベルでの反応性を評価できる技術を確認する事で、反応器内で起こる現象を詳細に解明する事が出来るが、現状

では非常に多くの成分を取り扱う反応モデルは存在せず、新規に分子反応モデリングを開発する必要がある。

そこで、詳細組成構造解析技術で得られた化合物群の反応過程を詳細に解析する技術をデラウェア大学の協力を得て開発する。

重質油の脱硫反応過程を追跡するためには、基本モデルを構築し、拡張する事が望ましく、基本モデルとして軽油の超深度脱硫の反応過程を取扱い、モデル構築を行う。(図 3 - 7)

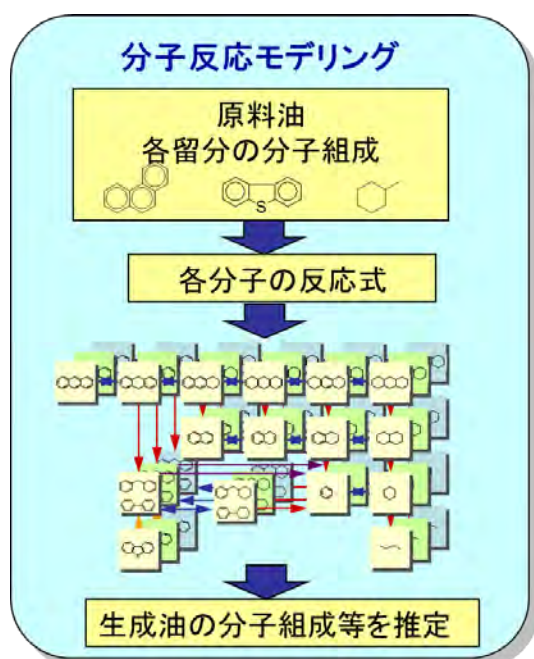


図 3 - 7 技術開発の概念図

現在までに得られた成果を以下にまとめる。

○軽油深度脱硫反応における分子反応モデリングの適用検討

デラウェア大学で開発された分子反応モデリングツール（KMT）を用い、軽油の一般性状（蒸留性状、密度、元素分析値等）から推算した直留軽油の組成は、実験データと差異が生じており、誘導体の存在確率分布を検討して修正し、実測値と整合させた（図3-8）。本改良組成を用いて、反応ネットワークを構築し、水素化脱硫（HDS）基本モデルを確立した（図3-9）。

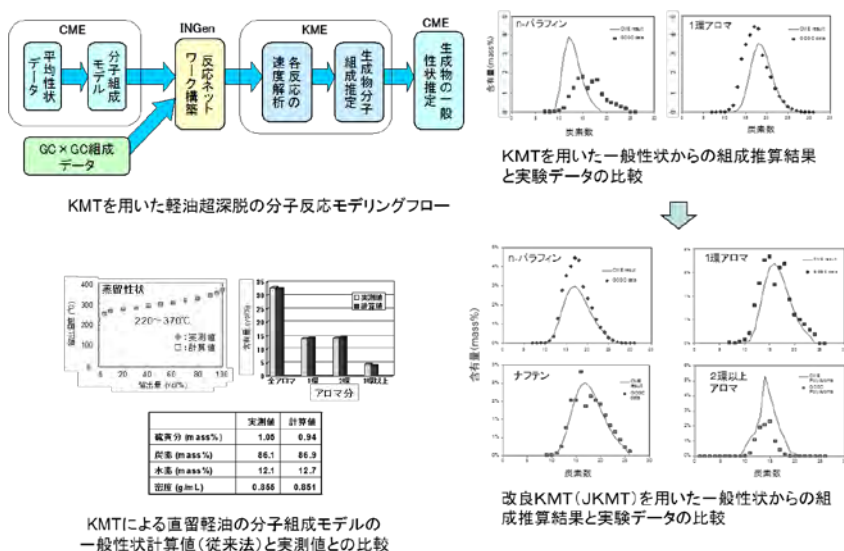


図3-8 分子組成モデル構築の改良法

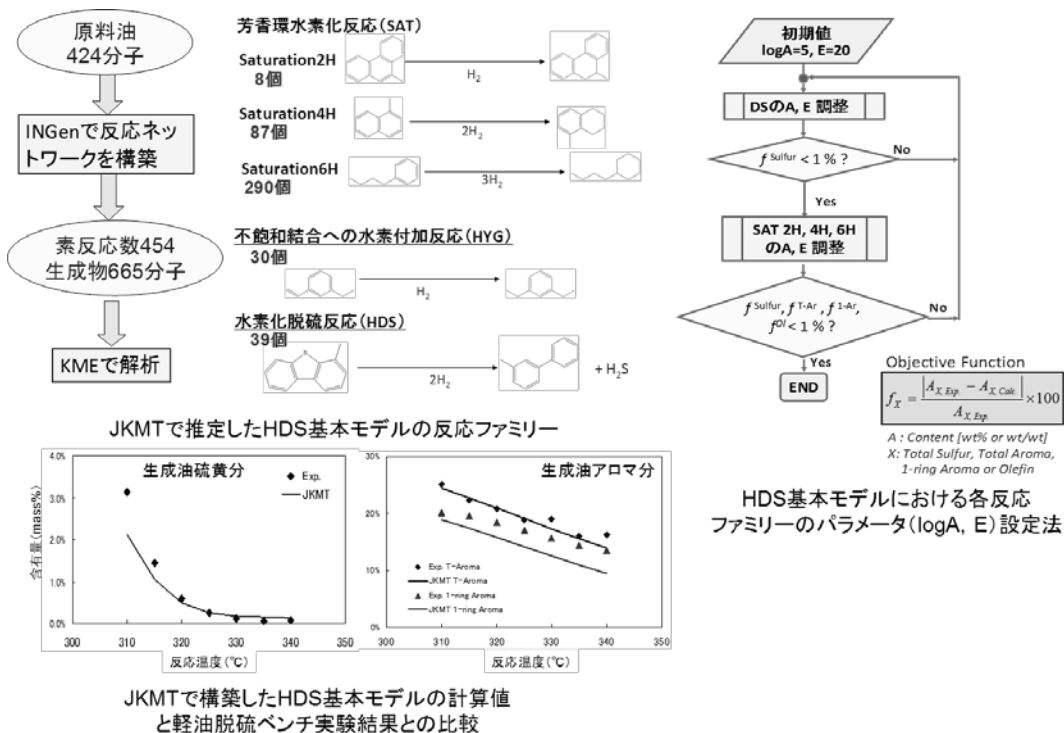


図3-9 構築したHDS基本モデルのフローと実験結果との比較

○高速反応評価装置（HTE）の立ち上げと反応速度解析技術の確立

触媒種、反応温度が異なる16本の反応管を有するHTE装置を用い、直留軽油の脱硫反応性を温度、触媒との接触時間を変えて評価を行った結果、短時間で反応速度定数の温度依存性を評価する方法を確立した（図3-10）。



図3-10 高速反応装置を用いた脱硫反応解析評価法の確立

○分子反応解析手法の高度化

KMTを改良したJKMT（JPEC版KMT）では、分子反応解析を行うためのパラメータが充分備わっていない事が明らかとなり、必要なパラメータの抽出及びパラメータの獲得方法について検討した。その結果、反応速度定数の他、吸着／脱離平衡定数が重要である事が判り、グループ寄与法を活用する事で物理化学的パラメータが精度良く推算できた（図3-11）。今後、系統的にパラメータを導出し、より精度の高い分子反応解析手法として確立していく。

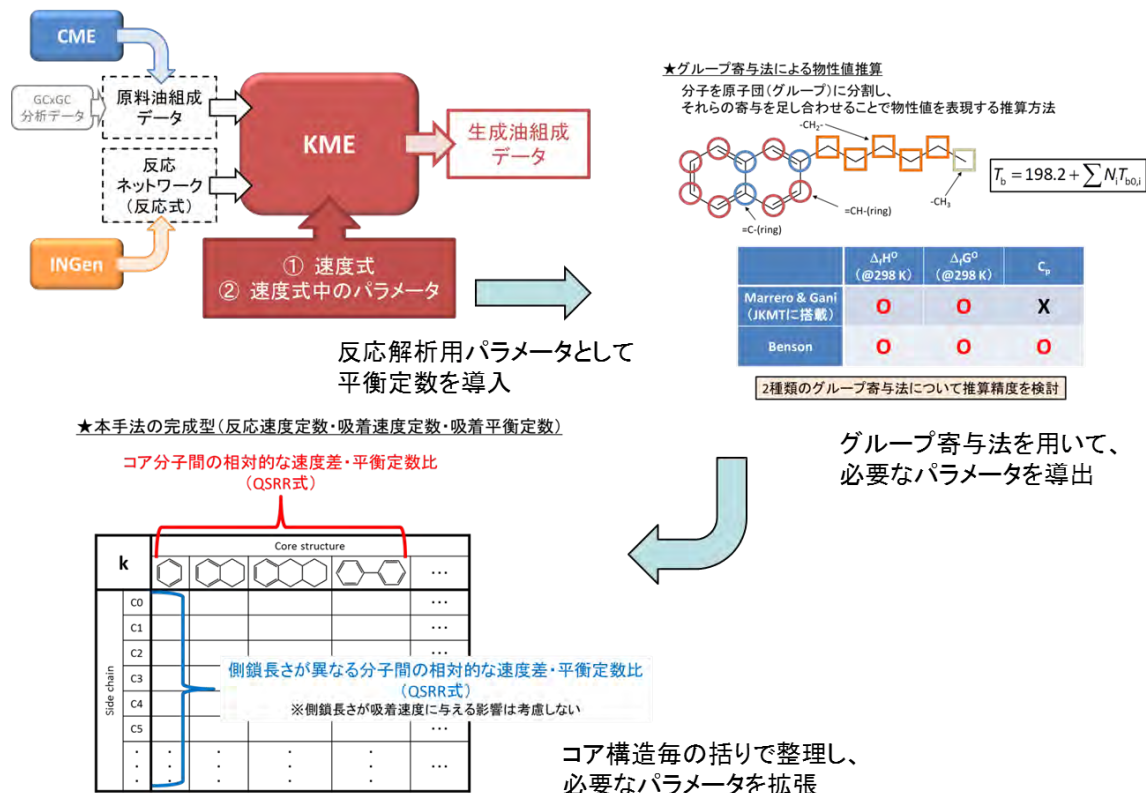


図 3 - 1 1 反応解析手法の高精度化方法のフロー

(3) ペトロインフォマティクスの構築

詳細組成構造解析技術及び分子反応モデリング技術は、いずれも膨大なデータを取り扱う事となる。また、当該技術を有機的に結びつけ、かつ製造現場や新たな技術開発課題の創造に活用できる情報に変換する技術が必要となる。

