



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

ООП Цифровые технологии в проектировании нефтегазохимических производств

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

### ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРАНТА

Тема работы
<b>Моделирование процесса разделения водонефтяных эмульсий</b>

УДК 665.614.066.3

Обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Котельников Александр		

**Руководитель ВКР**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Долганов Игорь Михайлович	К.Т.Н.		

### КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Креницына Зоя Васильевна	К.Т.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООД ШБИП	Сечин Андрей Александрович	К.Т.Н.		

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП, должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Долганов Игорь Михайлович	К.Т.Н.		

**ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП**  
**по образовательной программе «Цифровые технологии в проектировании**  
**нефтегазохимических производств»**  
**Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология**

Код компетенции СУОС	Наименование компетенции СУОС
<b>Универсальные компетенции</b>	
УК(У)-1	Способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действия
УК(У)-2	Способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способность организовывать и руководить работой команды, выработывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>	
ОПК(У)-1	Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок
ОПК(У)-2	Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
ОПК(У)-3	Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку
ОПК(У)-4	Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты
<b>Профессиональные компетенции</b>	
ПК(У)-1	Способность организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей
ПК(У)-2	Готовность к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи
ПК(У)-3	Способность использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
<b>Дополнительные профессиональные компетенции (профессиональные компетенции, установленные университетом)</b>	
ДПК(У)-1	Готовность к решению профессиональных производственных задач – контролю технологического процесса, разработке параметров проведения технологического процесса, разработке технологических расходных коэффициентов сырья и материалов, энергоресурсов, к выбору основного и вспомогательного оборудования
ДПК(У)-2	Способность использовать математические модели и пакеты прикладных программ для описания и прогнозирования различных явлений
ДПК(У)-3	Способность проводить технологические и технические расчеты по проектам, технико-экономический анализ проекта
ДПК(У)-4	Способность разрабатывать учебно-методической документации для реализации образовательных программ



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП/ОПОП

\_\_\_\_\_ Долганов И.М.  
(Подпись) (Дата) (ФИО)

### ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
2ДМ14	Котельников Александр

Тема работы:

<b>Моделирование процесса сепарации многокомпонентных систем с учетом содержания в составе смеси полярных веществ</b>	
Утверждена приказом директора ИШПР (дата, номер)	№ 31-65/с от 31.01.2023 г.

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	01.06.2023 г.
--	---------------

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<b>Исходные данные к работе</b>	Физико-химические свойства водонефтяной эмульсии. Технологические параметры установки обезвоживания водонефтяной эмульсии.
<b>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке</b>	Введение 1 Литературный обзор 1.1 Классификация и образование водонефтяных эмульсий 1.2 Стабильность водонефтяных эмульсий. Эмульгаторы и их классификация 1.3 Взаимодействие между различными молекулами на границу раздела: от макро- до микромасштаба 1.3.1 Теория DLVO 1.3.2 Измерение взаимодействий между фазами: атомно-силовая микроскопия 1.3.3 Визуализация молекулярных взаимодействий: молекулярно-динамическое моделирование 1.3.4 Молекулярно-ориентированное распознавание 1.4 Механизмы разрушения эмульсии 1.5 Технологии разделения водонефтяных эмульсий

	<p>1.6 Математическое моделирование процесса разделения водонефтяной эмульсии с использованием деэмульгатора природного происхождения</p> <p>1.7 Моделирование эффективности сепарации эмульсии нефть-вода в трехфазном сепараторе</p> <p>2 Объект и методы исследования</p> <p>2.1 Лабораторные исследования процесса осаждения и коалесценции капель воды в нефтяной среде</p> <p>3 Расчет и аналитика</p> <p>3.1 Определение плотности нефти при заданных условиях процесса</p> <p>3.2 Определение вязкости нефти и воды при заданных условиях протекания процесса</p> <p>3.3 Расчет плотности и вязкости эмульсии</p> <p>3.4 Определение максимального диаметра капли воды и распределения капель</p> <p>3.5 Определение остаточного содержания воды</p> <p>3.6 Влияние основных параметров на значение остаточной обводненности</p> <p>3.6.1 Влияние физико-химических свойств нефти и воды</p> <p>3.6.2 Влияние технологических параметров на показатели остаточной обводненности</p> <p>4 Финансовый менеджмент , ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p> <p>5 Социальная ответственность</p> <p>Заключение</p>
--	---

<b>Перечень графического материала</b>	Нет
--	-----

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы**

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	к.т.н., Доцент ОСГН ШБИП Креницына З.В.
Социальная ответственность	к.т.н., Доцент ООД ШБИП Сечин А.А.

**Названия разделов, которые должны быть написаны на иностранном языке:**

«The main developers of mathematical models of oil treatment processes in Russia and foreign countries»

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	01.02.2023 г.
---	---------------

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Долганов И.М.	к.т.н.		

**Задание принял к исполнению обучающийся:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Котельников Александр		

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
 федеральное государственное автономное  
 образовательное учреждение высшего образования  
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа природных ресурсов  
 Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология  
 Уровень образования Магистратура  
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии  
 Период выполнения Весенний семестр 2022/2023 учебного года

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН**  
**выполнения выпускной квалификационной работы**

Обучающийся:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ14	Котельников Александр

Тема работы:

<b>Моделирование процесса разделения водонефтяных эмульсий</b>
--

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	01.06.2023 г.
--	---------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
10.02.2023 г.	Введение и актуальность работы	5
15.03.2023 г.	Литературный обзор: описание основных физико-химических свойств эмульсий. Рассмотрение и сравнение способов разделения водонефтяных эмульсий. Анализ некоторых способов математического описания процесса разделения.	20
25.04.2023 г.	Анализ объекта и выбор метода исследования. Описание основных программ для разработки математической модели, а также описание лабораторной установки по определению скорости осаждения капель различного размера.	20
20.05.2023 г.	Методика расчета остаточной обводненности нефти в зависимости от физико-химических свойств воды и нефти, а также проведение анализа влияния отдельных параметров на значение остаточной обводненности.	20
27.05.2023 г.	Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение», Раздел «Социальная ответственность».	10
29.05.2023 г.	Заключение	10
01.06.2023 г.	Оформление ВКР	15

**СОСТАВИЛ:**

**Руководитель ВКР**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Долганов Игорь Михайлович	К.Т.Н.		

**СОГЛАСОВАНО:****Руководитель ООП**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Долганов Игорь Михайлович	К.Т.Н.		

**Обучающийся**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Котельников Александр		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И  
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ14	Котельников Александр

<b>Школа</b>	<b>Инженерная школа природных ресурсов</b>	<b>Отделение школы (НОЦ)</b>	<b>Отделение химической инженерии</b>
<b>Уровень образования</b>	магистратура	<b>Направление/специальность</b>	18.04.01 Химическая технология

**Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:**

<i>1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Бюджет проекта – не более 7 000 000 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 3 500 000 руб.</i>
<i>2. Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Значение показателя интегральной эффективности – не менее 4,5 из 5.</i>
<i>3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>- Районный коэффициент – 1,3; - Накладный расходы – 80 %; - Отчисления во внебюджетные фонды – 30,5 %;</i>

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

<i>1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	<i>Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Оценка перспективности проекта в сравнении с аналогами.</i>
<i>2. Разработка устава научно-технического проекта</i>	<i>Приведение цели и результатов проекта. Разработка требований к результатам проекта.</i>
<i>3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>Определение иерархической структуры работ проекта. Составление календарного плана-графика работ. Оценка бюджета научного исследования. Оценка и сравнение себестоимости проекта с аналогами.</i>
<i>4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	<i>Проведение сравнительной оценки эффективности исследования. Расчет интегральных показателей эффективности разработки.</i>

**Перечень графического материала:**

1. Сегментирование рынка
2. Оценка конкурентоспособности технических решений
3. Диаграмма Исикавы
4. Иерархическая структура работ проекта
5. Диаграмма Ганта
6. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Котельников Александр		



## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 2ДМ14		ФИО Котельников Александр	
Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	<b>18.04.03 «Химическая технология»</b>

Тема ВКР:

<i>Моделирование процесса разделения нефтяной эмульсии</i>	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
<p><b>Введение</b> Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации</p>	<p><i>Объект исследования: математическая модель расчета остаточной обводненности. Область применения: нефтегазовое дело, химическая технология. Рабочая зона: офис. Количество и наименование оборудования рабочей зоны: персональный компьютер, ноутбук. Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне: печать текста, расчеты на листах бумаги.</i></p>
<b>Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:</b>	
<p><b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при разработке проектного решения:</b> специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</p>	<p>СП 2.2.3670-20 «Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда». Федеральный закон от 28 декабря 2013 г. N 426-ФЗ «О специальной оценке условий труда». ГОСТ 12.1.005-88. ССБТ. «Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны». СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы». СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий». Трудовой кодекс РФ (ТК РФ) от 30.12.2001 N 197-ФЗ.</p>
<p><b>2. Производственная безопасность при разработке проектного решения:</b> Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора</p>	<p><b>Опасные производственные факторы:</b> 1. Поражение электрическим током. <b>Вредные производственные факторы:</b> 1. Монотонность труда; 2. Повышенный уровень шума; 3. Наличие электромагнитного излучения; 4. Электростатическое поле; 5. Запыленность воздуха рабочего помещения; 6. Неравномерное распределения яркости в поле зрения. 7. Отсутствие или недостаток искусственного освещения. <b>Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов:</b> Отсутствуют. <b>Расчет:</b></p>

	Расчет системы искусственного освещения.
<b>3. Экологическая безопасность <u>при разработке проектного решения:</u></b>	Воздействие на селитебную зону отсутствует. Воздействие на литосферу: использованные литиевые батарейки и аккумуляторы для ноутбука. Твердые отходы. Воздействие на гидросферу отсутствует. Воздействие на атмосферу: тепловое излучение стационарных ПЭВМ и станций электроснабжения..
<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях <u>при разработке проектного решения:</u></b>	Возможные ЧС: обрушение здания, отключение электроэнергии, пожар Наиболее типичная ЧС: отключение электроэнергии
<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения общетехнических дисциплин	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Котельников Александр		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 151 с., 25 рис., 31 табл., 153 источников, 4 прил.

Ключевые слова: эмульсия, отстаивание, обезвоживание, разделение водонефтяной эмульсии, отстойник, сепаратор, математическое моделирование

Работа представлена введением, 5 разделами и заключением, приведен список использованных источников.

Объектом разработки является расчетный модуль на языке программирования Python для расчета процессов обезвоживания водонефтяной эмульсии в зависимости от физико-химических свойств нефтяного флюида.

Цель работы – разработать расчетный модуль процессов обезвоживания водонефтяных эмульсий.

В ходе работы проводились исследования текущих расчетных модулей для расчетов процессов обезвоживания водонефтяной эмульсии. Выявление достоинств и недостатков отечественных и зарубежных моделирующих систем. Приведен литературный обзор основных физико-химических свойств эмульсий, а также способов их разделения

В результате расчетов, разработанный модуль показывает результаты, которые могут быть научно-обоснованы. Все основные закономерности процесса соблюдаются, что может говорить о том, что модель составлена верно и реагирует на любые изменения исходных данных. Для предоставленной водонефтяной эмульсии была рассчитана остаточная обводненность нефти на выходе из рассматриваемого аппарата.

Область применения: непосредственно расчет процессов обезвоживания водонефтяных эмульсий, а также внедрение расчетного модуля в цифровые двойники процессов подготовки и переработки нефтяного сырья для расчетов основного отстойного оборудования и сепараторов,

создание программ-помощников для проектных офисов с целью сократить время на подбор необходимого оборудования.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в разработке собственного программного продукта для расчетов процессов промышленной подготовки нефти взамен ушедших с российского рынка импортных программных продуктов.

В будущем планируется внедрение других термодинамических пакетов, в частности Пенг-Робинсон, NRTL, CPA, а также расчет других физико-химических характеристик потока – энтропии, теплоемкости, и использование этих величин для расчета процессов, следующими за процессом обезвоживания нефти на установках подготовки нефти, а также на установках предварительного сброса воды с последующим нагнетанием насосов.

