

デジタルオイルモデルの作成とアスファルテン析出問題への適用

松岡俊文*

1. 研究目的

世界各地の油田においてアスファルテン析出による生産障害が問題となっている。原油中のアスファルテンが油層内および坑井において析出した場合、岩石内の孔隙やそのスロート部及びチュービング内において閉塞を生じ、重大な生産障害を引き起こす。このアスファルテン析出による生産障害の対策としては、アスファルテン抑制剤の利用が有効である。しかしながら、原油の成分によりアスファルテン析出の条件が異なるため、油田毎に最適な抑制剤の選択が必要になる。

本研究では、実際にアスファルテン析出障害を生じている油田の原油サンプルに対して QMR (Quantitative Molecular Representation) 法を適用して原油の分子モデル(デジタルオイルと呼ぶ)を作成し、このデジタルオイルに対して分子動力学シミュレーションを適用することで、アスファルテン抑制剤選定の検討を行うことを目的とする。具体的にはアスファルテン分子が互いに引き合う強さを示すアスファルテンの凝固エネルギーに着目し、数種類の抑制剤候補に対してこのエネルギー値を計算する。その結果から、最も凝固エネルギーが小さくなる抑制剤候補を、最も効果がある抑制剤と判断する。

2. 研究の経緯

図-1 は本研究で用いた、原油サンプル中の各留分の定義である。原油中に含まれる炭化水素を分析する手法としては、液状サンプルにガスクロマトグラフィーを適用するのが最も一般的であり、軽質留分の各成分は精度よく同定、定量される。しかし、この手法は、溶媒に溶けにくいアスファルテンや高い沸点を有する重質留分に適用できないため、アスファルテンの分子モデル作成においては、Quantitative Molecular Representation (QMR) 法を適用した。これにより、一般的に分子構造が確立されていないアスファルテンや、構成分子数が膨大となる重質留分をモデル化することが可能となる。本研究では、得られた分子モデルを用いて分子動力学法によりアスファルテンの凝固エネルギーを評価した。

凝固エネルギーは分子間距離の関数として定義される平均力ポテンシャル (PMF potential of mean force) から得られる。PMF は、2 つのアスファルテン分子をある距離だけ離して、両者間での相互作用力を計算し、その力を生み出しているポテンシャルエネルギーに対応する値である。この計算において、本研究ではアンブレラサンプリング法を用いた。

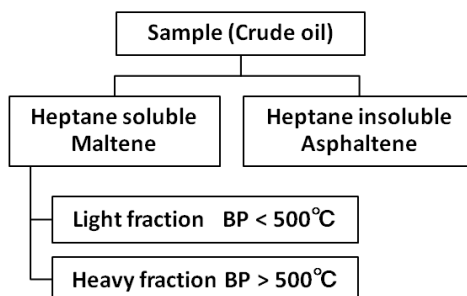


図-1 本研究で用いた原油の分析方法

3. 研究内容及研究成果

今回抑制剤としては、ヘプタン、キシレン、ベンゼン、トルエン、イソプロピルアルコール(IPA)および IPA とトルエンの共沸混合物の 6 種類を候補として 300K、100bar の条件下でアスファルテン凝固エネルギーを計算した。得られた凝固エネルギーの値を表 1 に示す。

表 1 より芳香族の性質を持つキシレン、ベンゼン、トルエン中においてアスファルテンの凝固エネルギーの絶対値が小さくなっており、アスファルテンが凝固しにくいことが明らかになった。一方、図 2 に示すとおり、直鎖構造をもつヘプタン、IPA 中では、凝固エネルギーの値が大きくなった。Hansen の溶解パラメータの考え方に基けば、芳香環が多く結合したアスファルテンは芳香族系のキシレン、ベンゼン、トルエンに溶解しやすいと予測でき、本研究で得られた計算結果はその予測が正しいことを示している。また、トルエンと IPA の共沸混合物では、凝固エネルギーの絶対値はトルエン単体の場合とほぼ変わらなかった。しかしながら、IPA を混合することでトルエンの量を少なくすることが可能になると考えられ、IPA の混合は実用上での一つのオプションになると考えられる。

表 1 各アスファルテン抑制剤候補の凝固エネルギーの計算結果

抑制剤	ヘプタン	キシレン	ベンゼン	トルエン	IPA	IPA+ トルエン
凝固エネルギー (kJ/mol)	-8.9	-4.2	-4.4	-4.5	-7.8	-4.3

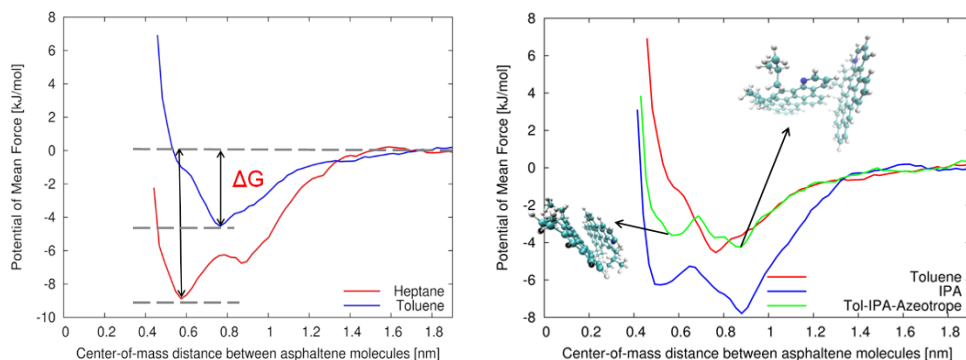


図-2 PMF プロファイルと凝固エネルギー

4. 謝 辞

本研究は、国際石油開発帝石(株)により委託されたものである。関係各位の協力と助言に厚く感謝申し上げます。