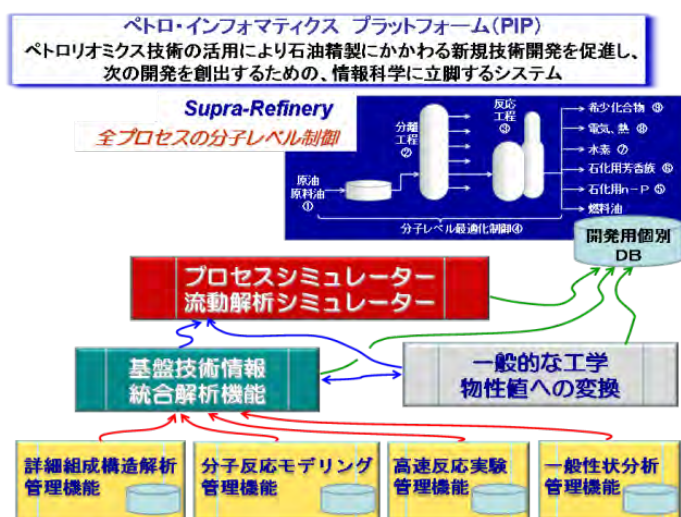


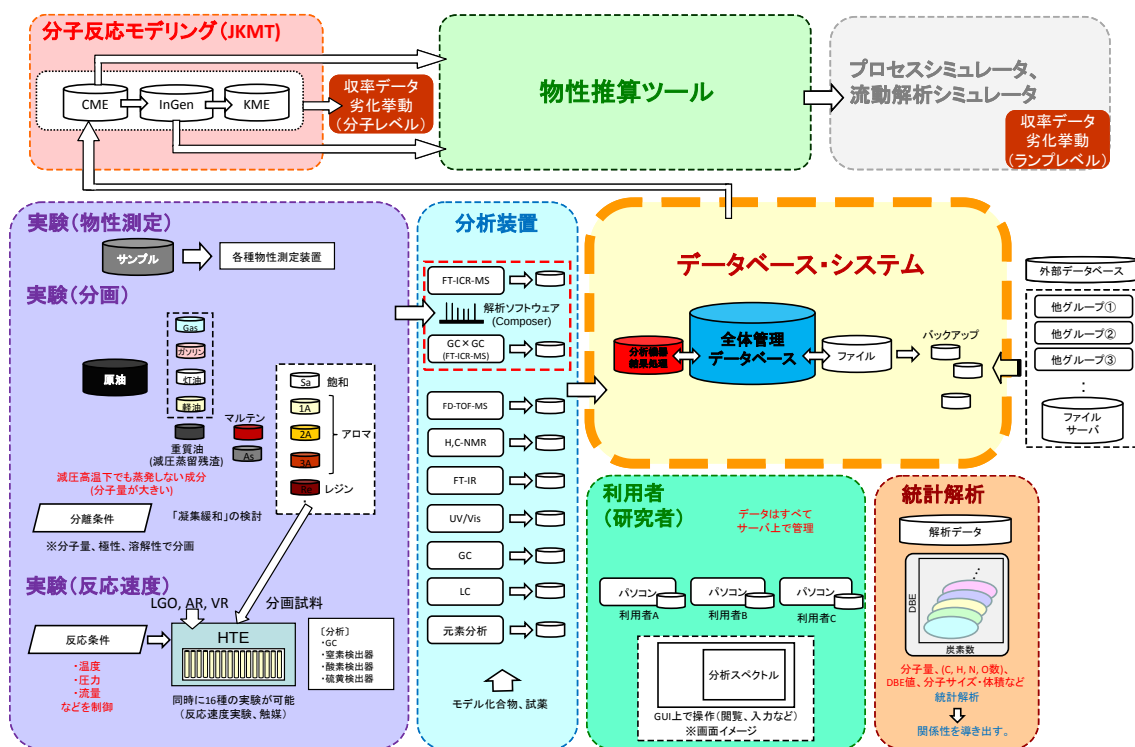
図 3 - 1 2 開発技術の全体図 (概要)

そこでペトロリオリミクス技術として開発した個々の要素技術について、詳細に解析を行った情報をプロセス設計、運転管理及び新規触媒設計に必要な要素を保持したまま、現状のプロセス解析技術に展開できるように、ビッグデータを効果的に集約、展開する技術開発を行う。(図 3 - 1 2)

現在までに得られた成果を以下にまとめる。

○ペトロインフォマティクス概念設計

ペトロインフォマティクスを①直脱反応場設計技術、②新規触媒設計技術、③アスファルテン凝集緩和プロセス技術に活用する事を前提として、必要機能を具体化した（図3-13）。



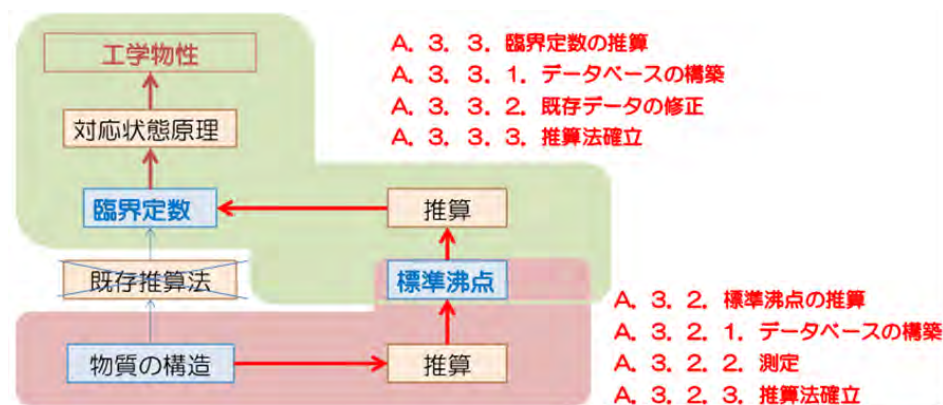
＜必要となる機能＞

- ・反応キネティクス、流動、相平衡の全てを考慮した総合的なシミュレーションができる。
- ・原料油性状と反応メカニズムに基づいて分子反応モデルを構築でき、最適な反応を実現するための方針を得ることができる(ボトルネック成分、主要反応パスの抽出)。
- ・分子構造に基づいて各種工学物性を高精度に推算でき、それを反応モデルに反映して活用できる。

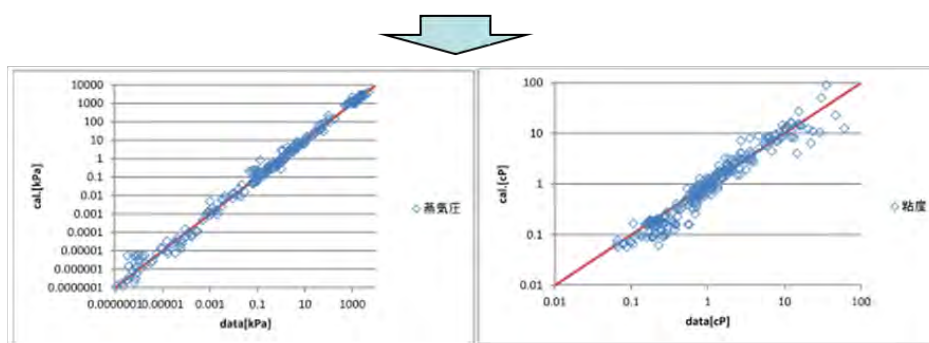
図3-13 ペトロインフォマティクスの概念と必要機能

○工学物性推算方法の開発

重質油に含まれる化合物においては、実測された物性値が殆ど存在しない。従って、物性を推算する技術を新たに開発する必要がある。本開発では、「臨界定数」を基に対称状態原理に基づき工学物性を推算する技術の開発を行った結果、粘度及び蒸気圧について実験データと整合性のある推算式を確立した（図3-14）。



工学物性推算技術の開発の流れ



工学物性推算結果(左:蒸気圧、右:粘度)
縦軸:計算値 横軸:実験データ値

図 3 - 1 4 工学物性推算手法の開発手順と推定結果

(4) アスファルテン凝集挙動解析技術

アスファルテンは蒸留残渣油に含まれ、残渣油中に分散状態で存在していると考えられている。その結果、重油脱硫装置や接触分解装置の触媒劣化や反応性低下など反応阻害物質として働く事が知られている。このアスファルテンを可溶化又は微分散させる事で重質油処理装置の性能を向上させる技術が必要となる。

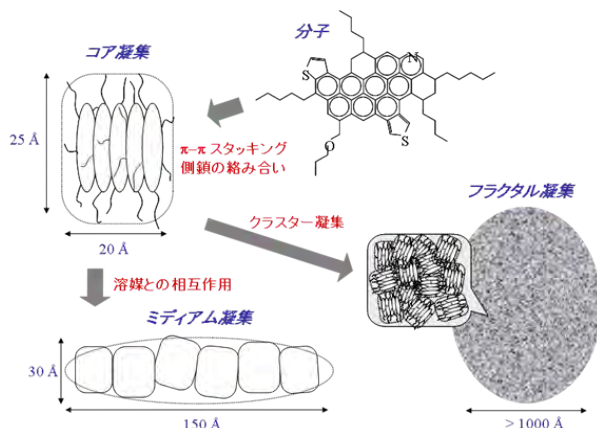


図 3 - 1 5 アスファルテンの階層構造

そこでアスファルテンの凝集状態を詳細に解析すると共にペトロリオミクス技術を複合的に活用する事で、アスファルテン凝集緩和等によるコーク前駆体生成抑制のための高度前処理技術の開発指針を提示する事を目的としてアスファ

ルテン凝集挙動解析技術開発を行う。(図 3 - 1 5)

現在までに得られた成果を以下にまとめる。

○ハンセン溶解度パラメータに基づくアスファルテンの凝集緩和挙動解析

ハンセン溶解度パラメータを用いて、アスファルテンと相性の良い／悪い溶媒の推定方法を検討し、実験データとの照合により同パラメータの有効性を確認する事で、アスファルテンの凝集緩和挙動を記述する方法を確立した（図3－16）。