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	16
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР .....	18
1.1 Классификация и образование водонефтяных эмульсий .....	18
1.2 Стабильность водонефтяных эмульсий. Эмульгаторы и их классификация .....	23
1.3 Взаимодействия между различными молекулами на границе раздела: от макро- до микромасштаба .....	29
1.3.1 Теория DLVO .....	29
1.3.2 Измерения взаимодействий между фазами: атомно-силовая микроскопия .....	30
1.3.3 Визуализация молекулярных взаимодействий: молекулярно-динамическое моделирование .....	31
1.3.4 Молекулярно-ориентированное распознавание в настоящее время .....	33
1.4 Механизмы разрушения эмульсии .....	34
1.5 Технологии разделения водонефтяных эмульсий .....	39
1.6 Математическое моделирование процесса разделения водонефтяной эмульсии с использованием деэмульгатора природного происхождения .....	47
1.7 Моделирование эффективности сепарации эмульсии нефть-вода в трехфазном сепараторе .....	51
2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ .....	54
2.1 Лабораторные исследования процесса осаждения и коалесценции капель воды в водонефтяной эмульсии .....	56
3 РАСЧЕТ И АНАЛИТИКА .....	62
3.1 Определение плотности нефти при заданных условиях процесса .....	62

3.2	Определение вязкости нефти и воды при заданных условиях протекания процесса .....	63
3.3	Расчет плотности и вязкости эмульсии.....	65
3.4	Определение максимального диаметра капли воды и распределение капель.....	66
3.5	Определение остаточного содержания воды.....	67
3.6	Влияние основных параметров на значение остаточной обводненности .....	69
3.6.1	Влияние физико-химических свойств нефти и воды .....	70
3.6.2	Влияние технологических параметров на показатели остаточной обводненности .....	73
3.7	Пример оптимизации процесса .....	76
4	<b>ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ .....</b>	<b>78</b>
4.1	Потенциальные потребители результатов исследования.....	78
4.2	Оценочная карта .....	79
4.3	Диаграмма Исикавы.....	80
4.4	Мера готовности научной разработки и разработчика к коммерциализации .....	81
4.5	Выбор предпочтительного метода коммерциализации.....	82
4.6	Цель и результаты работы .....	83
4.7	Иерархическая структура работ проекта .....	84
4.8	Диаграмма Гантта .....	85
4.9	Бюджет научного исследования.....	86
4.9.1	Основная заработная плата .....	87
4.9.2	Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала.....	89
4.9.3	Отчисления на социальные нужды .....	90
4.9.4	Накладные расходы.....	90

4.9.5 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта .....	91
4.10 Оценка сравнительной эффективности исследования .....	92
4.11 Заключение по разделу финансовый менеджмент .....	93
5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ.....	95
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	96
5.2 Производственная безопасность.....	99
5.2.1 Расчет искусственного освещения для офисного помещения.....	105
5.3 Экологическая безопасность.....	107
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	109
5.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть при разработке объекта исследований .....	109
5.4.2 Мероприятия по предотвращению ЧС и порядок действий в случае возникновения ЧС .....	109
5.5 Заключение по разделу социальная ответственность .....	110
ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....	111
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	113
ПРИЛОЖЕНИЕ А .....	129
ПРИЛОЖЕНИЕ Б .....	148
ПРИЛОЖЕНИЕ В .....	150
ПРИЛОЖЕНИЕ Г .....	151

## ВВЕДЕНИЕ

Согласно данным Международного энергетического агентства (IEA) ожидается, что мировой спрос на нефть вырастет на 1,9 миллионов баррелей нефти в сутки в 2023 года до рекордных 101,7 миллионов баррелей в сутки, при этом половина прироста приходится на Китай [1]. В связи со сложившейся ситуацией вокруг санкций, Китай прогнозируется как основной покупатель Российской нефти.

Количество продаваемой нефти напрямую зависит от стадии подготовки нефти после её добычи на месторождениях. Также в нефтяной сфере наблюдается тренд на ресурсоэффективное производство. Математическое моделирование позволяет проводить полный анализ отдельных установок с целью получения максимального результата по производительности. Математическое моделирование и создание цифровых двойников процесса разделения водонефтяной эмульсии позволяет повысить эффективность установки подготовки нефти и снизить операционные затраты предприятия.

Продукция, добываемая из скважин на газовых, газоконденсатных и нефтяных промыслах представляет собой многофазную многокомпонентную систему. Тяжелая сырая нефть представляет собой сложную смесь с высоким соотношением смол и асфальтенов. Природные соединения поверхностно-активных веществ обычно встречаются в смоле и асфальтенах, что является основной причиной образования эмульсии в пластовых условиях.

В процессе вытеснения образующаяся эмульсия вода-в-нефти может легко увеличивать вязкость вытесняемой фазы и тем самым снижать ее подвижность в пористой среде [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]. Эмульсия — термодинамически нестабильная и кинетически стабильная жидкость; следовательно, в пластовых условиях эмульсия может самопроизвольно



подвергаться процессу разрушения за счет различных механизмов, таких как расслоение, седиментация, флокуляция, инверсия фаз и коалесценция [2, 3]. С точки зрения численного моделирования коллектора, создание математической модели важно для прогнозирования разрушения эмульсии.

Процессы обезвоживания и обессоливания нефти осложняются тем, что на начальных этапах разработки месторождения изменяется газовый состав, физические и химические свойства водонефтяной эмульсии и значительно увеличивается концентрации воды в нефти. Для прогнозирования технологических процессов с учетом наиболее значимых факторов используют как строгие инженерные математические модели, так и пакеты моделирования, включающие широкий спектр различных методик.

Для того, чтобы создать моделирующую систему, необходимо провести анализ имеющихся программ и выделить их слабые и сильные стороны. Данная работа направлена на исследование подходов математического моделирования процессов подготовки нефти в зависимости от физико-химических свойств флюида. Рассмотрены основные типы математических моделей процессов подготовки нефти, а также приведен сравнительный анализ имеющихся программ от зарубежных и отечественных разработчиков.

Помимо анализа существующих программных обеспечений, была разработана математическая модель процесса отстаивания нефти, которая позволяет рассчитать остаточную обводненность нефти в зависимости от ФХС нефти, а также параметров оборудования и параметров процесса.

# 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

## 1.1 Классификация и образование водонефтяных эмульсий

Эмульсии можно разделить на несколько категорий в зависимости от различных факторов [9]. Доступны три распространенных типа эмульсий [10]: эмульсия вода-в-нефть (В/Н), эмульсия нефть-в-воде (Н/В) и множественная эмульсия. Множественная эмульсия также называется сложной эмульсией. К сложным эмульсиям относятся эмульсии состоящие из диспергированных капель, которые содержат внутри себя более мелкие капли внутри. Распространенными двойными эмульсиями являются эмульсии нефть-в-воде-в-нефти (Н/В/Н) и эмульсии вода-в-нефти-в-воде (В/Н/В). Классификация эмульсий показана на рисунке 1.1 [11].

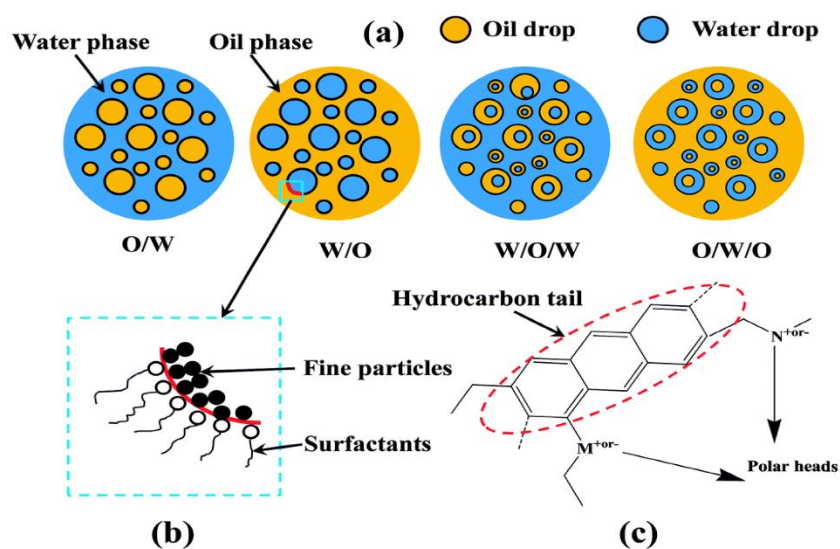


Рисунок 1.1 – Схематическая классификация водонефтяных эмульсий. (a) – Эмульсии, образующиеся при добыче и транспортировке сырой нефти, (b) – Образование пленок на границе раздела фаз, (c) – поверхностная активность молекул асфальтенов.

Многие исследователи классифицировали эмульсии в соответствии с их различными свойствами, которые описаны в таблице 1.1. Некоторые исследователи выделяли категории микроэмульсий в соответствии с фазовым

равновесием, которое показано в таблице 1.2 [12, 13]. В основном, макроэмульсия отличается от микроэмульсии в нескольких аспектах [14]. Во-первых, в макроэмульсии диспергированные капли масла или воды контактируют друг с другом через межфазную пленку (граница раздела — другая фаза), а в микроэмульсии мелкие диспергированные капли не могут контактировать друг с другом. Во-вторых, макроэмульсия непрозрачна, а микроэмульсия оптически прозрачна. Различия между макроэмульсией и микроэмульсией показаны в таблице 1.3.

Таблица 1.1 – Различные категории эмульсии по некоторым исследованиям

<b>Автор исследования</b>	<b>Основной тезис</b>	<b>Категория эмульсии</b>	<b>Описание исследования</b>
Vansbach [10]	Размер капель в дисперсной фазе	Плотная и рассыпчатая эмульсия	К густым эмульсиям относятся эмульсии, содержащие очень мелкие капли в дисперсной фазе и не разделяющиеся полностью в течение нескольких часов из-за их особой структуры. Сыпучие эмульсии, с другой стороны, содержат относительно крупные капли в дисперсной фазе, что позволяет разделить их в течение нескольких минут.
Fingas et al. [15]	Стабильность и реологические измерения	Стабильная В/Н эмульсия. Мезостабильная эмульсия вода в нефти.	Считается, что эмульсии находятся в стабильном и мезостабильном состояниях [16]. Асфальтены и смолы образуют прочную и стабильную вязкоупругую межфазную пленку. Мезостабильные эмульсии — это эмульсии между стабильным и нестабильным

Автор исследования	Основной тезис	Категория эмульсии	Описание исследования
		Нестабильная эмульсия водна в нефти.	состояниями, которые не полностью стабилизировались из-за недостаточного содержания асфальтенов, что приводит к возможности деградации.
Friberg et al. [17, 18]	Размер капель в дисперсной фазе	Макро- и микроэмульсии	<p>Как правило, большинство эмульсий являются макроэмульсиями. Размер диспергированных капель в макроэмульсиях обычно превышает 0,1 мкм. Термодинамически они нестабильны, поскольку масляная и водная фазы имеют тенденцию к слиянию и, наконец, к разделению с течением времени из-за уменьшения межфазной энергии.</p> <p>Размер капель в микроэмульсиях обычно составляет менее 10 нм. Он образуется из-за очень низкой межфазной энергии двух несмешивающихся жидкостей. Микроэмульсия считается термодинамически стабильной смесью.</p>

Таблица 1.2. Четыре типа микроэмульсий в зависимости от термодинамического равновесия.

Номер	Фазовые равновесия	Описание
I	Нефть в воде	Этот тип эмульсии содержит водорастворимое поверхностно-активное вещество, и поверхностно-

Номер	Фазовые равновесия	Описание
		активное вещество существует в воде при образовании мономеров (Winsor I).
II	Вода в нефти	Этот тип эмульсии содержит растворимое в нефти поверхностно-активное вещество, и нефтяная фаза, богатая поверхностно-активным веществом, существует одновременно с водой. (Винзор II).
III	Трехфазная система	Ее также называют среднефазовой микроэмульсией. Средняя фаза богатого поверхностно-активного вещества сосуществует с избытком воды и нефти (Winsor III).
IV	Мицеллярный раствор	Добавление достаточного количества поверхностно-активного вещества и спирта может привести к образованию изотропного раствора взвешенных однофазных мицелл.

Таблица 1.3. Сравнение свойств макроэмульсий и микроэмульсий.

Свойство	Макроэмульсия	Микроэмульсия
Прозрачность	Мутный.	Оптически прозрачный.
Размер капли	Менее 0,1 нанометра.	От 0,01 до 0,1 микрометра.
Форма капли	Как правило, сферическая.	Сферическая.
Термодинамическая стабильность	Нестабильная, расслоение после центрифугирования.	Стабильная.

Водонефтяные эмульсии образуются в результате многих промышленных процессов, включая добычу нефти (эксплуатация, переработка, хранение и транспортировка нефти, нефтешламов и т. д.) [19],

выплавку чугуна и стали (вода для прокатки стали и смазочно-охлаждающие жидкости, и др.) [20], угледобыча, пищевая промышленность и др. В таблице 1.4 приведены сводные данные о распространенных типах водонефтяных эмульсий в различных отраслях промышленности.

Таблица 1.4. Распространенные типы эмульсий в различных отраслях промышленности.

<b>Тип промышленности</b>	<b>Распространенные типы эмульсии</b>	<b>Описание</b>
Нефтедобыча	Вода в нефти, нефть в воде	Длительная эксплуатация нефтяного месторождения приводит к постепенному переходу добываемого флюида от эмульсии типа вода/нефть к эмульсии типа нефть/вода.
Угольная промышленность	Вода в нефти, нефть в воде, ил (шлам)	Сточные воды образуются в процессе сжижения и газификации угля, в котором компоненты устойчивы к разложению.
Металлургия	Вода в нефти, нефть в воде	Отработанное гидравлическое масло, отработанное смазочное масло, смазочно-охлаждающая жидкость, охлаждающая жидкость и т. д.
Пищевая промышленность	Вода в нефти, нефть в воде, многослойные эмульсии, эмульсия Пикеринга	Различные пищевые продукты, как натуральные, так и искусственные, частично или полностью существуют в виде эмульсий или в эмульгированной форме в определенные моменты производственного процесса, включая молоко, сливки, морсы, детские смеси, супы, тесто для тортов, заправки для салатов, майонез, сливочные приправы, десерты, сливки для салата, мороженое, отбеливатели для кофе, спреда, масло и маргарин [21, 22]. Эмульсии Пикеринга, стабилизированные белком, в

Тип промышленности	Распространенные типы эмульсии	Описание
		пищевой промышленности имеют три основных применения, включая приготовление пастообразных продуктов, инкапсуляцию биоактивных компонентов и защиту липидов [23].

Эмульсии Н/В и В/Н широко распространены в нефтяной промышленности, а эмульсии Н/В, как правило, сопровождаются добычей нефти. Перед последующей переработкой в сырую нефть часто добавляют воду для обессоливания, в результате чего образуются эмульсии типа вода/нефть. Затем эти эмульсии деэмульгируют на две фазы [24]. В этих эмульсиях содержится около 30 – 50 масс.% нефти, 10 – 12 масс.% твердых веществ и 30 – 50 масс.% воды [25]. Твердые частицы могут улучшить стабильность эмульсии, адсорбируясь на межфазной пленке, что значительно затрудняет разделение эмульсий [26].

## 1.2 Стабильность водонефтяных эмульсий. Эмульгаторы и их классификация

Эмульгаторы являются основной причиной долговременной стабильности водно-масляных эмульсий. Они могут образовывать стабильную пленку на границе раздела нефть-вода, уменьшая межфазное натяжение и предотвращая слияние капель. Как правило, эмульгаторы можно разделить на три категории: низкомолекулярные эмульгаторы, макромолекулярные эмульгаторы и твердые вещества, как показано на рисунке 1.2 и в таблице 1.5.

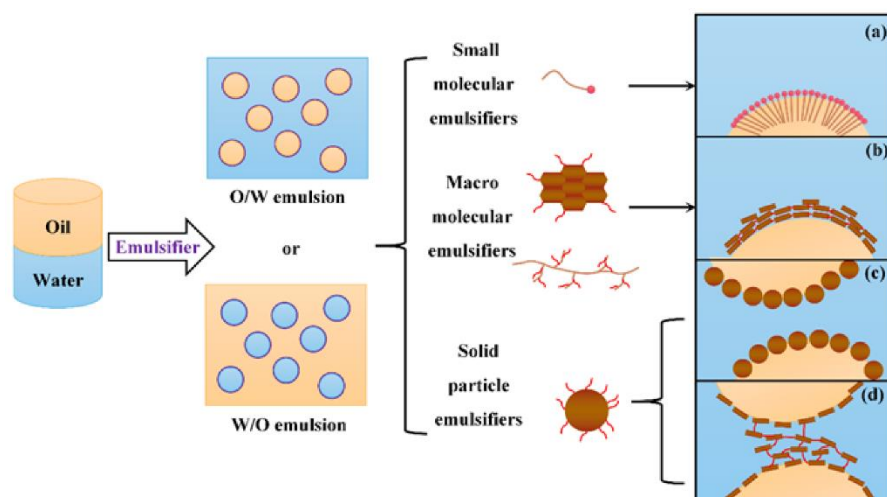


Рисунок 1.2 - Морфология межфазной пленки с различными эмульгаторами: (а) низкомолекулярными эмульгаторами, (б) макромолекулярными эмульгаторами, (в) твердыми частицами, (г) трехмерной сетчатой структурой.

Эмульгаторы, наиболее часто встречающиеся на практике, представляют собой низкомолекулярные поверхностно-активные вещества, содержащие гидрофильные и гидрофобные группы. Большинство гидрофобных групп представляют собой алкильные цепи. Поверхностно-активные вещества можно разделить на различные типы в соответствии с различным зарядом гидрофильных групп, включая анионные [27, 28, 29, 30], катионные [31, 32], цвиттерионные [33, 34] и неионогенные поверхностно-активные вещества [35]. Обычно поверхностно-активное вещество имеет низкую молекулярную массу (менее 1000). Он имеет тенденцию образовывать мономолекулярную пленку на границе раздела нефть-вода, которая имеет ориентированное расположение [36, 37], как показано на рисунке 1.2. Адсорбция одного молекулярного эмульгатора может быть выражена теоремами адсорбции Гиббса или Ленгмюра [38, 39].

Мономолекулярная пленка представляет собой простейший образец агрегации эмульгаторов на границе раздела нефть-вода. Однако на практике межфазная пленка обычно имеет более сложную морфологию. Если взять, к примеру, нефтяную промышленность, то эмульгаторы представляют собой в



основном натуральные тяжелые компоненты. Асфальтены являются наиболее типичным и наиболее распространенным представителем ПАВ [40, 41]. По результатам некоторых исследований выяснили, что существует особый подкомпонент, который имеет решающее значение для стабилизации эмульсии В/Н, который был назван межфазно-активным асфальтеном (МАО) [42, 43]. Это явление напрямую связано с образованием высокоустойчивой многослойной межфазной пленки, как показано на рисунке 1.2.

Супрамолекулярная пленка представляет собой объединение макромолекул, а морфология представляет собой сшитые мультислои или другие надмолекулярные структуры [44]. Асфальтены состоят в основном из полициклических ароматических углеводородов, к которым присоединены множественные боковые цепи, содержащие электроотрицательные гетероатомы (например, кислород, азот, сера) [45, 46]. По сравнению с остальными асфальтенами МАО имеет большую молекулярную массу и более полярные группы (например, сульфоксид) [42, 47]. Полярные группы могут образовывать сильный положительный или отрицательный электростатический потенциал. В результате они облегчают образование межмолекулярных поперечных связей посредством водородных связей. Кроме того, благодаря гидрофильному свойству полярных групп они значительно повышают межфазную активность мультимолекулярной пленки. Взаимодействия между несколькими слоями представляют собой силы Ван-дер-Ваальса и  $\pi$ - $\pi$ -стекинг [48]. Таким образом, мультимолекулярная пленка обладает высокой стабильностью и хорошими механическими свойствами. Многослойная пленка эффективно предотвращает слипание плавающих капель.

Помимо МАО, многослойную пленку могут образовывать и другие высокомолекулярные (более 1000 г/моль) макромолекулярные эмульгаторы, такие как смолы, биологические макромолекулы [49, 50, 51, 52], полимерные поверхностно-активные вещества [53, 54, 55, 56] и т. д. Полимерные

поверхностно-активные вещества подразделяются на статистические, блочные и привитые полимеры, как показано в таблице 1.5.

Таблица 1.5. Примеры каждого вида эмульгаторов

Категория эмульгаторов	Вещество	Пример	Системы, в которых встречаются
Микромолекулярный эмульгатор	Простое ПАВ	<p>Анионогенные ПАВ: сульфатные [27], сульфонатные [28], фосфатные [29], карбоксилатные производные [30] и др.</p> <p>Катионные поверхностно-активные вещества: в основном аммоний [31, 32].</p> <p>Цвиттерионные ПАВ: анионные аммонийные [33], сульфобетаиновые ПАВ [34].</p> <p>Неионогенное поверхностно-активное вещество: преимущественно кислородсодержащее поверхностно-активное вещество [35].</p>	<p>Широко распространены в различных эмульгирующих системах, включая нефть, органический синтез, материалы, биологическую медицину, электрохимию, пищевую промышленность и др.</p>

Категория эмульгаторов	Вещество	Пример	Системы, в которых встречаются
Макромолекулярный эмульгатор	Компоненты тяжелой нефти	Межфазно-активный асфальтен.	Тяжелая нефть, нефтяной шлам.
	Биологические макромолекулы	Липид [49], белок [50], полисахарид.	Медицина, пищевая промышленность.
	Полимеры	Полимер, разветвленный полимер [56].	Органический синтез, медицина.
Твердые частицы, выступающие в качестве эмульгатора	Неорганические твердые частицы	Диоксид кремния (SiO <sub>2</sub> ), диоксид титана (TiO <sub>2</sub> ), оксид железа (Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ), монтмориллонит (ММТ), лапонит, слоистый биметаллический гидроксид и др.	Фармацевтическая промышленность, нефтегазовая промышленность, аэрокосмическая промышленность и др.
	Органические твердые частицы	Полимикродгелевые частицы, полиэтиленовые микросферы, блок-сополимерные мицеллы и т.д.	
	Твердые частицы с модифицированной поверхностью	Частицы сапонита лития, модифицированные амином [57] и др.	

Категория эмульгаторов	Вещество	Пример	Системы, в которых встречаются
	Частицы Януса	Полимерные частицы Януса (ПДВБ-ПНИПАМ) [58], полимерные частицы Януса П2ВН-ПАА/ПЭО [59] и др.	

Эмульсия Пикеринга определяется как эмульсия, стабилизированная твердыми частицами, адсорбированными на границе раздела нефть-вода. Различная смачиваемость обусловлена различными ориентационными свойствами кристаллических решеток. Эмульгаторы в виде частиц могут быть неорганическими твердыми частицами, органическими твердыми частицами, твердыми частицами с модифицированной поверхностью и частицами Януса. Твердые частицы с модифицированной поверхностью получают методами физической адсорбции, химической привитой полимеризации и другими методами [60]. Поверхность частиц Януса имеет анизотропию.

На рисунке 1.2 (с) и (d) показаны два основных фактора, обуславливающих высокую стабильность эмульсии Пикеринга, а именно: пленка твердых частиц на границе раздела нефть-вода [61] и формирование трехмерной сетчатой структуры [62]. Теория пленки на границе раздела твердых частиц также известна как теория механического барьера. Согласно этой теории, твердые частицы как эмульгаторы плотно располагаются на поверхности капель эмульсии, образуя плотную пленку на границе нефть-вода. Кроме того, существует трехмерная сетчатая структура в эмульсиях Пикеринга, стабилизированных бентонитовой и монтмориллонитовой почвой. Эти барьеры усиливали эффект отталкивания между каплями и, таким образом, повышали стабильность эмульсий Пикеринга.

## 1.3 Взаимодействия между различными молекулами на границе раздела: от макро- до микромасштаба

На рисунке 1.3 показаны различные этапы исследования стабильности эмульсии. Как известно, стабильность эмульсий определяется взаимодействием между фазами.