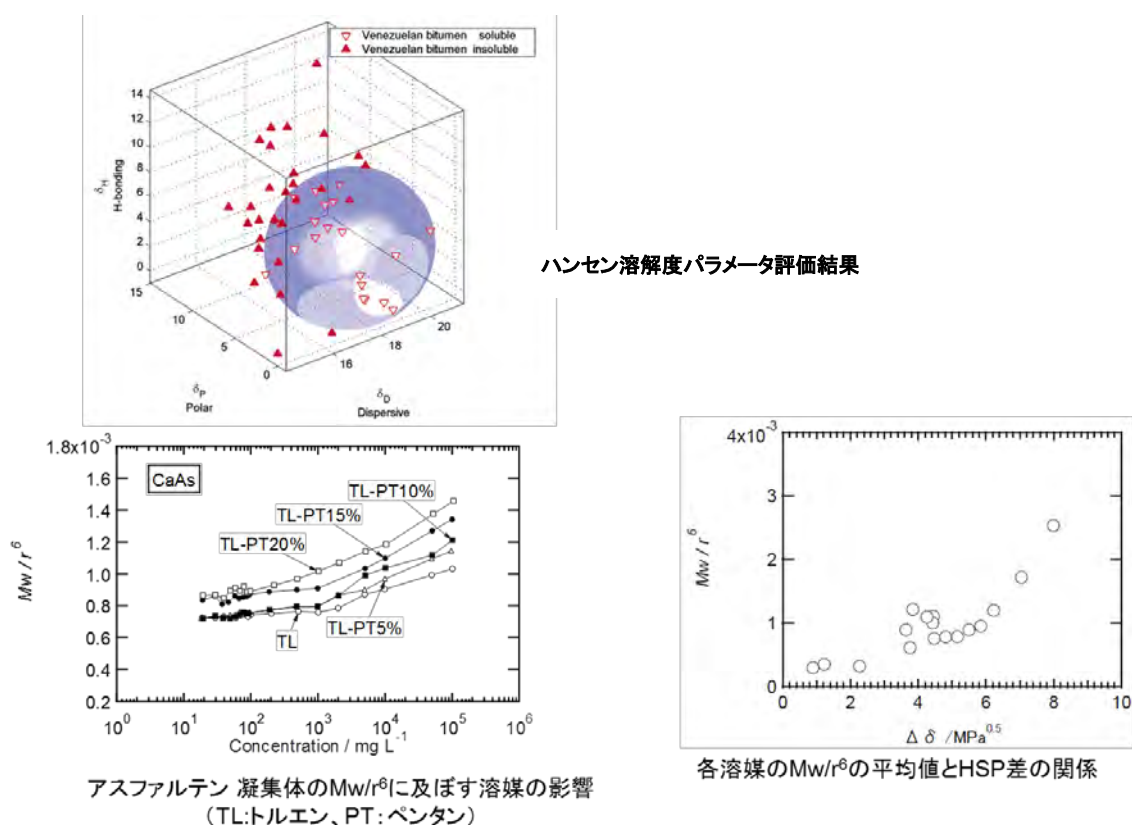


図3－16 ハンセン溶解度パラメータによる凝集・緩和挙動解析法

○アスファルテン凝集緩和挙動を解析するモデルの構築

凝集度はアスファルテンと溶媒のハンセン溶解度差によって記述され、アスファルテン分子が単一構造を持つと仮定した凝集緩和モデルを構築中である。本モデルの妥当性を検証するため、XRD、NMR、光散乱等種々の分光手法及び分子動力学手法を用いた測定、解析を実施中である。

3-1-3-D 特許出願状況等

表 3-1. 特許・論文等件数

要素技術	論文数	論文の 被引用度数	特許等件数 (出願を含む)	特許権の 実施件数	ライセンス 供与数	取得ライ センス料	国際標準 への寄与
基盤技術 開発事業	2	0	1	0	0	0	0
実証化 事業	0	0	2	0	0	0	0
計	2	0	3	0	0	0	0

表 3-2 論文、投稿、発表、特許リスト

種別	題目・メディア等	時期
論文	Journal of the Japan Petroleum Institute 「Shape Analysis of Asphaltene Aggregate at 50 mg/L in Toluene, which is the Specific in Aggregation State」	未定
	Energy&Fuels 「Comparison of Hansen solubility parameter of asphaltenes extracted from bitumen produced in different geographical regions」	H25.10
投稿	エネルギーと動力「ペトロリオミクス技術開発について」	H25.2
発表	244th ACS National Meeting 「Detailed Compositions and Molecular Structures Analysis Using FT-ICR-MS for Basic Nitrogen Compounds Related to Desulfurization Catalysts for Heavy Oil」	H24.8
	石油学会 第 61 回研究発表会「石油精製技術の新潮流、ペトロリオミクス技術開発への挑戦」	H24.5
	第 42 回石油・石油化学討論会「アスファルテン凝集の高温 XRD 測定」	H24.10
	第 42 回石油・石油化学討論会「重質油水素化精製処理油の詳細組成構造解析」	H24.10
	インペンシス社主催 AIMSCI-ESSCOR User Forum 2012 「石油精製プロセスの技術ブレークスルー -20XX 年に向けて-」	H24.9
	第 42 回石油・石油化学討論会「溶媒希釈アスファルテンの可視光散乱挙動」	H24.10
	第 49 回 石炭科学会議「溶媒希釈アスファルテンのレイリー散	H24.10

	乱挙動」	
	化学工学会 第 18 回流動化・粒子シンポジウム「FCA (Fluid Catalytic Aromafoiming:流動接触芳香族製造) プロセスの開発」	H24. 11
	触媒学会 第 48 回触媒フォーラム「石油精製と化学の連携に関わるプロセス開発」	H24. 10
	The Second International on " Application of Nano-Geosciences in Petroleum Engineering" (NanoGeosience) 「Asphaltene Aggregation Study with High Temperature XRD Measurements」	H24. 11
	The Second International on " Application of Nano-Geosciences in Petroleum Engineering" (NanoGeosience) 「 Concentration-Specific Asphaltene Nanoaggregation in Toluene」	H24. 11
	石油学会 中四国支部講演会「FCA (Fluid Catalytic Aromafoiming) プロセスの開発 ～分解軽油を原料とした BTX 製造技術の開発～」	H24. 11
	石油学会 第 5 6 回年会「石油精製－石油化学の連携に資するプロセス開発」	H25. 5
	石油学会 第 4 3 回石油化学討論会「FCC 原料油性状が特率バランスに及ぼす影響」	H25. 11
	触媒学会 第 1 1 2 回触媒討論会「F C A (流動接触芳香族製造) プロセス開発の紹介」	H25. 9
	日本分析化学会第 6 2 年会「水素化脱硫触媒の劣化間こう解明に向けた触媒および原料油の精密分析」	H25. 9
	化学工学会 第 1 9 回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム 「 F C A (流動接触芳香族製造) プロセスの開発」	H25. 11
	246th American Chemical Society National Meeting「Detailed Compositions and Molecular Structures Analysis using FT-ICR-MS related to Slurry Phase Hydrocracking for Heavy Oil」	H25. 9
	246th American Chemical Society National Meeting「EVALUATION OF CATALYST LOADING PROFILE FOR RESIDUE HYDRODESULFURIZATION BY HIGH THROUGHPUT EXPERIMENTATION」	H25. 9
	246th American Chemical Society National Meeting「MOLECULAR MODELING FOR HYDRODESULFURIZATION AND HYDROGENATION OF LIGHT GAS OIL」	H25. 9

	Petrophase2013 「Concentration -Specific Asphaltene Nanoaggregation in Toluene」	H25. 6
	14th International Conference on Phase Behavior and Fouling 「ASPHALTENE AGGREGATION ANALYSIS WITH DIFFRACTION MEASUREMENTS」	H25. 6
	14th International Conference on Phase Behavior and Fouling 「EVALUATION FOR SOLUBILITY OF ASPALTENE IN ORGANIC SOLVENTS USING HANSEN SOLUBILITY PARAMETER」	H25. 6
	石油学会 第43回石油・石油化学討論会「ハイスループット実験法を用いた残油水素化処理触媒の反応解析」	H25. 11
	石油学会 第43回石油・石油化学討論会「分子反応モデリング技術による軽油超深度脱硫モデルの構築」	H25. 11
	石油学会 第43回石油・石油化学討論会「High Throughput Screening Study of Residue Hydrotreating Catalyst Systems」	H25. 11
	石油学会 第43回石油・石油化学討論会「重質油のスラリー床水素化分解に関する詳細組成構造解析」	H25. 11
	石油学会 平成25年度精製講演会「ペトロリオミクス技術開発への取り組み」	H25. 10
	触媒学会 第112回触媒討論会「ペトロリオミクス技術開発への取り組み」	H25. 9
	石油学会 第43回石油・石油化学討論会「ランピングモデルの速度パラメーターの遺伝的アルゴリズムによる最適化」	H25. 11
	石油学会 第43回石油・石油化学討論会「シリカ膜によるC10炭化水素分離の検討」	H25. 11
	石油学会 第43回石油・石油化学討論会「アスファルテン凝集に及ぼす溶媒雰囲気の影響」	H25. 11
	石油学会 第43回石油・石油化学討論会「固体酸触媒と水素化触媒の共存による水素中でのアルキルナフタレンの脱アルキル化」	H25. 11
	第50回石炭科学会議「アスファルテン凝集に与える溶媒の影響」	H25. 10
特許	特開 2013-249385 重質油の水素化処理方法	H25. 12
	出願中（未公開）	H25. 4
	出願中（未公開）	H25. 9

3-2-D 目標の達成度

表 3-3. 目標に対する成果・達成度の一覧表

要素技術	目標・指標 (中間評価時点)	現在までの成果	中間目標 の達成度
(1) 重質油 の詳細組成構 造解析技術の 開発	・分離前処理技術の基礎(7分画)を確立すると共に、3～4環程度の芳香環を有する化合物及び窒素、硫黄を含むヘテロ化合物の組成を明らかにする技術を確立する。	・重質油の分離方法を回収率95%の高収率で7分画に分取する方法を確立した ・超高分解能質量分析法を用いて、詳細組成構造解析技術を確立した ・窒素、硫黄化合物の他、ポルフィリン骨格を有する金属含有化合物の詳細構造を明らかにした ・本技術を実証開発技術に適用し、技術開発の方向性を提示した	達成
(2) 分子反 応モデリング 技術の開発	・軽油の超深度脱硫反応を、分子間の反応式として解析できる反応モデリング技術を確立する。 ・高速反応評価装置を立ち上げ、反応モデリングに必要となる反応の速度定数を得ることができる技術を確立する。	・デラウエア大が開発した分子反応モデル解析ツールを基にした JKMT を導入し、軽油超深脱／直脱モデルの原型となる脱硫反応の基本モデルを構築した ・高速反応評価装置を立ち上げ、直留軽油の水素化脱硫について反応速度定数を評価できる技術を確立した。	達成

(3) ペトロインフォマティクスの構築	・ペトロリオミクスの膨大な情報を適切に管理し、次の技術開発でストレスなく活用できるデータベースシステムの基本設計を行うと共に、基盤的な要素技術および実証技術開発等からの情報を有機的に連結させるために必要となる新規ツールの抽出を行う。	・ペトロリオミクスの情報を取り扱う技術に関する調査を基に、ペトロインフォマティクスの概念設計を行うと共に、ペトロインフォマティクスの構築に必要な機能や開発アイテムを具体化した。	達成
(4) アスファルテン凝集挙動解析技術の確立	・種々の実験手法を用い、高温・高圧下におけるアスファルテン凝集挙動を把握する。 ・ハンセン溶解度パラメータを用いて、アスファルテンの凝集状態の定量的評価の可能性を検証する。	・WAXS、NMR 等、各実験手法において高温高圧条件下でアスファルテン凝集を測定可能な技術を開発し、評価に着手した。 ・アスファルテン及び各種溶媒のハンセン溶解度パラメータと上記実験データの対比からアスファルテン凝集度を定量的に記述できる新規モデルを構築した。	達成

4—D. 事業化、波及効果

4—1—D 事業化の見通し

基盤技術開発では、詳細組成構造解析技術、分子反応モデリング技術、ペトロインフォマティクスシステム構築等を複合的に組み合わせ、シミュレーション、プロセス改良、機器開発などの実用化技術に資する技術に作り上げる事を目標としている。現在、並行して実施している実証化事業においては、開発途上の基盤技術を活用し、重質油及び劣質油の分解や脱硫反応を分子レベルで反応制御することにより、様々な実用に向けた技術開発を完成して、重質油利用の付加価値を向上させる検討を実施している。重質油分解プロセスの高度化技術開発では、実装置や実験室規模での開発触媒の活性評価、安定性評価の結果を踏まえ、実装置への技術の採用、商業化を目指す。新規重質油分解・有用化プロセス技術では、実験室規模での基礎検討、基本設計を完了し、プロセス確立を行い、経済性も精査しつつ事業化を目指す。