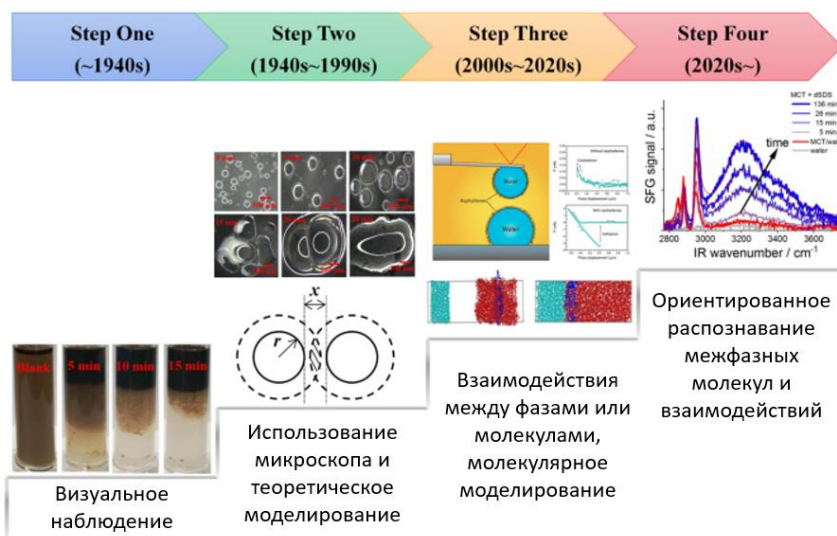


Рисунок 1.3 - Этапы исследования устойчивости эмульсий

### 1.3.1 Теория DLVO

Теория DLVO (названная в честь Дерягина, Ландау, Вервея и Овербека) — одна из наиболее классических интерпретаций количественного анализа термодинамики эмульсий. В этой теории притяжение Ван-дер-Ваальса и электростатическое отталкивание считаются критическими для стабильности взвешенных коллоидных частиц, показанных в уравнении (1.1) [63]:

$$V_T = V_A + V_R; \quad (1.1)$$

где  $V_T$  - полная потенциальная энергия между коллоидными частицами,  $V_A$  - потенциальной энергии, создаваемая силой Ван-дер-Ваальса,

$V_R$  - потенциальная энергия, создаваемая электростатическим отталкиванием. Два типа взаимодействий вместе называются силами DLVO. На  $V_A$  и  $V_R$  влияют многие факторы, такие как форма частиц, среда растворителя и т. д.

Традиционная теория DLVO показывает хорошую интерпретируемость для простых эмульсий нефть в воде, поскольку электростатический двойной слой в основном способствует стабильности капель воды. Однако применительно к другим эмульсиям точность предсказания будет ограниченной. Теория DLVO получила дальнейшее развитие во многих исследованиях. Существует расширенная теория DLVO, включающая гидрофильные и гидрофобные взаимодействия, которая определяет с высокой точностью стабильность эмульсий, образованных битумом [64]. Связанная теория DLVO с уравнением Оттевилла и Уокера для вклада стерического отталкивания, которое хорошо использовалось для прогнозирования стабильности смешанной эмульсии Н/В, стабилизированной фосфолипидом и неионогенным поверхностно-активным веществом [65]. К настоящему времени теория ДЛФО получила развитие во многих областях.

### **1.3.2 Измерения взаимодействий между фазами: атомно-силовая микроскопия**

Ограничением теории DLVO является природа взаимодействий. Теория была разработана по мере того, как исследования приближались к микромасштабу. На поздних этапах изучения некоторые исследования подтвердили важное влияние сил, не связанных с DLVO (т. е. структурных сил, сил гидратации, тепловых флуктуаций) на эмульсии, наблюдая влияние концентрации соли на явление многофазности [66]. Атомно-силовая микроскопия (АСМ) — это технология очень высокого разрешения для измерения микровзаимодействий между молекулами. Разрешение может

достигать нанометрового уровня. Хотя операции, направленные на многофазные жидкости, сложны, АСМ по-прежнему играет решающую роль в изучении эмульсий, что отражается в следующих аспектах:

1. Во-первых, АСМ может количественно определять взаимодействие между фазами. В 2004 году проводили эксперименты, в которых прикрепляли капли масла к концу кантилевера АСМ и отслеживали взаимодействие между каплями в зависимости от межкапельного разделения [67]. В том же году ученые измеряли силы взаимодействия между каплями алкана в водном растворе [68]. В 2017 году применялся данный метод к системам вода в нефти и исследовалась роль адсорбированных асфальтенов в межфазной адгезии [69]. Представленные исследования дают количественную информацию о стабильности эмульсий.

2. Кроме того, АСМ совершенствует теоретическую систему науки о коллоидах. Объединение АСМ с расширенной теорией DLVO позволяет выявить механизмы стабильности капель битума [70]. Измеренные параметры прекрасно согласуются с расчетными.

3. Кроме того, АСМ способствует рациональному описанию функциональных эмульсий. В основном это отражено в наноэмульсиях в пищевой промышленности [71, 72], которые лучше усваиваются пищеварительной системой.

### **1.3.3 Визуализация молекулярных взаимодействий: молекулярно-динамическое моделирование**

Молекулярное моделирование — это технология, которая детально исследует науку на молекулярном уровне, чего не может реализовать большинство инструментов. Методы включают молекулярную динамику (МД) [73], квантовую механику [74] и моделирование Монте-Карло [75], из которых методы молекулярной динамики является наиболее изученными.

Основная идея состоит в том, чтобы записать потенциалы межмолекулярного взаимодействия в файлы силовых полей и использовать их для анализа молекулярных систем.

Результаты моделирования следуют качественным или количественным принципам. Качественный анализ фокусируется на визуализации молекулярного процесса в виде моментальных снимков моделирования и межфазной молекулярной ориентации [76]. Параметры оценки являются ключом к количественному анализу и могут быть разделены на два типа. Некоторые типы параметров являются предсказаниями на основе макроскопических данных (т. е. межфазное натяжение, толщина межфазной пленки [77, 78, 79]). В данном разделе приводится объяснение нескольких важных микропараметров.

1. Функция радиального распределения (RDF, или  $g(r)$ ). RDF описывает, как плотность изменяется в зависимости от расстояния от эталонного атома, что может отражать взаимодействие между эталонными атомами и статистическими атомами. Данный параметр рассчитывается по уравнению (1.2) [77].  $n_a(r)$  — количество частиц внутри сферического контейнера на расстоянии  $r$  от контрольной точки  $b$ .  $\Delta r$  и  $\rho_a$  обозначают толщину контейнера и плотность атомов в пространстве соответственно.  $g(r)$ - $r$  функциональные диаграммы применяются для анализа [77, 79, 80]. Обычно в интервале (0,1 ÷ 1) нм существуют острые пики, которые генерируются взаимодействиями между эмульгаторами и объемной фазой. Прочность отражается максимальным значением  $g(r)$ , которое напрямую влияет на стабильность эмульсии.

$$g_{ab}(r) = \frac{n_a(r)}{4\pi r^2 \Delta r \rho_a}; \quad (1.2)$$

2. Нековалентные взаимодействия. Нековалентные взаимодействия — это общее обозначение межмолекулярных взаимодействий, отличных от ковалентных связей, включая электростатические взаимодействия (т. е. водородные связи), ван-дер-



ваальсовые взаимодействия, стерические взаимодействия и т. д. [21]. Эволюционирующие силовые поля проводят подходящие молекулярные потенциалы, которые наиболее точно их выражают. Кроме того, в нескольких исследованиях обсуждались детали нековалентных взаимодействий. Был изучен механизм смачивания амфифильных коллагеновых волокон методом МД-моделирования. Было обнаружено, что электростатические взаимодействия и взаимодействия Ван-дер-Ваальса являются движущими силами регионального смачивания в гидрофильной и гидрофобной областях соответственно [81].

Идеальные результаты напрямую связаны с точностью строящихся моделей, силовым полем и окружающей средой. Таким образом, трудность состоит в том, чтобы провести масштабный анализ виртуального моделирования и реального эксперимента.

#### **1.3.4 Молекулярно-ориентированное распознавание в настоящее время**

В настоящее время, с развитием точных инструментов, исследования межфазных молекул не ограничиваются виртуальным моделированием. Традиционные оптические характеристики, например, инфракрасная спектроскопия, не ограничены селективностью интерфейса. Сигналы, генерируемые молекулами в объемных фазах, намного сильнее, чем сигналы на границе раздела, что вызывает большие помехи для характеристики.

В последнее время нелинейная оптика облегчает исследования на границе раздела. Межфазные молекулы имеют направленное расположение, поэтому их можно распознать благодаря особым нелинейно-оптическим свойствам [82]. Наиболее типичной спектроскопической технологией является генерация суммарной частоты (SFG) [83] и ее производные, такие как

двумерная SFG [84], фазочувствительная SFG [85], SFG с гетеродинным детектированием [86] и т. д.

Трудно перейти от системы одной жидкой фазы к многофазной жидкость-жидкость. Поэтому маркировка изотопами часто применялось в качестве вспомогательного метода усиления характеристических пиков для получения критических параметров. В 2014 году изучались одномерная [87] и двумерная SFG границы раздела липидов/воды и предложены ограничения водородных связей на межфазные конформации воды. В 2021 году [88] проводились исследования, которые показали что поверхностно-активное вещество повышает степень упорядоченности межфазных молекул нефти, тем самым стабилизируя эмульсии. Они обнаружили, что сильные взаимодействия с переносом заряда возникают из-за межфазных водородных связей C-H...O, что повышает стабильность капель нефти в воде. Оба типа исследований использовали метод фазочувствительного SFG и изотопной маркировки.

#### **1.4 Механизмы разрушения эмульсии**

Эмульсии представляют собой термодинамически нестабильные системы, которые медленно изменяются. В изменении свойств эмульсии участвуют различные явления, в том числе седиментация, расслоение, флокуляция, созревание по Оствальду, коалесценция, агрегация и фазовое разделение. Эти явления могут возникать вместе или по отдельности [89]. Флокуляция означает, что капли в эмульсии собираются за счет взаимодействия притяжения с образованием хлопьев капель [90]. Коалесценция происходит, когда пленка разрывается между двумя каплями, и относится к комбинации капель [91]. Процесс постепенного роста из сросшихся капель в крупные определяется как созревание по Оствальду. В таблице 1.6 показаны различные явления во время процесса

деэмульгирования. Рисунок 1.4 показывает явление термодинамической деэмульгации в наноэмульсиях [92].

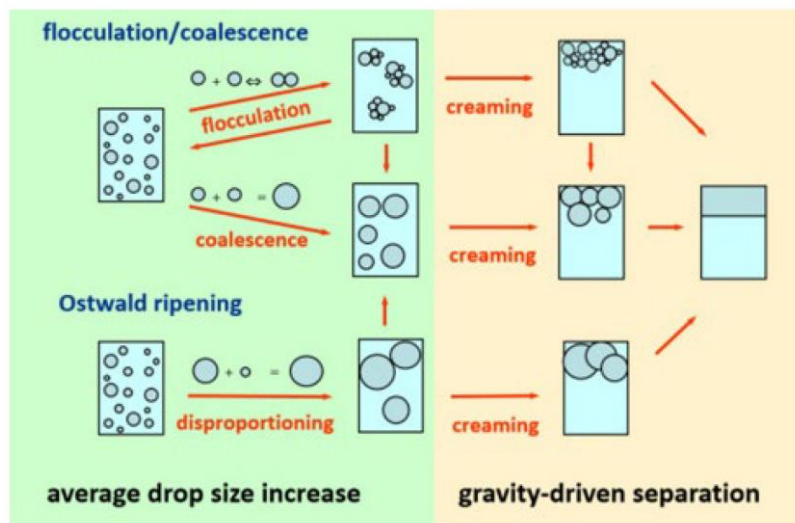


Рисунок 1.4 - Явление термодинамической деэмульгации в наноэмульсиях

Таблица 1.6 - Процессы деэмульгирования в эмульсиях типа В/Н и Н/В.