主たる実証化事業では、以下を目的として事業化に結び付けるべく技術開発を推進している。

【重質油分解プロセスの高度化技術開発】

(1) 高度前処理・水素化処理による重質油分解プロセス技術開発

重質油を分解して高硫黄重油を低減する為に、①アスファルテンの凝集を緩和できる高度前処理技術、②劣化耐性に優れた重油脱硫触媒システム及び③分解反応性を飛躍的に向上させるR F C C原料供給装置と触媒の改良を最適に組合せた高度精製プロセス技術を開発する。本技術開発により、重質な減圧残油（A P I 10～20）および更に重質な超重質重油（A P I 10以下）を処理できる精製プロセス技術を確立し、実装置での高硫黄重油総生産量の30%以上を低減可能とする。また、本開発の経済性が十分に確認される事で、他装置への水平展開や企業化に向けて展開する予定である。

(2) 触媒劣化機構解明による難反応性原料の最適処理技術開発

重質原油等に由来する難反応性原料を水素化処理すると触媒活性が急速に低下する。原料油及び触媒吸着物質について詳細組成構造解析による被毒物質の絞り込みと分子反応モデリング技術による被毒物質が触媒活性低下に影響を与える過程を分子レベルで解明することにより、最適処理方法の指針を得ると共に、本指針に基づき難反応性原料の最適処理技術を開発する。劣化触媒の状態・構造を解明する精密分析技術、およびペトロリオミクス技術等を活用した原料中の活性低下原因物質の分子構造を解明する精密分析技術を確立するとともに、ペトロリオミクス技術等を活用した原料供給工程・反応工程の最適指針

を確立することができる。

実証化事業の個別要素技術成果

(1) 重質油分解プロセスの高度化技術開発

①高度前処理・水素化処理による重質油分解プロセス技術開発

劣質な重質油を有用な燃料油に効率的に転換するためには、前処理装置である重油脱硫装置での触媒劣化、重油流動接触分解（R F C C）装置における分解反応性低下といった問題を克服することが鍵となる。

そこでペトロリオミクス技術を複合的に活用し、①アスファルテン凝集緩和等によるコーク前駆体生成抑制のための高度前処理技術開発、②低温高活性、劣化耐性に優れた残油脱硫プロセス技術、及び③重質油留分の分解反応性を飛躍的に向上させるR F C Cプロセス技術開発、の3つの技術を適切に組合せた重質油分解プロセス技術開発を行う（図4－1）。

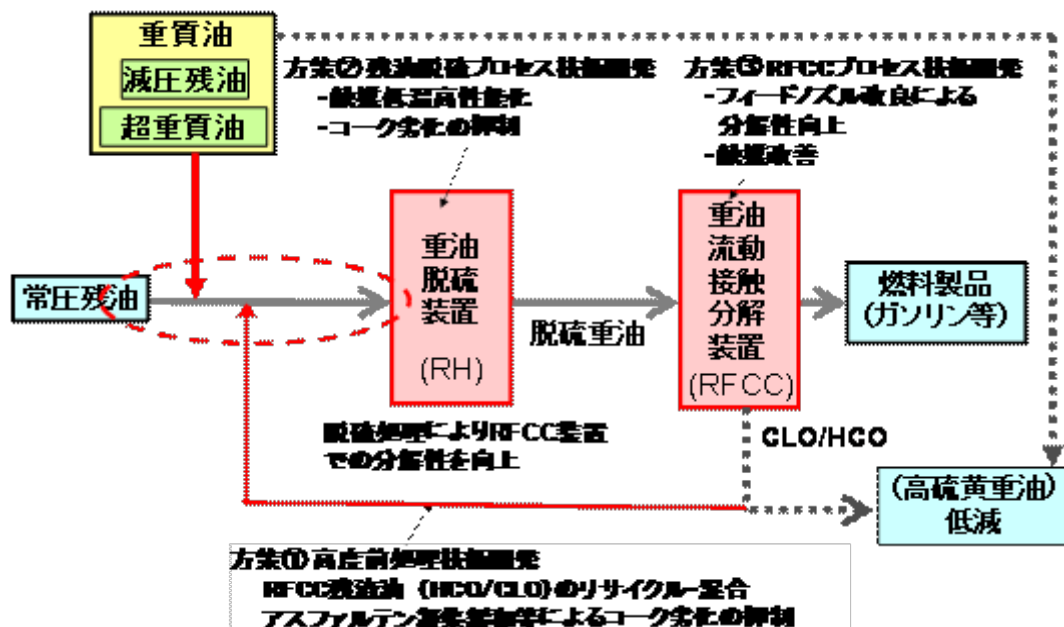


図4－1 開発技術のイメージ

現在までに得られた成果を以下にまとめる。

○最適原料性状の把握とアスファルテン凝集緩和等による

コーク前駆体生成抑制

凝集緩和剤（3～5環を多く含むR F C C渣油）を重質油に添加することにより、アスファルテンの凝集緩和が起こることを確認するとともに、凝集緩和剤添加量の効果を把握した（図4－2）。このアスファルテン凝集緩和等のペトロリオミクス技術を活用し、重質油の処理比率が高いほど高度前処理効果が大きく、残油脱硫触媒の触媒劣化を抑制できることを見出した。（図4－3 a、

図 4－3 b)

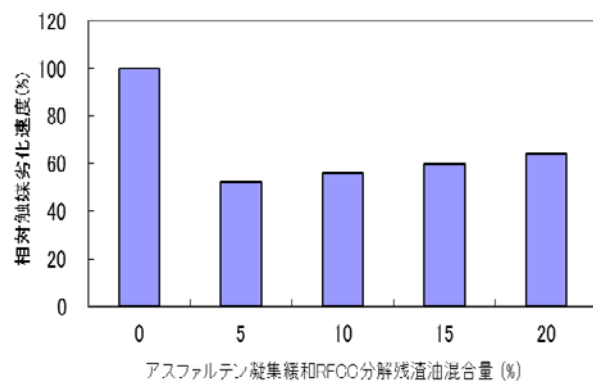


図 4－2 アスファルテン凝集緩和剤の添加効果

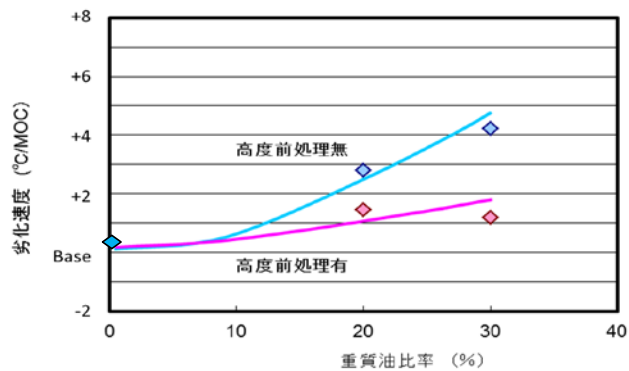


図 4－3 a, 減圧残油処理における高度前処理の劣化抑制効果

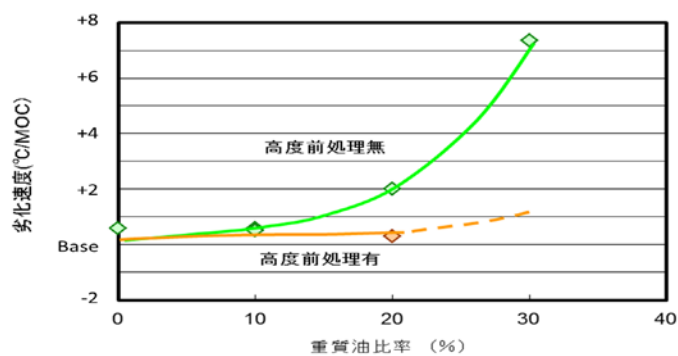


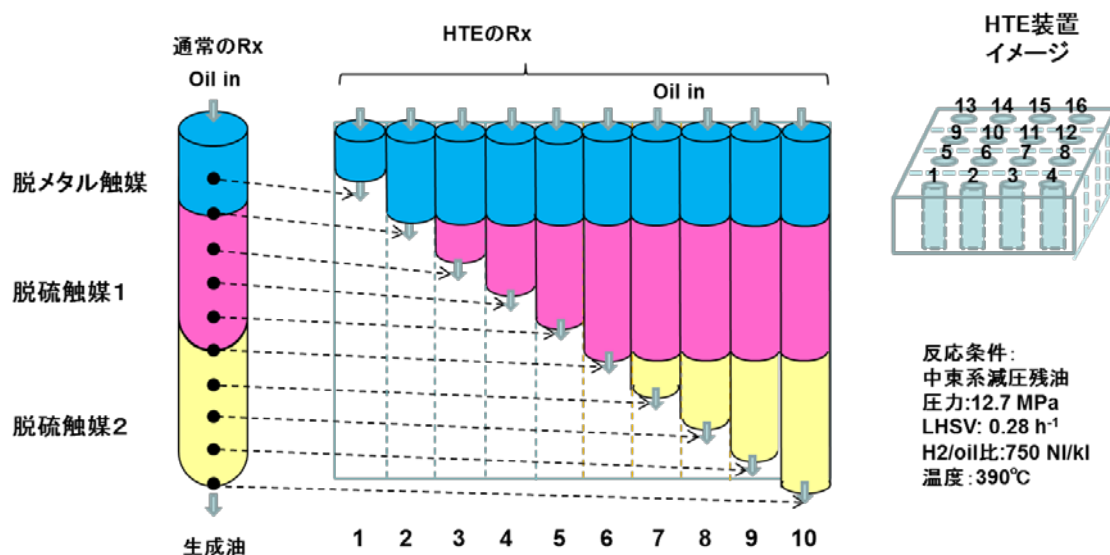
図 4－3 b 超重質油処理における高度前処理の劣化抑制効果

○減圧残油処理用高度前処理装置の検証試運転

劣化速度の抑制を確認し、重質油処理を10%増大しても劣化が維持できる可能性を見出した。又、ペトロリオミクスからの仮説に基づき、窒素化合物に

よる被毒緩和を目的にチタン添加触媒を用いた触媒システムを構築し、検証運転に向けた準備と長期の性能試験を実施した。(図4-4、図4-5)

迅速触媒評価装置(HTE)を用いた実験概要 (基盤研との共同検討結果)



触媒充填量を徐々に変化させた10本の反応管に一定量の原料を通油して、出口の硫黄分と窒素分の関係を調べた

図4-4 触媒充填パターンの変化

講速触媒評価装置(HTE)を用いた実験概要 (基盤研との共同検討結果)

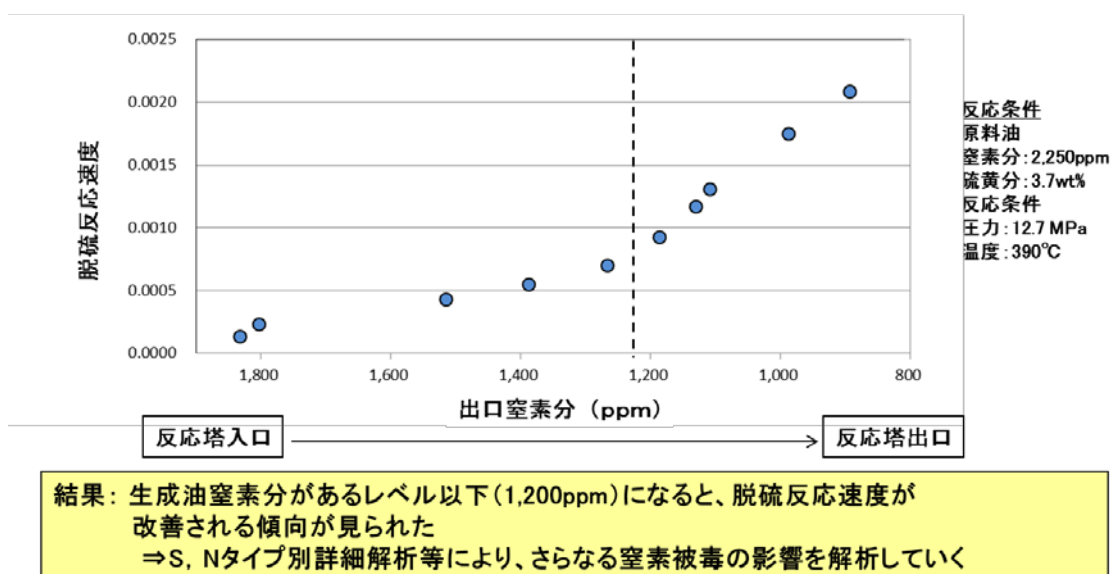


図4-5 生成油窒素分と脱硫反応速度の関係

ORFCCプロセス技術開発

RFCCプロセス技術開発では、流動解析を用いてせん断型のフィードノズルの噴射角度の影響を確認するとともに、ライザー内でも新規フィードノズルが触媒と原料油の接触効率改善に効果があることを確認した。

減圧残油処理用のR F C C触媒の検討では、メソ細孔を増加することで有望な触媒を得たため、実機でのテスト投入を行い、実用上問題ないことを確認した。

②触媒劣化機構解明による難反応性原料の最適処理技術開発

劣重質原油等を起源とする難反応性原料の処理技術には未解明部分があり、反応機構も明確にされていない。その中で、常圧蒸留、減圧蒸留により得られる難反応性原料を直接・間接脱硫処理する際に分解生成する軽油留分あるいはこの留分を接触分解したものを軽油脱硫装置で処理すると触媒活性が急速に低下するため、脱硫処理が大幅に制限され、長期間連続運転可能な技術開発が必要とされている。

そのために、長期間連続運転を可能するためには触媒の活性低下（劣化）機構を分子レベルで解明し、その知見を活用して最適な条件で重質原料油等を処理する技術開発を行う。
(図4-6)

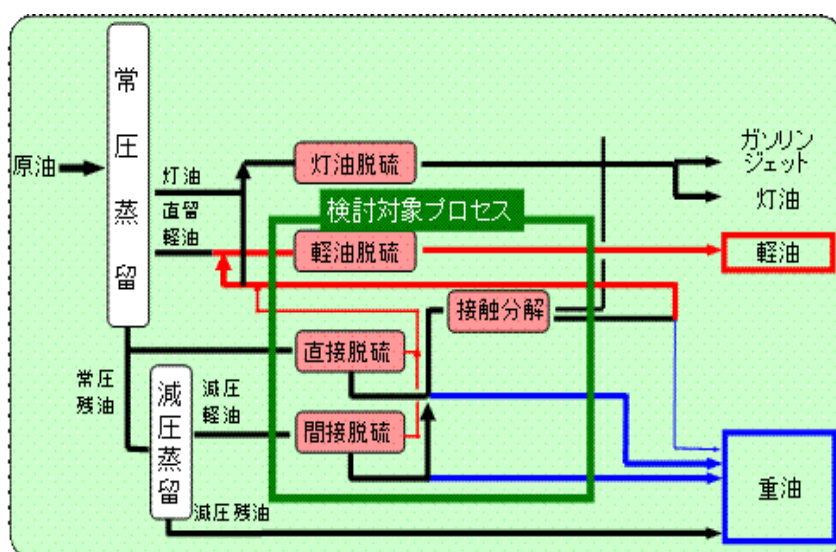


図4-6 開発技術のフロー

現在までに得られた成果を以下にまとめる。

○異なる分解軽油を混合した原料油を用いた初期活性評価

初期活性評価において、昨年度実施した予備検討と同様の結果が得られるとともに、他の分解軽油においては、塩基性N分の増加に伴ってS 8 質量ppm採取温度が上昇する（活性が低下する）傾向があることが明らかになった（図4-7）

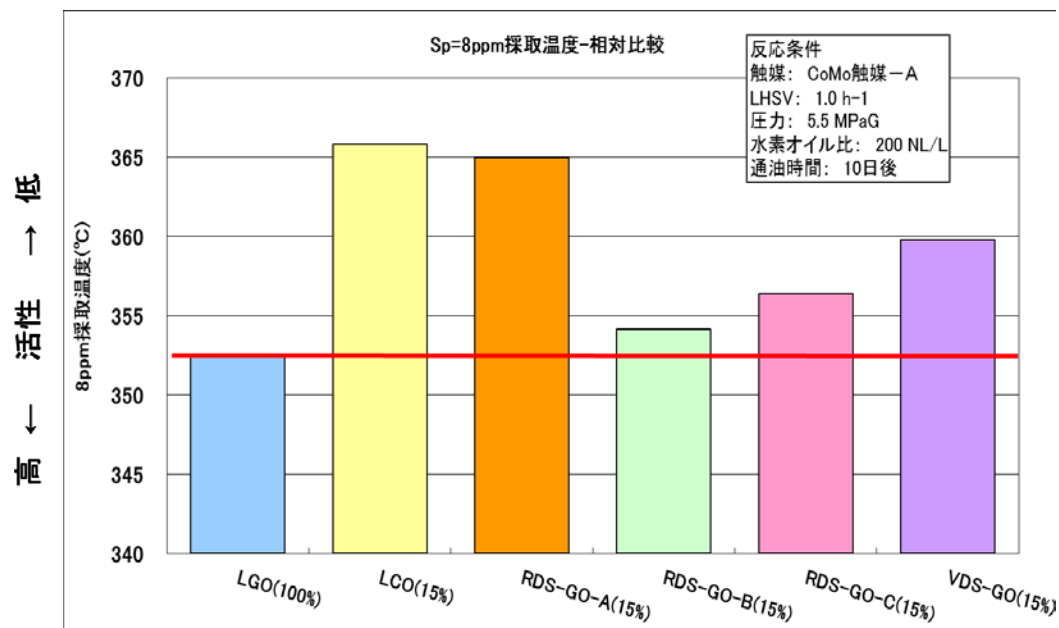


図 4 - 7 初期活性評価

○寿命評価と原料切り替えについて

高アロマ原料油が高塩基性N原料油に対して劣化速度が速いことが明らかになった。さらに、原料油切替え実験においては、高アロマ原料油通油における劣化速度は、反応初期から高アロマ原料油を通油した場合より、遅い傾向を確認した（図 4 - 8）。

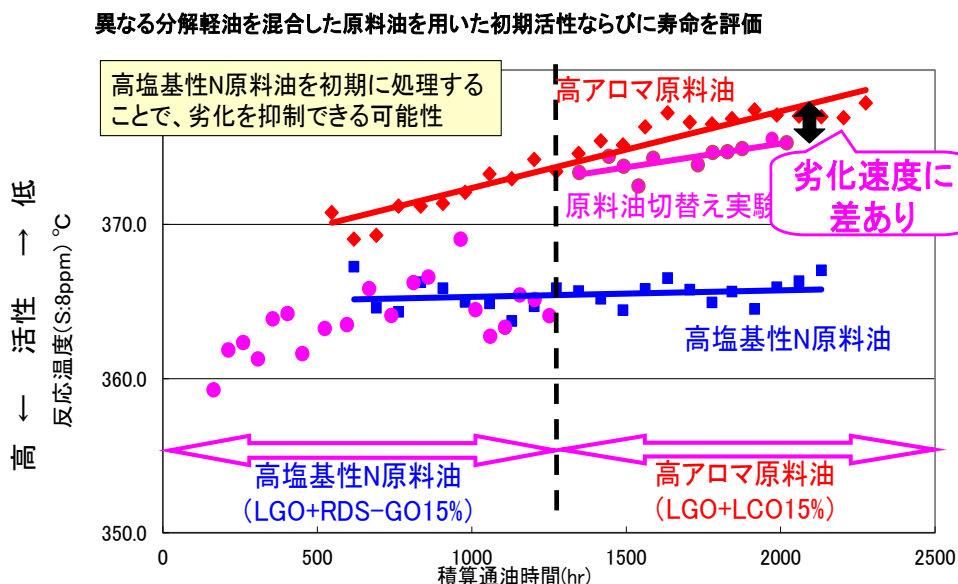


図 4 - 8 寿命評価と原料切り替え

○評価法の開発等

触媒活性低下物質（塩基性N分）を原料油に選択的に混合した反応実験では、高アロマ原料油および高塩基性N原料油について寿命評価した触媒の断面を分析し、両触媒の断面における金属の分布状態は大差ないことがわかった。但し、劣因子推定の推定まではいたっていない。

また、触媒上コークの詳細な状態、構造を分析する手法（固体のNMRなど）を確立し、堆積コークは高塩基性N原料油処理触媒が高アロマ原料油処理触媒より乱れた構造であると推定した。これにより、固体のNMRなどの分析手法は立案した仮説を検証する手段として有効との感触を得た。

4-2-D 波及効果

主要な石油精製プロセス、中でも重質油にかかわるプロセスは、高い技術ハードルと燃料油としての用途がほとんどであるという点から、混合物状態の一般性状に基づく技術体系で構築されてきた。多目的エネルギー変換拠点化も含めて、石油から燃料油だけでなく、水素・電気・熱などのエネルギー媒体、石油化学原料あるいは中間製品を超高効率に併産し、さらには希少価値ある化合物も分離するには、石油を構成する化合物にまで踏み込んだ革新的な技術体系が必要となる。

ペトロリオミクス技術は、一般的な重質油のみならず、非在来型、あるいは劣質な超重質油までも、分子レベルの組成構造解析と主要な反応の分子レベルでのシミュレーションを可能とする。本技術によって、石油精製プロセスのあり方を根底から変革することが期待され、製油所の多目的エネルギー変換拠点化も技術的な裏付けを持つことになる。

ペトロリオミクス技術は大規模な技術体系であり、基盤技術開発から新規要素技術開発、実証技術開発を経て広範に実用される。実証技術開発では、既存プロセスの革新的効率化を手始めとして、重質油等からの超高効率な白油回収、石油の素材としての新規活用などへと展開する構想を持っている。

以上の実現に向けて、現事業（平成23～27年度）を第一期とし、第三期実証事業（概ね、平成31～35年度）までを視野に入れた構想を練っている（図4-9、図4-10）。