Процесс деэмульгирования	Определение	Детали процесса
Седиментация	Разница между плотностью воды и нефти вызывает падение капель воды под действием силы тяжести, а сила тяжести больше, чем плавучесть.	Зависят от разницы между плотностью нефти и воды.
Отстаивание (Creaming)	Разделение эмульсий на более плотные части (крем) и другие части без фактического разбивания.	
Флокуляция	Это относится к агломерации взвешенных капель в эмульсии или образованию хлопьев, которые могут ускорить коагуляцию капель и достичь цели разделения.	(а) Основная стадия жизни эмульсии, которая подразумевает дальнейшее старение и коалесценцию.

Процесс деэмульгирования	Определение	Детали процесса
		<p>(b)</p> <p>Зависит от структуры поверхностно-активного вещества и разницы между плотностью нефти и воды.</p> <p>(c)</p> <p>Происходит при разделении эмульсий Н/В.</p>
Коалесценция	<p>Две или более отдельные группы тянут друг друга, чтобы достичь малейшего контакта, процесс действует на смешивающиеся частицы.</p>	<p>Факторы, влияющие на межфазную пленку, включают вязкость, эластичность и динамику дренажа.</p>
Агрегация	<p>Это соответствует накоплению взвешенных капель.</p>	<p>Наиболее распространенный процесс, приводящий к нестабильности коллоидных систем.</p>
Созревание по Оствальду	<p>За счет растворения более мелких частиц продолжают расти более крупные частицы, увеличивая тем самым средний размер частиц.</p>	<p>Как правило, это опыт работы с эмульсиями вода/масло и другими жидкими или твердыми растворами.</p>
Разделение фаз	<p>Нефть и вода полностью разделяются на две отдельные фазы.</p>	<p>Зависит от времени и типа эмульгатора.</p>

Эффективное разделение эмульсий вода в нефти может быть достигнуто за четыре этапа [93]: (1) агрегация капель, (2) дренирование

межфазной мембраны, (3) разрыв межфазной мембраны и (4) коалесценция и осаждение капель [94], как показано на рисунке 1.5.

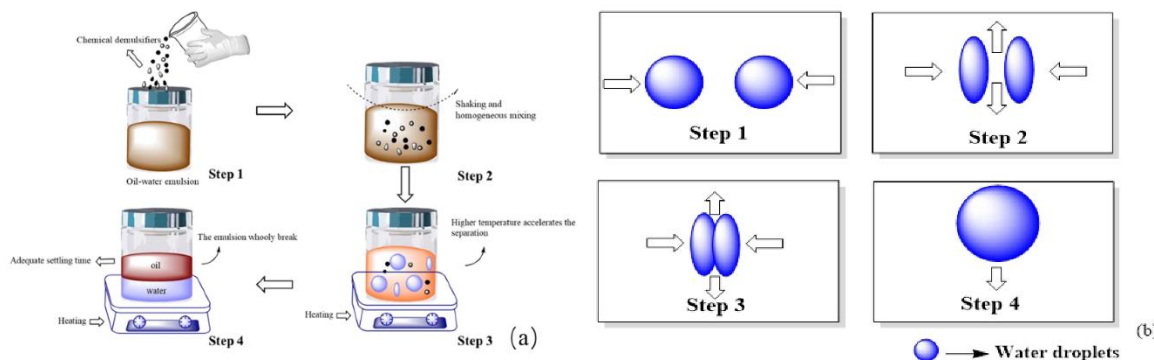


Рисунок 1.5 - Процессы разделения водонефтяной эмульсии: (а) - четыре этапа разделения водонефтяной эмульсии; (b) - общий процесс деэмульгации.

Существует множество параметров, влияющих на процесс химической деэмульгации, изменение которых может как повысить, так и понизить стабильность эмульсии. Например, температура [95], соленость [96], содержание воды и нефти [97] и т. д. До сих пор сообщалось о многочисленных механизмах химической деэмульгации. Однако до сих пор нет универсального вывода, который объясняется сложностью задействованных процессов дестабилизации (разнообразие знаний в области коллоидной химии, науки о поверхностно-активных веществах и явлениях интерфейса). Четыре популярные теории механизмов деэмульгации приведены в таблице 1.7.

Таблица 1.7 - Четыре общие теории химической деэмульгации.

Теория	Описание теории
Замена или перемещение [98, 99]	Поверхностно-активность деэмульгатора выше, чем у природных поверхностно-активных веществ в сырой нефти, поэтому деэмульгатор может заменить или вытеснить поверхностно-активные вещества на границе раздела нефть-вода, нарушая стабильность межфазной пленки.

Теория	Описание теории
Обратное действие [100]	Деэмульгатор может изменить тип эмульсии. В зависимости от свойств деэмульгаторов эмульсия Н/В и эмульсия В/Н превращаются друг в друга. Капли нефти и капли воды разделяются под действием силы тяжести.
Электростатическая адсорбция [101]	Деэмульгатор, имеющий заряд, противоположный межфазной пленке эмульсии, нейтрализует силу отталкивания между межфазными пленками, деэмульгируя эмульсию. Этот механизм обычно применяется к ионным деэмульгаторам.
Диспергирование-солюбилизация [102]	Некоторые виды деэмульгаторов обладают солюбилизирующим действием. Деэмульгатор в эмульсии образует мицеллы и растворяет поверхностно-активные вещества.
Коалесценция-флокуляция [103]	Молекулярная цепь деэмульгаторов может адсорбироваться на межфазной пленке капель и образовывать рыхлую таблетку с центром на деэмульгаторе, что увеличивает площадь контакта между каплями и вероятность столкновения.

Как правило, принцип действия деэмульгаторов заключается в снижении прочности межфазной пленки, направленной на эмульсию сырой нефти. Следовательно, необходимо выявить межфазное поведение материалов на границе раздела [104]. Под действием силы тяжести, перемешивания и тепловой конвекции две капли сближаются, и толщина пленки нефтяной фазы уменьшается. Во-первых, внутри пленки снижается концентрация молекул природного ПАВ, так как они накапливаются вне пленки из-за напряжения сдвига. Таким образом, пустота, оставленная поверхностно-активным веществом в пленке, обеспечивает места для адсорбции деэмульгаторов. Их адсорбция устраняет создаваемый градиент и улучшает дренирование пленки.

В конце концов, пленка становится очень тонкой, и капли сливаются из-за близости диспергированных капель [105].

Для эмульсий типа нефть в воде механизм деэмульгирования ионными деэмульгаторами подробно не объяснен. Одна из гипотез заключается в том, что катионные деэмульгаторы могут деэмульгировать эмульсии типа нефть в воде, стабилизированные анионными поверхностно-активными веществами, нейтрализуя их с образованием ионных пар [96]. Сообщалось также, что катионные ПАВ адсорбируются в полости между анионными ПАВ, а затем образуют ионные пары на самой границе раздела [106]. Сила электростатического отталкивания между диспергированными каплями нефти ослабевает, что позволяет каплям сливаться вместе, и в конечном итоге происходит фазовое разделение.

## **1.5 Технологии разделения водонефтяных эмульсий**

Технологии разделения водонефтяной эмульсии можно разделить на четыре категории: физический метод, химический метод, физико-химический метод и биохимический метод.

Физический метод основан на различии физических свойств, таких как фазовая плотность, проводимость и скорость звука. Основными методами являются гравитационное погружение, центробежный циклон, высоковольтный электростатический, высокочастотный импульс, микроволновое облучение, ультразвуковые волны, мембрана, экстракция на месте, газовая флотация и т. д.

В процессах химической деэмульгации в водонефтяные эмульсии следует вводить реагенты (например, деэмульгаторы, полимеризаторы) для разрушения прочной межфазной пленки и перевода состояния

эмульгирования в свободное состояние, тем самым добиваясь фазового разделения водомасляной эмульсии.

Процессы физико-химической деэмульгации представляют собой комбинацию процессов физического и химического разделения.

При биохимической деэмульгации для разрушения эмульсий используются биологические деэмульгаторы, вырабатываемые клеточными телами микроорганизмов.

Каждый метод разделения имеет свои особенности и применимые условия. Поэтому при выборе методов разделения следует всесторонне учитывать такие факторы, как свойства нефти, содержание воды, интенсивность эмульсии, а также диспергируемость и стабильность эмульсии. В таблице 1.8 показаны распространенные в промышленности технологии разделения водонефтяных эмульсий, их преимущества и недостатки.

Таблица 1.8 - Краткое изложение технологий разделения водонефтяных эмульсий.

<b>Способ разрушения эмульсии</b>	<b>Преимущества</b>	<b>Недостатки</b>
Центрифугирование	Высокая эффективность, меньшее время работы.	Высокая стоимость обслуживания и энергии для вращения.
Гидроциклон	Высокая эффективность, компактные модули, производительность для более мелких частиц нефти.	Высокая стоимость обслуживания и энергии, засорение.
Биодемульгация	Лучшая приспособляемость, высокая универсальность, нетоксичность,	Высокая стоимость.



Способ разрушения эмульсии	Преимущества	Недостатки
	экологичность, способность к разложению.	
Нагревание	Методы широко используются, просты в эксплуатации и эффективны при использовании в сочетании с другими методами.	Низкая эффективность, более длительное время, направленное на эмульсию Н/В с более высоким содержанием воды, часто используется в сочетании с другими методами.
Электрическая дегидратация		Возможность короткого замыкания, потребляет много энергии и увеличивает инвестиционные затраты.
Воздействие гравитации		Неудовлетворительный эффект деэмульгирования, большая потребность в оборудовании.
Воздействие микроволновых лучей	Высокая скорость, без эффекта гистерезиса.	Низкая скорость обезвоживания, длительное время отстаивания.
Воздействие ультразвука	Нет загрязнения, нет выбросов, низкое энергопотребление, сильная универсальность.	Сложности промышленного масштабирования, высокая стоимость оборудования.
Магнитная обработка	Больше подходит для очистки сточных вод.	В настоящее время находится на предварительной стадии исследования.

Способ разрушения эмульсии	Преимущества	Недостатки
Использование мембраны	Высокая эффективность, низкое энергопотребление, широкий спектр применения.	Низкий мембранный поток, небольшая производительность, засорение мембраны.
Извлечение на месте	Плавающую нефть можно непрерывно собирать с поверхности воды.	Высокая стоимость.
Газовая флотация	Более высокая эффективность, фиксированные части, надежность и долговечность, простота в эксплуатации.	Большое количество обезжиренного воздуха, задержка во времени разделения, большое количество генерируемого воздуха.

Химическая деэмульгация в основном достигается путем добавления в эмульсию химических деэмульгаторов с сильной межфазной активностью для достижения разделения. Данный метод обладает такими достоинствами, как отличные характеристики деэмульгирования, высокая эффективность, простота оборудования, экономичность и широкий спектр применения.

В методе физической деэмульсации как седиментация, так и центрифугирование используют разницу в плотностях и несмешиваемость нефти и воды для разрушения эмульсии. В гравитационном сепараторе к воде можно добавить NaCl, чтобы увеличить разницу плотностей между нефтяной и водной фазами и улучшить скорость плавания капель нефти [107]. Однако оборудование для разделения большое и дорогое, а эффективность разделения относительно низкая. Поэтому его обычно используют в сочетании с другими методами разделения.

При электродегидратации считается, что вода в эмульсии является полярным электролитом, который поляризуется под действием электрического поля. Под действием электрического поля разрыв межфазной пленки происходит в результате столкновения поляризованных капель. Соседние капли притягиваются друг к другу, образуя большие капли и способствуя разделению нефти и воды [108].

Ультразвуковой метод в основном основан на ультразвуковых волнах, которые представляют собой упругие механические волны с функцией механической вибрации и термодинамического взаимодействия. В процессе вибрации сырой нефти и капель воды вместе, капли воды сталкиваются и связываются друг с другом, что приводит к увеличению размера частиц. Между тем, вибрация снижает прочность межфазной пленки нефть-вода, что способствует разрушению эмульсии. Кроме того, термодинамическое взаимодействие ультразвуковых волн также может снижать вязкость сырой нефти. Ультразвуковой метод позволяет снизить температуру деэмульгирования и снизить потребление энергии. Однако по-прежнему ощущается нехватка крупнотоннажного промышленного оборудования [109].