1. ペトロリオミクスの基盤技術を確立
2. 重質油処理プロセスの性能を劇的に改善(例:直脱2年連続運転)
3. 原油を詳細分析し、製油所～石油化学のプロセスを真に最適操業化
4. 膜分離、溶剤抽出等を高度に組み合わせた超革新的製油所に変貌

劣質で安価な原油等から
高付加価値品を圧倒的
なコスト競争力で生産

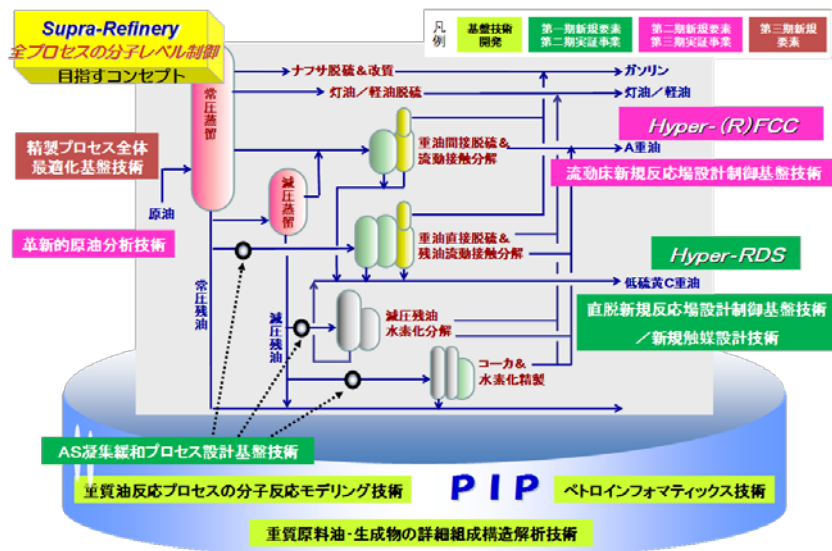


図4-9 ペトロリオミクス技術活用の長期ビジョン

競争力向上への貢献と技術開発のイメージ

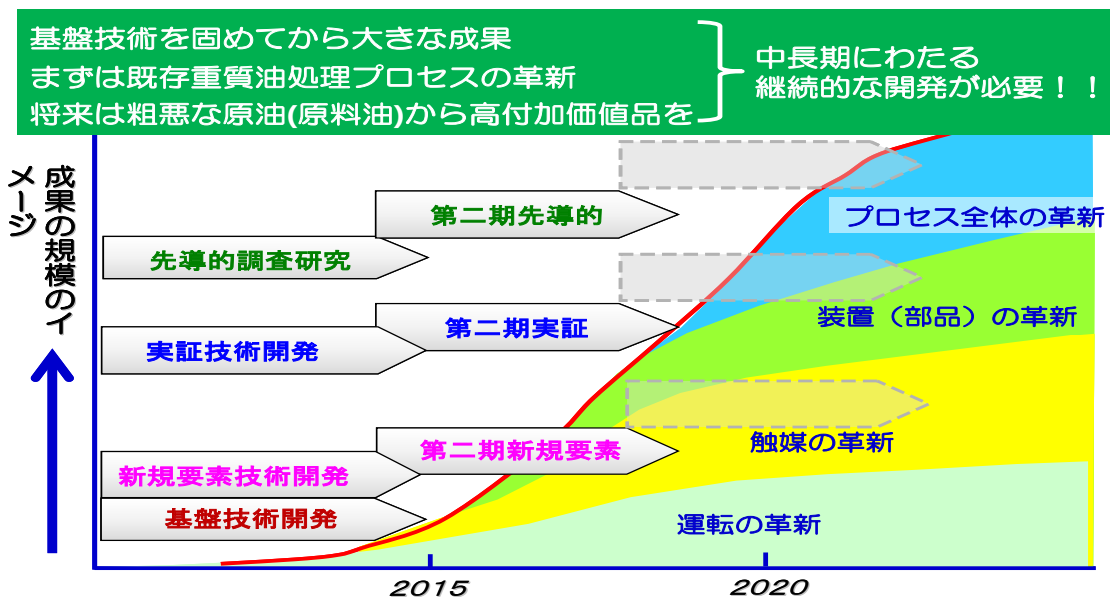


図4-10 競争力向上への貢献と技術開発のイメージ

また、本事業で期待される成果を活用した次世代型製油所の構想を石油学会を中心にWGを立ち上げ、調査及び討議を踏まえて検討し、以下の案を提起している。

平成25年度より、提起された新規要素技術については、個々の検討を開始し、実現性について評価を行う予定としている（図4-11）。

（1）構造を反映した分離技術

（2）分子構造に基づく分子反応モデリングを活用した選択的反応場／触媒の設計技術

（3）重質油分子組成を反映したプロセス設計／制御技術

並行して、これらの技術が完成した際に想定される「次世代型リファイナリプロセス」を描き出し、ケーススタディによるメリットの算出を実施する予定である（図4-12）。

各技術領域における開発技術シーズ

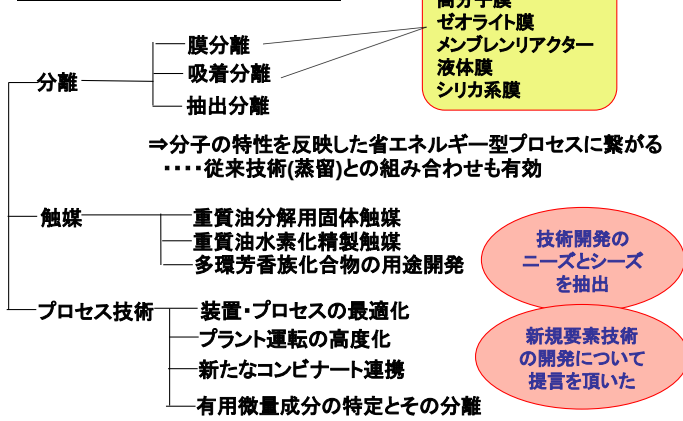


図4-11 開発技術シーズの構成

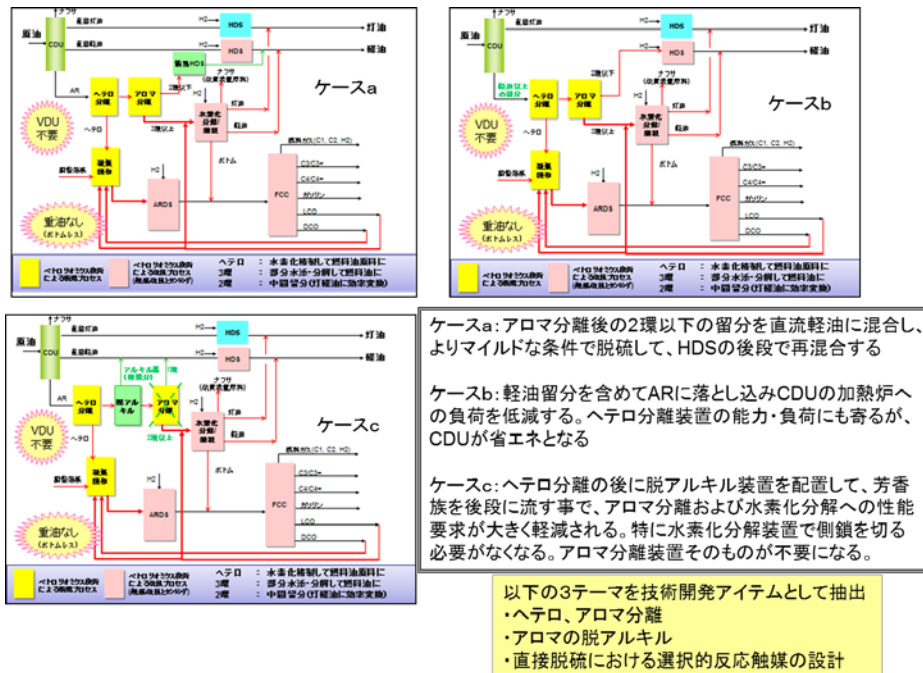


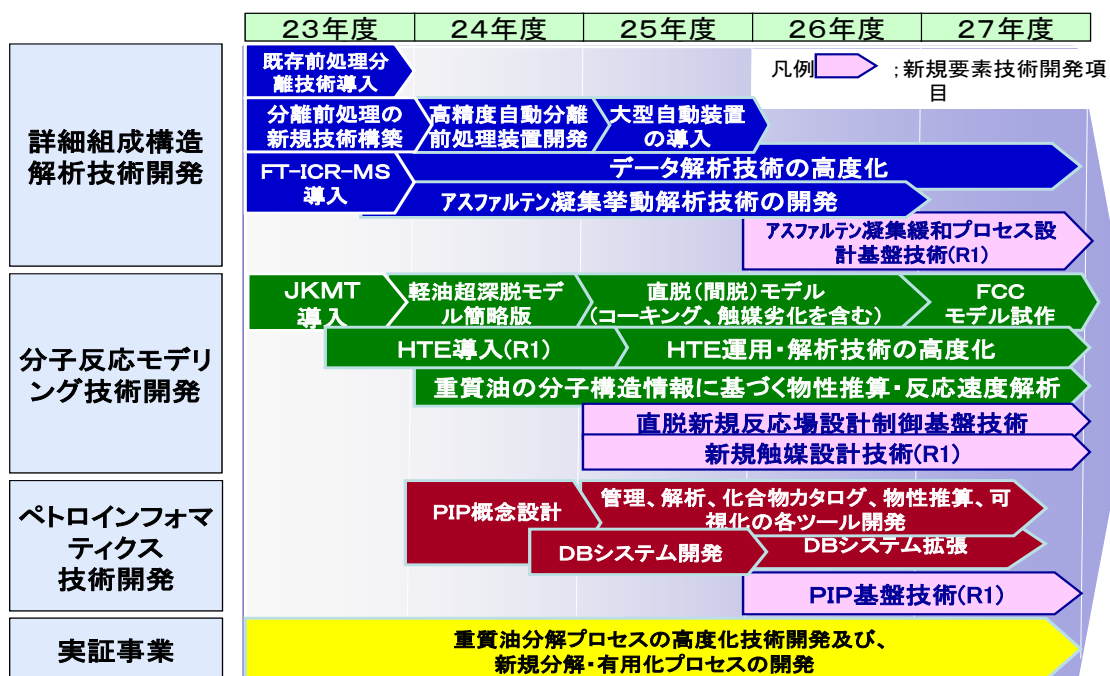
図4-12 新規要素技術開発実現後に想定されるフロー図のケーススタディ

5-D. 研究開発マネジメント・体制・資金・費用対効果等

5-1-D 研究開発計画

表5-1に平成23年度から平成27年度までの5年間の研究開発計画を示す。5年間のうち、前半期間においては個々の要素技術開発に注力し、基盤技術の基礎を確立すると共に適用技術の見極めを行う。後半期間においては開発した個々の要素技術を融合させると共に新規要素技術を組み合わせ、実証化に繋がる技術として技術を完成させる。また、並行して、実証化事業と密に連携を取り、開発した基盤技術の有効性を検証する計画となっている（表5-1）。現時点まで当初計画通り研究開発が進行している。