Метод нагрева предназначен для ускорения столкновения и слияния капель. Метод нагревания применим к эмульсиям В/Н с более низким содержанием воды. Тем не менее, этот метод имеет недостатки, заключающиеся в высоких производственных затратах, нестабильной производительности и ограниченности процесса.

Микроволна представляет собой тип электромагнитной волны с частотой от 300 МГц до 300 ГГц, которая может генерировать переменное электрическое поле с частотой до сотен миллионов раз в секунду, а полярные молекулы под действием электромагнитного поля создают диполь для поляризации, приводящая к преобразованию внутренней энергии в тепловую энергию, что приводит к быстрому повышению температуры системы. Микроволновой метод по существу является косвенным методом нагрева, но

имеет преимущества высокой скорости, однородности, отсутствия температурного градиента и эффекта гистерезиса по сравнению с традиционным методом нагрева [110].

Газовая флотация применяется для введения в воду микропузырьков (иногда необходимо также добавление флотоагента или коагулянта), с помощью которых капли нефти (0,25 - 25 мкм) прикрепляются к пузырькам, образуя агрегаты. Эти агрегаты всплывают на поверхность за счет плавучести. Наконец, разделение нефти и воды осуществляется путем соскребания поверхностной пены. Эффективность разделения воздушной флотации определяется вероятностью столкновения пузырьков с нефтяным пятном. Следовательно, увеличение удельной поверхности пузырьков может повысить эффективность разделения.

Мембраны могут эффективно удалять мелкие не содержащие химикатов капли нефти (менее 40 мкм) с низким энергопотреблением, низкими затратами на техническое обслуживание и низкими требованиями к надежности и пространству [111] Однако основным недостатком технологии мембранной сепарации является нежелательное осаждение загрязнений на поверхности мембраны, что снижает скорость обработки и увеличивает энергозатраты.

Биологический метод основан на использовании микроорганизмов для потребления поверхностно-активных веществ, которые могут разрушить пленку на границе раздела нефть-вода. Метод имеет преимущества низкой концентрации, быстрого обезвоживания, высокой эффективности обезвоживания, разлагаемости и безвреден для окружающей среды. Однако исследования биологического метода в настоящее время являются незрелыми и дорогими в использовании. Дальнейшие исследования могут быть сосредоточены на высокоэффективных, адаптируемых и доступных биологических деэмульгаторах [112].

На рисунке 1.6 показана принципиальная схема сепаратора эмульсии сырой нефти, сочетающая методы термической и электрической деземulgации [113]. Устройство содержит камеру нагрева, камеру дегазации и электрическую камеру. Жаровые трубы оборудованы в камере нагрева и погружены в эмульсию [114]. Нагрев способствует снижению вязкости эмульсии сырой нефти и уменьшению сопротивления движению воды. Деземulgирование достигается при температуре около 80–85 °С. Затем жидкости перетекают в дегазационную камеру, откуда выходит газ. Далее нагретая эмульсия попадает в электрическую камеру, где под действием высоковольтного электрического поля могут сливаться мелкие капли воды.

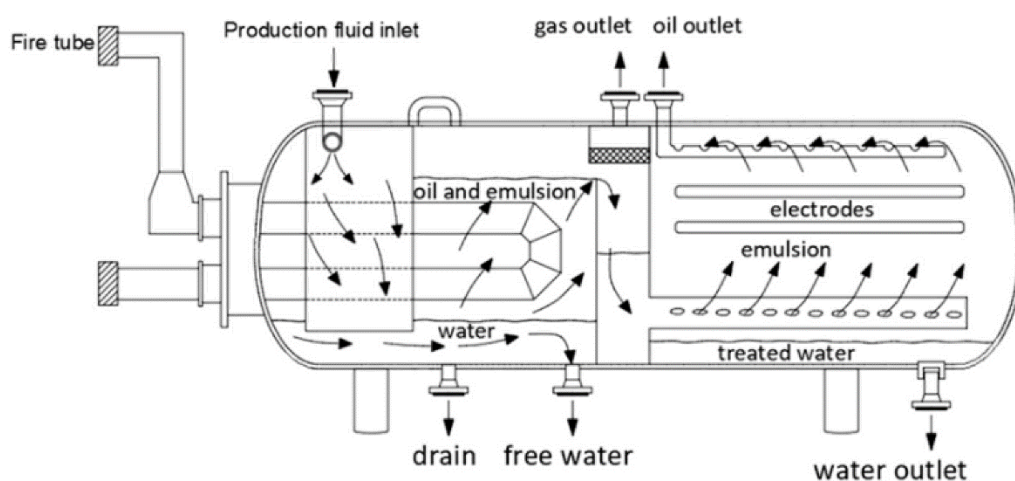


Рисунок 1.6 - Принципиальная схема электростатического нагревателя

Ниже описан процесс морской добычи нефти на норвежском континентальном шельфе. Процесс может проводиться на плавучей установке для добычи, хранения и разгрузки или на платформе. Корабль предназначен для добычи и транспортировки природного газа и сырой нефти. Нефтяные скважины обычно подключаются к производственному манифольду на морском объекте. Флюиды вытекают из верхней части нефтяных скважин для дальнейшей обработки (Рисунок 1.7). Сначала жидкости поступают в гравитационный сепаратор, где происходит трехфазное (вода, нефть, газ) разделение. Из-за турбулентного потока, наличия смол и асфальтенов и очевидных перепадов давления в штуцерах или манифольдах могут

образовываться эмульсии и пены, которые могут повлиять на сепарацию. Большая часть свободного газа отделяется в гравитационном сепараторе. Разделение воды и нефти производится после отстаивания и расслоения дисперсных фаз. Во время трехфазного разделения мелкие твердые частицы будут следовать за потоками жидкости, тогда как более крупные твердые частицы оседают в сепараторе. Затем сырая нефть подвергается дальнейшей обработке в сепараторе второй или даже третьей ступени, где содержание воды в нефти снижается до менее 0,5 % и соответствует экспортному качеству. В конечном итоге пластовая вода последовательно поступает в гидроциклон и газовую флотацию для достижения качества обратной закачки или сброса.

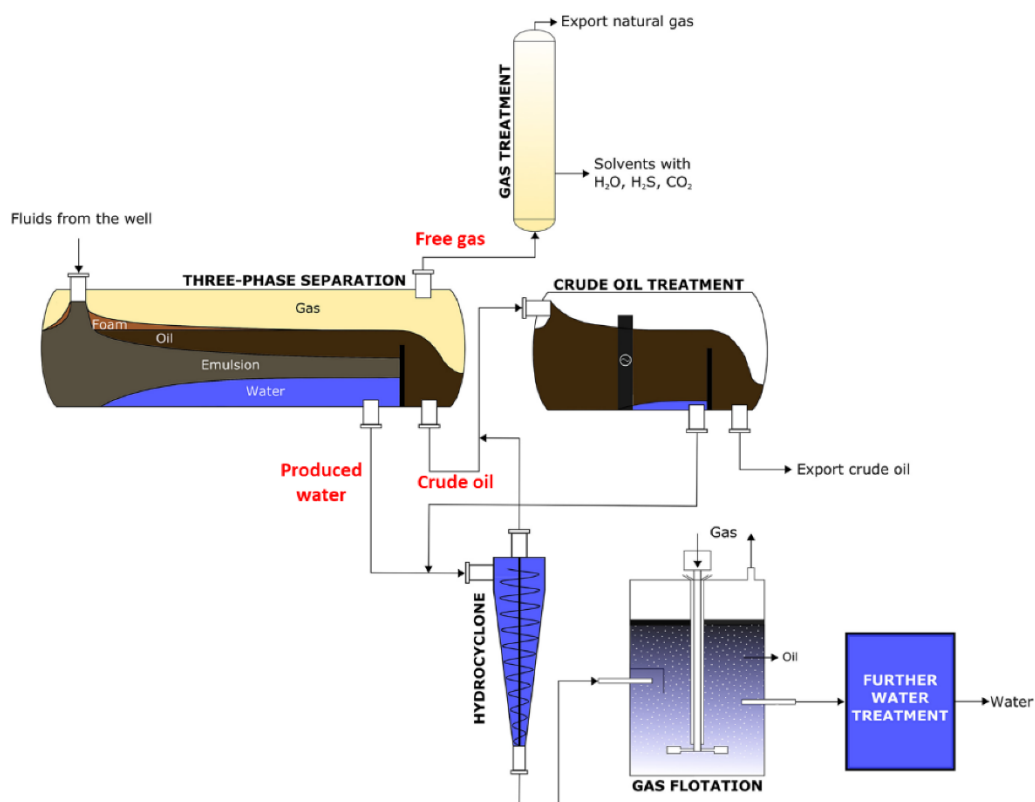


Рисунок 1.7 - Схема морской установки по переработке сырой нефти, природного газа и воды

## **1.6 Математическое моделирование процесса разделения водонефтяной эмульсии с использованием деэмульгатора природного происхождения**

В процессе добычи нефти для производства моторных топлив, а также продуктов и полупродуктов химической промышленности ее обводняют. Вода поступает в углеводородное сырье в результате заводнения добывающих скважин, которая используется для его добычи из-за разницы плотности углеводородного сырья - водной среды [115].

Для повышения эффективности разделения эмульсий широко применяют деэмульгаторы, большую часть которых составляют поверхностно-активные вещества. Их использование позволяет снизить сопротивление дисперсионной среды налипанию мелких капель воды, что способствует их укрупнению и осаждению.

Для повышения эффективности процессов разделения водонефтяных эмульсий предлагается состав деэмульгатора на основе компонентов природного происхождения - золы поваренной соли, полученной путем ее обжига в муфельной печи при температуре 1000 °С.

Из рассмотрения количественных значений энергии связи воды с элементами золы поваренной соли был выбран элемент - Mn в наноструктурированной форме для повышения эффективности деэмульгатора в процессе обезвоживания нефти.

Устойчивость водонефтяных эмульсий в присутствии деэмульгатора на основе природных компонентов оценивали с использованием вод различного состава (морских, артезианских, их конденсатов), концентрацией воды от 10 до 70 масс.%. Эмульсии получали диспергированием навески воды в нефти с помощью лопастной мешалки.

Рассматривается процесс коалесценции капель как реакцию второго порядка по концентрации прилипших капель. Наиболее вероятно слияние

капель, максимально отличающихся по размеру. Константу его скорости при объемах  $V_1$  и  $V_2$  можно записать в следующем виде:

$$k(V_1, V_2) = \beta * \left( \sqrt[3]{\frac{V_1}{V_2}} + \sqrt[3]{\frac{V_2}{V_1}} \right)^2; \quad (1.3)$$

где  $k$  — константа скорости слияния капель,  $V_1$  и  $V_2$  — объемы капель,  $\text{м}^3$ ;  $\beta$  — коэффициент, склонность капель к слиянию.

Разобьем весь диапазон размеров капель на сегменты исходя из объема одной капли (рисунок 1.12):

$$\Delta V = V_{i+1} - V_i; \quad (1.4)$$

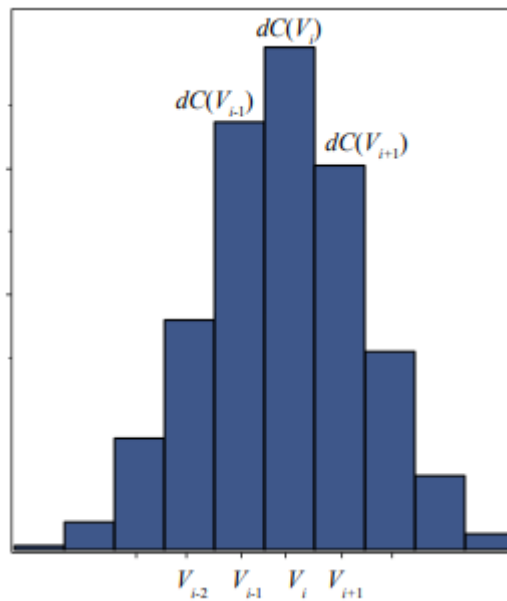


Рисунок 1.12 - Распределение капель воды по объему эмульсий

Тогда вклад в общую скорость коалесценции капель от капель объемов  $V_i$  и  $V_j$  будет выражаться зависимостью:

$$k(V_i, V_j) * dC(V_i, \tau) * dC(V_j, \tau); \quad (1.5)$$

где количество капель объемом  $V_i \pm \frac{1}{2} \Delta V$  в эмульсии в момент времени  $\tau$  (шт/ $\text{м}^3$ ).