表5-1 研究開発計画



5-2-D 研究開発実施者の実施体制・運営

本研究開発は、一般財団法人石油産業活性化センター（JPETC）が経済産業省からの委託及び補助を受けて実施している。（平成25年度は公募による選定審査手続きを経て実施している。）

研究開発の実施に当たっては、JPETC技術企画部長がプロジェクトリーダーとして研究開発を統括した。

また本事業では、極めて高いハードルの技術開発の目標を達成するため、産学官の専門家12団体と共同研究を実施すると共に、目的別に3つのWGを構成し、年3回の討議の場を設け、相互の技術のブラッシュアップを図っている。

一方、研究成果の評価や進捗確認を行うため、当該専門分野の最先端研究者

である大学、公的研究機関、民間会社における専門家並びに有識者からなる委員会を設置し、定期的な討議を実施している。事業全体の成果や進捗確認は技術評価小委員会（年2回開催）、個々の事業（基盤技術開発事業及び実証化事業）の成果や進捗確認は3つの技術研究会（年3回開催）をJPECが主催し、適切な指導、助言及び技術開発目標に対する到達度、進捗管理等を実施している。

更に、基盤技術開発事業と実証化事業に関わる研究室間の技術検討会を随時開催し、技術情報交換及び技術課題の共有化を踏まえた課題解決策の検討及び実行計画の策定、検討結果の再討議を行い、委員会及び研究会にて委員の方々から頂いた指導、助言を技術開発に活かしている。

図5－1に本事業の実施体制を示す。各研究室は、後述する技術小委員会及び3つの個別研究会の助言・指導を受け、目標達成に向け効率的に技術開発を実施した。また、複数の研究室による共同研究の形態をとる個別要素分野もあり、適切な研究従事者の配置、関係者間の十分な連携を確保した。又、事業連携に尽力してもらっている参加会社および共同研究機関も後述する。

【研究開発実施体制】

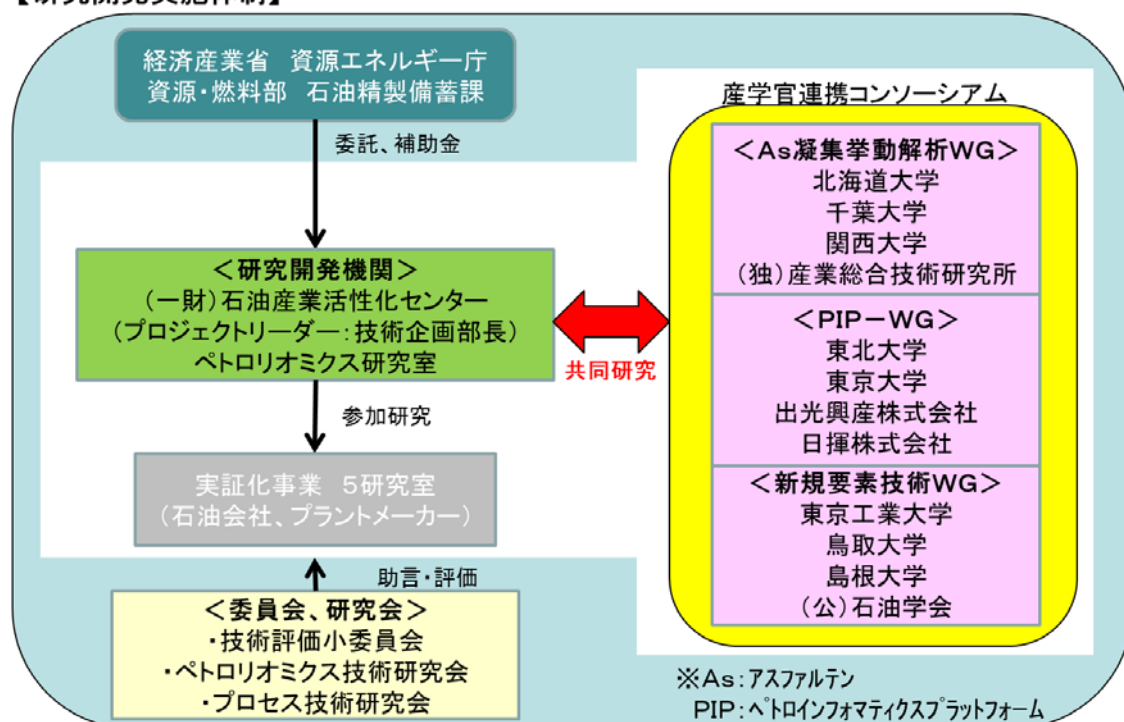


図5－1 研究開発実施体制

「重質油等高度対応処理技術評価小委員会」

委員長	御園生 誠	東京大学 名誉教授
委員	山田 宗慶	秋田工業高等専門学校 校長
委員	菊地 英一	早稲田大学 名誉教授
委員	斎藤 郁夫	独立行政法人 産業技術総合研究所 テクニカルスタッフ
委員	藤間 銀治郎	千代田化工建設株式会社 技術部門フェロー
委員	猪俣 誠	日揮株式会社 技術開発本部本部長代行
委員	阿尻 雅文	東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授

「ペトロリオミクス技術研究会」

委員長	阿尻 雅文	東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 教授
委員	志村 光則	千代田化工建設株式会社 技術開発本部 本部長代行
委員	鷹觜 利公	産業技術総合研究所 つくばセンター エネルギー 技術研究部門新燃料グループグループ長
委員	則永 行庸	九州大学 先導物質化学研究所 准教授

「プロセス技術研究会(1)」

委員長	菊地 英一	早稲田大学 名誉教授
委員	永松 茂樹	日揮株式会社 技術開発本部 技術開発部 部長
委員	富重 圭一	東北大学 大学院工学研究科応用化学専攻 教授
委員	鷹觜 利公	産業技術総合研究所 つくばセンター エネルギー技術研究部門新燃料グループグループ長

「プロセス技術研究会(2)」

委員長	斎藤 郁夫	独立行政法人 産業技術総合研究所 テクニカルスタッフ
委員	馬場 俊秀	東京工業大学 大学院総合理工学研究科 化学環境学専攻 教授
委員	塚田 隆夫	東北大学 大学院工学研究科化学工学専攻 教授
委員	則永 行庸	九州大学 先導物質化学研究所 准教授

「参加機関(基盤事業)」

独立行政法人 産業技術総合研究所

:重質油の詳細組成構造解析支援プログラム開発と凝集挙動解析技術
に関する研究開発

国立大学法人北海道大学

:アスファルテン凝集挙動解析技術の開発(NMR解析)

学校法人関西大学

:アスファルテン凝集挙動解析技術の開発
(組成・構造物性と凝集度の相関整理)

国立大学法人東京大学

:重質油プロセスシステム設計技術の開発

出光興産株式会社

:工学物性推算技術の開発

社団法人石油学会

:新規要素技術の調査

国立大学法人千葉大学

:アスファルテン凝集挙動解析技術の開発(X線回折)

国立大学法人東北大学

:重質油の表面張力の測定および構成成分との相関の解明
:重質油＋溶媒混合系の相平衡の測定と構成成分との相関の解明

国立大学法人鳥取大学

:アルキル多環芳香族の分解・分離のための触媒プロセス開発

国立大学法人島根大学

:重質油水素化精製触媒技術の開発

国立大学法人東京工業大学

:分子構造を反映した抽出分離法の開発

「参加会社(実証事業)」

JX 日鉱日石エネルギー(株)

:触媒劣化機構解明による難反応性原料の最適処理技術開発

:分解軽油等新規アップグレーディングプロセスの開発

出光興産(株)

:高度前処理・水素化処理による重質油分解プロセス技術開発

コスモ石油(株)

:超重質油処理のための高度残油分解プロセス技術開発

千代田化工建設(株)

:超重質油（オイルサンド）等の分解有用化技術開発

(株)神戸製鋼所

:超重質油（オイルサンド）等の分解有用化技術開発

5-3-D 資金配分

本事業における事業費推移を表5-2に示す。本事業においては、基盤技術開発事業を主軸としている。初年度である平成23年度は、基盤技術開発事業の研究母体を石油エネルギー技術センター・石油基盤技術研究所内に立ち上げる時期に当り、資金配分は実証化事業に厚く配分したものの、平成24年度以降は基盤技術開発と実証化事業をほぼ同額で配分した。

なお、実証化事業では、複数の参加企業が研究室を立ち上げているが、「4. 事業化、波及効果について」に述べた、『高度前処理・水素化処理による重質油分解プロセス技術開発』の事業において、実際の製油所設備（2ヶ所）を用いた研究成果の検証を行う計画を立てており、実証化事業の資金の約2/3を集中配分している。

開発したペトロリオミクス技術を実証化事業での検証に繋げ、成果を目に見える形にするためには、限られた資金を基盤技術開発事業と実証化事業への配分のみならず、実証化事業内においてメリハリのある予算運用を図っている。

表5-2 資金年度配分（25年度は当初予算を示す）（単位：百万円）

年度 平成	23	24	25	合計
基盤技術開発事業	470	700	680	1,850
実証化事業	745	750	968	2,463
合計	1,215	1,450	1,648	4,313

5－4－D 費用対効果

本事業は、石油に含まれる成分を分子レベルで解析、評価するペトロリオミクス技術開発を主眼としており、当該技術の有効性を実証化事業にて検証する構成を取っている。

足下での費用配分は、基盤技術開発に対して、実証化技術開発にやや多く振り分けているが、実証化技術においては実験室レベルのみならず、「高度前処理・水素化処理による重質油分解プロセス技術開発」においては、2製油所の実装置に改良を加え、実証研究を進めている事による。

現時点では、実証化事業も検証の途上であり、事業費用に対しどの程度の効果をあげることができたのかを定量的に算出することは極めて難しいが、触媒寿命延長及び分解得率の向上など効果が期待できる成果も出つつある。

当該事業の終了時において、基盤技術開発で掲げる目標を達成する事で、原油の価値評価や個々の製油所の運転管理指針への反映が可能となる事も併せると、国内の製油所の競争力強化のみならず、アジアや産油国との連携強化を図る際の技術支援の一アイテムとして活用する事により、我が国のステータス向上に繋げる事で多大な効果を生み出すものと考えられる。

5－5－D 変化への対応

平成23年度に本事業を開始して以来2年以上が経過した時点における、開始当初からの大きな環境変化は、以下の2点である。

- ・中期需要予測に基づく、石油製品需要の更なる低下
- ・シェールオイル革命による、原油供給構造の大幅な変化（参考資料参照）

これらの状況に対応するためには、

- 石油製品の需要予測に基づく、重質油の軽質・中間留分への転換促進
（白油化やボトムレス化、石油のノーブルユースにつながる技術）
- 安価な超重質原油及び劣質原油の更なる高度処理技術の確立
（軽質原油と重質原油をブレンドした新規原油への対応技術）

が必須となってくる。

特に、日本国内にシェールオイルが輸入された場合、大部分の国内の製油所は中～重質原油を処理する設備構成となっており、重質原油及び超重質原油とのブレンドによる新規原油をフィードする事が求められるが、本基盤技術の活用により、新規原油の運転管理指針を具体化するなどの取組みが短期で可能となる。