Преобразовав структуры капель воды в эмульсии, получим выражения для увеличения и уменьшения доли капель с учетом.

Повышения:

$$r_+ = 0,5 * \int_0^{V_i} (k(V_i - V_i, V_j) * \rho(V_i - V_j, \tau) C_{all}(\tau) dV_i) \rho(V_j, \tau) C_{all}(\tau) dV_j; \quad (1.6)$$

Где  $\rho$  — плотность сплошной среды,  $\text{кг}/\text{м}^3$ .



Поскольку  $C_{all}(\tau)$  и  $V_i$  независимы от  $V_j$ :

$$r_+ = 0,5 * C_{all}^2(\tau) * dV_i \int_0^{V_i} k(V_i - V_j, V_j) * \rho(V_i - V_j, \tau) \rho(V_j, \tau) dV_j; \quad (1.7)$$

Понижение:

$$r_- = \rho(V_i, \tau) C_{all}(\tau) dV_i * \int_0^\infty (k(V_i, V_j) * \rho(V_j, \tau) C_{all}(\tau) dV_j); \quad (1.8)$$

$$r_- = \rho(V_i, \tau) C_{all}^2(\tau) dV_i * \int_0^\infty (k(V_i, V_j) * \rho(V_j, \tau) dV_j); \quad (1.9)$$

Изменение концентрации объемных капель  $V_i$  за время  $d\tau$  можно представить в виде:

$$dC(V_i, \tau + d\tau) - dC(V_i, \tau) = C_{all}(\tau + d\tau) * \rho(V_i, \tau + d\tau) * dV_i - C_{all}(\tau) * \rho(V_i, \tau) * dV_i; \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial C_p(V_i, \tau)}{\partial \tau} = 0,5 \int_0^{V_i} k(V_i - V_j, V_j) * C_p(V_i - V_j, \tau) C_p(V_j, \tau) dV_j - C_p(V_i, \tau) \int_0^\infty k(V_i, V_j) * C_p(V_j, \tau) dV_j; \quad (1.11)$$

Это интегро-дифференциальное уравнение будет характеризовать объемное распределение капель во времени без учета их источников/стоков. Кинетика процесса будет определяться коэффициентом  $\beta$ , характеризующим склонность капель к слипанию, имеющих размерность  $\text{м}^3/(\text{шт} * \text{сек})$ , и начальным распределением капель по размерам  $C_p(V_i, 0)$ .

Помимо коалесценции капель в эмульсии наблюдается расслоение при отстаивании. Частота столкновений капель будет тем больше, чем выше разница в скорости их движения, что объясняет увеличение наблюдаемой скорости слияния с увеличением разницы в размерах капель, так как с увеличением в их размерах линейная скорость их осаждения увеличивается. Среди капель радиусом до  $r_{\max}$  часть достигнет границы раздела и перейдет в сплошную фазу.

На высоте столба жидкости  $H$  в начальный момент вся жидкость является исходной эмульсией; по мере отстаивания она будет разделяться на фазу, состоящую из вещества дисперсной фазы исходной эмульсии и эмульсии, обедненной веществом дисперсной фазы (рисунок 1.13).

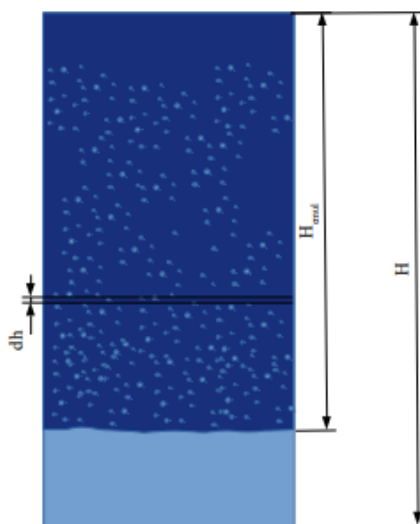


Рисунок 1.13 – Расслоение фаз водонефтяной эмульсии

Для участка эмульсии высотой  $dh$  необходимо составить материальный баланс.

Очевидно, что к массовым потокам вещества будут добавляться капли за счет их вертикального движения по объему. Направление движения дисперсной фазы в этом случае сверху вниз.

Поток капель объемом  $V_i$ , поступающих в слой  $dh$ , шт/сек:

$$j_{mov+} = S * v_{sedrel}(V_i, \tau, h) * C_p(V_i, \tau, h); \quad (1.12)$$

Поток капель, покидающих слой  $dh$ , шт/сек:

$$j_{mov-} = S * v_{sedrel}(V_i, \tau, h + dh) * C_p(V_i, \tau, h + dh); \quad (1.13)$$

Где  $S$  – площадь участка, перпендикулярного направлению капель,  $m^2$ .

С учетом размера и строения капель получаем уравнение для определения времени разделения эмульсий:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_p(V_i, \tau, h)}{\partial \tau} = & 0,5 \int_0^{V_i} k(V_i - V_j, V_j) * C_p(V_i - V_j, \tau, h) C_p(V_j, \tau, h) dV_j - \\ & C_p(V_i, \tau, h) \int_0^{\infty} k(V_i, V_j) * C_p(V_j, \tau, h) dV_j - C_p(V_j, \tau, h) \frac{\partial v_{sedrel}(V_i, \tau, h)}{\partial h} - \\ & v_{sedrel}(V_i, \tau, h) \frac{\partial C_p(V_i, \tau, h)}{\partial h}; \end{aligned} \quad (1.14)$$

В работе предложен состав деэмульгатора на основе компонентов природного происхождения для повышения эффективности процесса разделения водонефтяных эмульсий, состоящих из соляной золы, нефтяной золы и наночастиц Mn. Предложена математическая модель процесса

коалесценции капель воды и ее осаждения в зависимости от особенностей структуры эмульсии [115].

## 1.7 Моделирование эффективности сепарации эмульсии нефть-вода в трехфазном сепараторе

Многофазный метод Эйлера-Эйлера использовался для моделирования характеристик многофазной дисперсии, встречающейся в гравитационных сепараторах. Жидкие дисперсии, обнаруженные при гравитационном разделении, можно охарактеризовать как плотные с объемной долей от нуля до 100 %. При диспергировании пузырьков газа и капель воды в сплошной нефтяной фазе нефтяная фаза в данной работе рассматривается как первичная фаза, а газовая и водная фазы — как вторичные. Полидисперсность популяции капель воды вторичной фазы моделируется методом баланса популяций [116].

Уравнения сохранения получаются путем усреднения локального мгновенного баланса для каждой фазы. Уравнение неразрывности для фазы  $j$  имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_j \rho_j) + \nabla * (\alpha_j \rho_j \vec{v}_j) = \sum_{i=1}^n (m_{ij} - m_{ji}); \quad (1.15)$$

где,  $\alpha_j, \rho_j$  и  $\vec{v}_j$  объемная доля фаз, плотность и скорость, а  $m$  - масса, переносимая между фазами. Баланс импульсов для фаз  $j$  равен:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_j \rho_j \vec{v}_j) + \nabla * (\alpha_j \rho_j \vec{v}_j \vec{v}_j) = -\alpha_j \nabla p + \nabla * \alpha_j \mu_j \left( (\nabla \vec{v}_j + \nabla \vec{v}_j^T) - \frac{2}{3} \nabla * \vec{v}_j \vec{I} \right) + \sum_{i=1}^n (K_{ij} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) + m_{ij} \vec{v}_{ij} - m_{ji} \vec{v}_{ji}) + \alpha_j \rho_j \vec{g}; \quad (1.16)$$

где  $p$  - давление,  $\mu$  - вязкость,  $\vec{I}$  - единичный тензор, а  $K_{ij} (= K_{ji})$  - средний межфазный коэффициент обмена импульсами, который может быть представлен:

$$K_{ij} = \frac{\alpha_i \alpha_j \rho_j f}{\tau_i}; \quad (1.17)$$

где  $f$  – функция сопротивления, а  $\tau_i$  – время осаждения частицы, которые определяются как:

$$f = \frac{C_D Re}{24}; \quad \tau_i = \frac{\rho_j d_i^2}{18 \mu_m}; \quad (1.18)$$

где  $d_i$  — средний диаметр Заутера, связывающий уравнения импульса с уравнением баланса. Для оседающих или поднимающихся капель сопротивление возникает из-за сдвига вязкой поверхности и распределения давления или сопротивления формы вокруг капли. Для разбавленных дисперсий капли могут оседать или подниматься, не взаимодействуя с соседними каплями. Для маленьких капель в вязком режиме закон Стокса определяет конечную скорость в разбавленных или беспрепятственных условиях. В плотных дисперсиях, обнаруживаемых в водонефтяной смеси и непрерывном гравитационном разделении, функция сопротивления должна учитывать влияние соседних капель и затрудненное осаждение. Корреляция Шиллера-Науманна для коэффициента аэродинамического сопротивления  $C_D$  модифицирована для затрудненного осаждения в плотных суспензиях с использованием числа Рейнольдса смеси или эмульсии  $Re_m$  на основе вязкости эмульсии  $\mu_m$ , описанной ниже:

$$C_D = \frac{24}{Re_m} (1 + 0.15 Re_m^{0.687}); \quad (1.19) \quad Re_m = \frac{\rho_c |u_d - u_c| d_d}{\mu_m}; \quad (1.20)$$

Где индексы  $c$  и  $d$  означают сплошную и диспергированную фазы.

В трубе, приближающейся к входу в сепаратор, распределение капель по размерам меняется из-за переменного сдвига и турбулентности, воздействия поверхностно-активных веществ и деэмульгатора. На входе в сепаратор сложная водонефтяная эмульсия продолжает развиваться за счет разрушения и коалесценции. В зоне осаждения преобладают процессы коалесценции и в меньшей степени происходят дробление, растворение, агрегация и

флокуляция. При отсутствии измерений размера капель на входе в сепаратор начальное распределение капель по диаметру определяется по максимальному стабильному размеру капель  $d_{max}$ .

$$d_{max} = \frac{0.725}{\left(\frac{\rho_l}{\sigma}\right)^{3/5} \epsilon^{2/5}}; \quad (1.21)$$

где средняя турбулентная энергия диссипации на единицу массы равна:

$$\epsilon = f \frac{v_m^3}{2D}; \quad (1.22)$$

Коэффициент трения  $f$  возможно определить как:

$$f = F_2 + \frac{(F_1 - F_2)}{(1 + (Re_m/t)^c)^d}; \quad (1.23)$$

где  $F_1 = a_1 Re_m^{b_1}$  (1.24) и  $F_2 = a_2 Re_m^{b_2}$  (1.25). Параметры  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $c$ ,  $d$  и  $t$  определяются по режиму течения среды. Минимальный диаметр капель определяется как [116]:

$$d_{min} = 8 \frac{\sigma}{g \rho_l v_l^2}; \quad (1.26)$$

## **4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ**

### **4.1 Потенциальные потребители результатов исследования**

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование.

Целевой рынок - это группы потребителей или сегменты рынка, на котором будет продаваться в будущем разработка. А разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга), называется сегментированием.

Для данной разработки целесообразно использовать такие критерии сегментирования рынка: как размер компании, отрасль, географический и поведенческий критерии.

Размер компании очень важен, т.к. крупные компании часто используют новые технологии и могут поддаться риску, потому что имеют возможность возместить убытки.

Что касается отраслей, то не все предприятия могут пользоваться данным исследовательским проектом, а только нефтяная промышленность. Отсюда вытекает географический критерий, потому что не всякий регион и не всякая страна имеет газовые и нефтяные ресурсы. Поведенческий критерий тоже важен, ведь клиенты выгода для потребителя выбирает товар (услугу) исходя из выгоды, цены, качества, срочности приобретения товара.