本技術開発事業は、原油の重質化、供給源の多様化や国内石油製品需要の白油化、重油需要の減少が加速している状況に対応するために、重質油を分子レベル化合物の詳細を解明すると共に、個々の化合物の反応性を詳細に解析し、現行のシミュレータ等で活用できる基盤技術を構築する事により、従来とは異なる視点で重質油やオイルサンド等の非在来型原油を分解して、輸送用燃料を中心とした白油や付加価値の高い石油化学原料を製造する革新的な石油精製技術に繋げる事を目的として、平成23年度から5年間の予定で研究開発を実施している。

現在まで研究開発は順調に進められ、各個別要素技術において当初設定した中間目標を達成、或いは達成できる見込が得られている。今後、残された期間で基盤技術の融合による実証化技術への活用方法の具体化と現在着手している実証化事業の検討を進めることにより、最終目標の達成が見込まれ、将来の事業化への期待も極めて大きい。

本事業の成果は今後も予想される石油価格の高騰、世界における資源獲得競争の激化等に伴うエネルギー供給不安に対して、産油国との関係強化、競争力強化に寄与することで、エネルギーセキュリティに資するものとして大いに期待される。

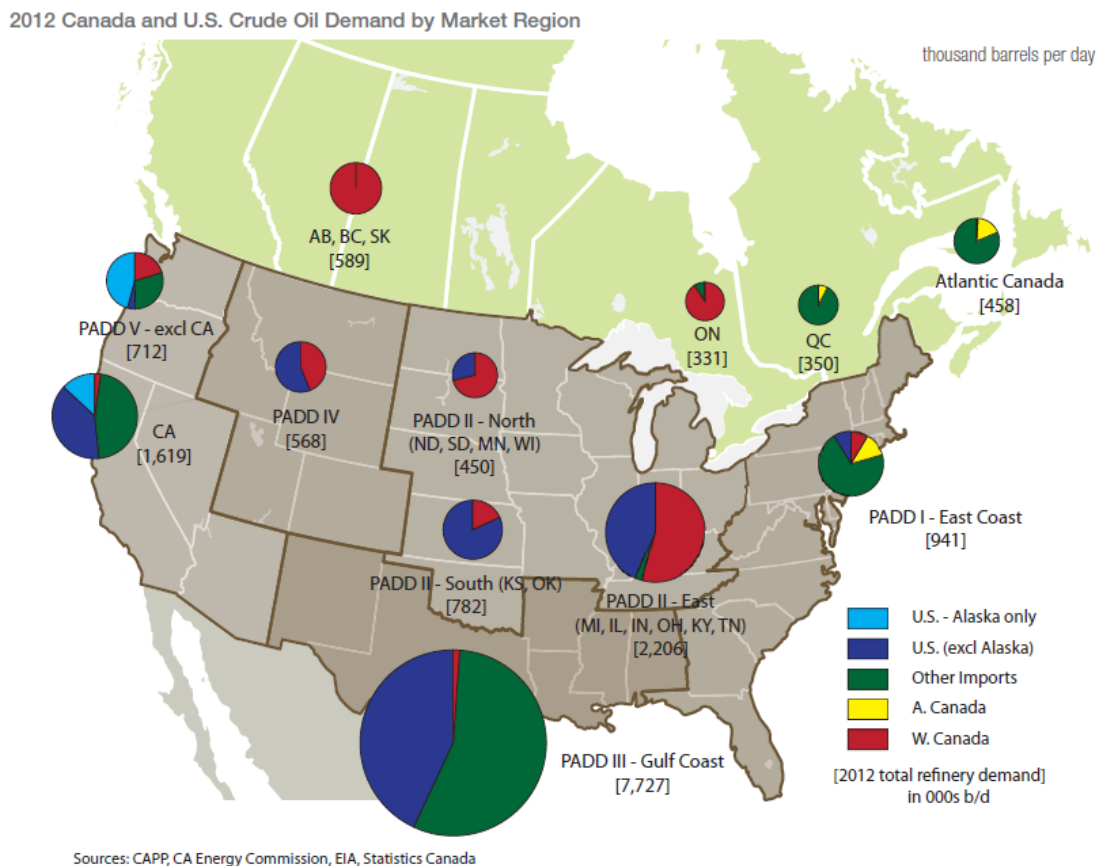
＜参考資料：「北米を中心とするシェールガス、シェールオイルの最新動向とその影響」平成25年度JPEC技術開発・調査事業成果発表会報告～一部抜粋～（平成25年7月11日）＞

3. 北米石油精製産業へのシェールの影響

3. - 1 シェールオイルの増産が北米の原油処理パターンに変革を迫っている

シェールオイル増産は、北米の原油フロー、需給バランス、価格決定力学に多大な影響を与えつつある。一つには、軽質低硫黄のシェールオイル増産が米国PADD 毎の原油需給のミスマッチを起こしていること。具体的にはPADD II（中西部）、III（メキシコ湾岸）、IV（ロッキー山脈）は軽質原油が過剰供給となり、製油所の原油フィード等を更に調整する必要があること。これには時間を要しそうである。また、PADD I（東海岸）は、バッケンシェールオイルの受け入れインフラ整備が進みつつあり、今後国内の軽質低硫黄原油の価格を決定する重要な市場となる可能性が高い。

＜北米の地域別原油需要＞



（出所：CAPP、EIA、他）

3. - 2 製油所の原油ニーズと入手可能原油のミスマッチをブレンドिंगで解決できるか？

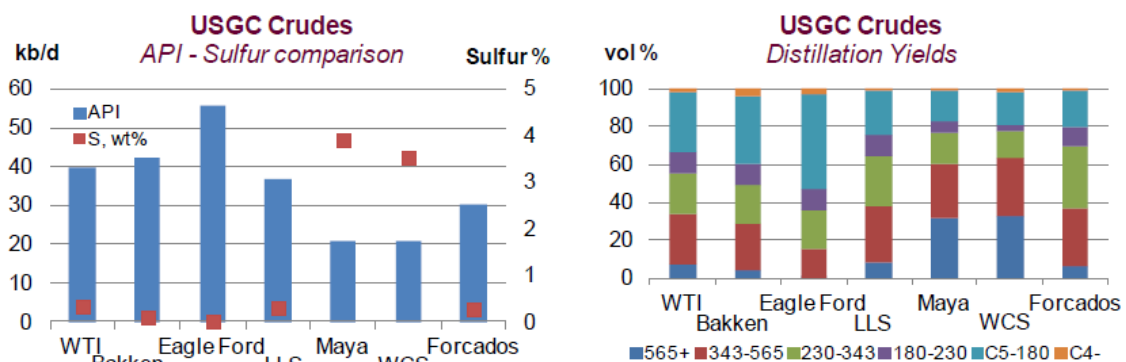
地域毎、企業毎、製油所毎に事情が異なるため、シェールオイルのような軽質低硫黄原油の大量流入への対応は、必ずしも一律ではない。対応の代表的なパターンとしては以下がある。

- 1) これまで輸入してきた軽質原油をシェールオイルと入れ替える。
- 2) 既存の設備を改良、又は軽質原油処理のため追加の設備投資をする。
- 3) 軽質シェールオイルと重質原油を混合して当該製油所処理に適したブレンド原油を作る。

1) は、高価なブレントリンクのアフリカ原油輸入に替えて、国内の安価なバッケンシェールオイル受け入れのインフラ整備を進めるPADD I が該当する。

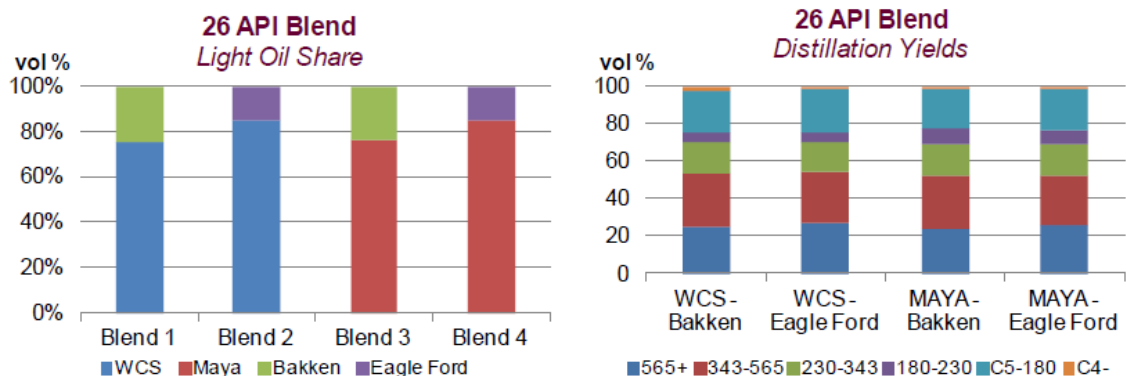
2) は、バッケンシェールオイル処理のための小規模製油所、Dakota Prairie Ref. (投資額3 億ドル) やTrenton Diesel Ref. (投資額2 億ドル) 建設計画があるPADD II、イーグルフォードからのシェールオイルやコンデンセート进行处理するためバレロやシェブロン・フィリップス・ケミカル等が計画する軽質原油、コンデンセートの処理能力増強プロジェクトがあるPADD III が該当する。

3) はバッケンやイーグルフォードのシェールオイルとWCS (Western Canadian Select : カナダ産の重質原油) やマヤ (メキシコ産の重質原油) 等の混合で、例えばANS (Alaskan North Slope : アラスカの中質原油) 並みの中質原油を作ること検討する試み。ただ、当然ながら下図が示すように、シェールオイルや他の軽質原油とWCS、マヤ等の重質原油では、API、硫黄、蒸留得率が全く異なることが分かる。



(出所 : IEA、2013 MTOMR)

実際にシェールオイルと重質の原油をブレンドして作った中質原油は、同程度のAPI の原油と比べて、C 5 より軽い成分や重油等重い成分の得率が高くなる傾向がある。すなわち、ディーゼルやジェットといった中間留分の得率が低くなる傾向があり、製油所のマージン確保が難しくなるといった問題も指摘されている。これは、元々輸入軽質原油と比べてシェールオイルの性状は中間留分が少ないことに起因すると考えられる。



(出所：IEA、2013 MTOMR)

米国では軽質よりも重質原油処理用に設計されている製油所が多く、本来であれば必要以上に供給されるシェールオイル等軽質油を輸出し、製油所が必要とする重質油を輸入等で調達すればよい筈だが（シーミンスキーEIA 長官、オダムShell 社長他、米国の原油輸出を促す要人の発言は少なくない）、米国は、原油輸出については法制度（“Energy Policy and Conservation Act 1975”）により原則禁止されている。例外は大統領が国益に基づき特別に輸出を承認する場合だが、実際は商務省がカナダ東岸向け等の一部原油輸出を承認している。

しかし、現状では殆どの場合原油輸出は難しいため、北米の原油供給システムとロジスティクスは、新たな供給に対応するため変貌する必要がある。具体的には、パイプライン、鉄道等による国内の輸送能力を増強する必要がある。

出典：

<http://www.pecj.or.jp/japanese/report/reserch/H25guide/h25data/02.pdf>