Целесообразно выбрать два наиболее значимых критерия, по которым будет производиться сегментирование рынка (табл. 4.1).

Таблица 4.1 – Карта сегментирования рынка

		Отрасль	
		Газодобывающие предприятия	Нефтегазодобывающие предприятия
Размер компании	Крупные		
	Средние		
	Малые		

	Роснефть		Газпром		Новатэк		Томскнефть		Норд Империял
--	----------	--	---------	--	---------	--	------------	--	---------------

Как видно из таблицы основными сегментами данного рынка являются крупные и малые компании. Следовательно, наиболее перспективным сегментом в отраслях нефтегазодобычи и нефтегазопереработки для формирования спроса является сегмент независимых крупных и средних нефтедобывающих компаний.

#### 4.2 Оценочная карта

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам, и позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения. Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, пример которой приведен в таблице (Прил. В).

$K_{к1}$ ,  $K_{к2}$  – выпускники, занимающиеся аналогичной разработкой в отделении химической инженерии ТПУ. Позиция разработки и конкурентов оценивается по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле [123]:

$$K = \sum B_i \cdot B_j$$

где  $K$  – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

$V_i$  – вес показателя (в долях единицы);

$B_i$  – балл  $i$ -го показателя.

Полученные значения говорят об эффективности научной разработки и позволяют определить направления для ее будущего повышения. Разработка является конкурентоспособной, уникальной и простой в применении, но следует увеличить перспективность на рынке и получить сертификацию разработки.

### 4.3 Диаграмма Исикавы

Диаграмма причины-следствия Исикавы (Cause-and-Effect-Diagram) - это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

Область применения диаграммы:

- Выявление причин возникновения проблемы;
- Анализ и структурирование процессов на предприятии;
- Оценка причинно-следственных связей.

Построение диаграммы начинают с формулировки проблемной области/темы, которая является объектом анализа и наносится на центральную горизонтальную стрелку диаграммы. Диаграмма представлена на рисунке 4.1.





Рисунок 4.1 – Диаграмма Исикавы

#### 4.4 Мера готовности научной разработки и разработчика к коммерциализации

В данном разделе будет оценена степень готовности разработки к коммерциализации и выяснен уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Для этого необходимо заполнить специальную форму, содержащую показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта (Прил. Г).

При проведении анализа по таблице, приведенной выше, по каждому показателю ставится оценка по пятибалльной шкале. Так, при оценке степени проработанности научного проекта 1 балл означает не проработанность проекта, 2 балла – слабую проработанность, 3 балла – выполнено, но в качестве не уверен, 4 балла – выполнено качественно, 5 баллов – имеется положительное заключение независимого эксперта. Для оценки уровня имеющихся знаний у разработчика система баллов принимает следующий вид: 1 означает не знаком или мало знаю, 2 – в объеме теоретических знаний, 3 – знаю теорию и практические примеры применения, 4 – знаю теорию и

самостоятельно выполняю, 5 – знаю теорию, выполняю и могу консультировать.

Оценка готовности научного проекта к коммерциализации (или уровень имеющихся знаний у разработчика) определяется по формуле [123]:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i ,$$

где  $B_i$  – балл по  $i$ -му показателю.

Значение  $B_{\text{сум}}$  позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. Если значение  $B_{\text{сум}}$  получилось от 75 до 60, то такая разработка считается перспективной, а знания разработчика достаточными для успешной ее коммерциализации. Если от 59 до 45 – то перспективность выше среднего.

В данном случае получили перспективность разработки выше среднего. Это говорит о том, что необходимо проработать вопросы финансирования научной разработки, определить пути продвижения научной разработки на рынок, разработать стратегию реализации научной разработки и возможно привлечь требуемых специалистов в команду проекта.

#### **4.5 Выбор предпочтительного метода коммерциализации**

При коммерциализации научно-технических разработок продавец преследует вполне определенную цель, которая во многом зависит от того, куда в последующем он намерен направить полученный коммерческий эффект. При этом время продвижения товара на рынок во многом зависит от правильности выбора метода коммерциализации. Задача данного раздела – это выбор метода коммерциализации объекта исследования и обоснование его целесообразности.

Для продвижения научной разработки можно использовать два метода коммерциализации: торговля патентными лицензиями и передача ноу-хау, поскольку разработка представляет собой не товар, а техническое, научно-обоснованное решение или новая технология в области подготовки нефти.

Использование этих методов позволит получить средства для продолжения своих научных исследований и разработок, необходимое оборудование, материалы и другие научно-технические разработки и т.д. охраняются режимом коммерческой тайны и использоваться для достижения конкурентного преимущества над другими субъектами предпринимательской деятельности.

Дополнительно следует отметить такой вид коммерциализации, как лицензионный договор. Данный метод позволяет передавать право пользования программой на условиях оплаты лицензии, что в свою очередь будет приносить постоянный доход в размере стоимости лицензии на определенный момент времени.

Также не стоит исключать такой метод коммерциализации как полная продажа программы. В данном случае следует обратить внимание на то, что после продажи невозможно будет вносить изменения в продукт, так как права перейдут другим лицам. Однако, данный метод позволит получить высокую выручку сразу после разработки программного обеспечения и переключить работу на создание новых программ.

#### **4.6 Цель и результаты работы**

В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта.

Для начала, определим заинтересованных сторон проекта, которые активно участвуют в проекте или интересы которых могут быть затронуты как положительно, так и отрицательно в ходе исполнения или в результате завершения проекта. Информацию по заинтересованным сторонам проекта представить в табл. 4.2.

Таблица 4.2 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Нефтегазовая и нефтехимическая промышленность	Получение новых технологий по разрушению стойких водонефтяных эмульсий
Научно-исследовательские институты и лаборатории	

В табл. 4.3 представлена информация о иерархии целей проекта в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения и критериях их достижения.

Таблица 4.3 – Цели и результат проекта

<b>Цели проекта:</b>	Реализация проекта, решение вопроса финансирования научной разработки, определение путей продвижения разработки на рынок, разработка стратегии реализации научной разработки, привлечение требуемых специалистов в команду проекта.
<b>Ожидаемые результаты проекта:</b>	Получение возможности реализации проекта, повышение оперативности доступа к информации о наличии продукции, оптимизация планов.
<b>Критерии приемки результата проекта:</b>	Уникальность, адекватность и унифицированность разработки.
<b>Требования к результату проекта:</b>	Достоверность разработки
	Простота применения и восприятия
	Ресурсоэффективность
	Ресурсосбережение

#### 4.7 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ [124]. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта. На рисунке 4.2 представлен шаблон иерархической структуры работ по проекту.

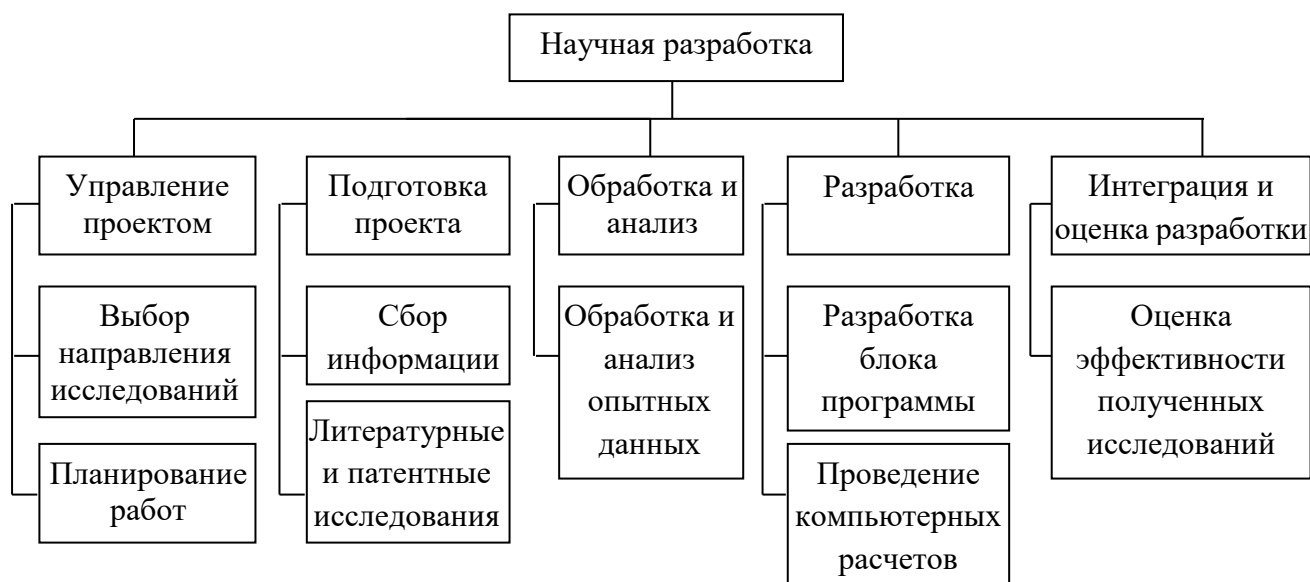


Рисунок 4.2 – Иерархическая структура работ по проекту



#### 4.8 Диаграмма Гантта

В данном разделе необходимо составить перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, провести распределение исполнителей по видам работ. Построен календарный план-график по длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта с разбивкой по месяцам и декадам за период времени дипломирования.

Таблица 4.4 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

Вид работ	Исполнители	Т <sub>к</sub> , кал.дн.	Продолжительность выполнения работ														
			февр			март			апрель			май			июнь		
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1		
Выбор направления исследований	Руководитель	6	█														
Составление задания	Руководитель	10	█														
Планирование работ	Руководитель, инженер	15	█														
Подбор, изучение материалов	Инженер	62	█														
Патентные исследования	Инженер	14															
Проведение теоретических расчетов	Руководитель, инженер	8										█					

Вид работ	Исполнители	Т <sub>к</sub> , кал.дн.	Продолжительность выполнения работ														
			февр			март			апрель			май			июнь		
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1		
Проведение компьютерных расчетов	Инженер	6															
Оценка эффективности результатов	Руководитель, инженер	2															
Определение целесообразности проведения	Руководитель, инженер	5															
Оформление отчета	Инженер	20															

 – руководитель
 – инженер

#### 4.9 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям: материальные затраты НТИ; основная заработная плата исполнителей темы; дополнительная заработная плата исполнителей темы; отчисления во внебюджетные фонды; затраты научные и производственные командировки; контрагентные расходы; накладные расходы.

В стоимость материальных затрат включают затраты на электроэнергию – 366 рублей.

Специально для написания ВКР никакое дорогостоящее оборудование студентом не покупалось; использовалось оборудование и ПО, имеющееся в ТПУ и у студента. Далее представлены расчеты затрат на амортизацию используемого оборудования. Амортизация вычисляется по следующим формулам:

Годовые амортизационные отчисления:

$$A_{г} = C \cdot \frac{1}{n}$$

Где  $n$  – срок полезного использования объекта в месяцах;  $C$  – первоначальная или восстановительная (в случае проведения переоценки) стоимость объекта.

Ежемесячные амортизационные отчисления:

$$A_m = \frac{A_{\Gamma}}{12}.$$

Итоговая сумма амортизации основных средств:

$$A = A_m \cdot C_n;$$

Где  $C_n$  – планируемый срок использования объекта в месяцах (12 месяцев).

Результаты расчетов суммы амортизации представлены в Таблице 4.5. Планируемый срок использования объекта составляет 12 месяца.

Таблица 4.5 – Расчет затрат на амортизацию оборудования

Наименование оборудования	Цена, руб.	$A_{\Gamma}$ , руб.	$A_m$ , руб.	$A$ , руб.
Персональный компьютер	77000	25410	2117,5	25410
Итого:				25410

Таким образом, в затраты необходимо включить сумму амортизации оборудования в размере 25 410 рублей.

#### 4.9.1 Основная заработная плата

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НТИ, (включая премии, доплаты).

Основная заработная плата руководителя от ТПУ рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда, которая предполагает следующий состав заработной платы: оклад, распределяемый в соответствии с занимаемыми

должностями; стимулирующие выплаты за эффективный труд, выполнение дополнительных обязанностей и т.д.; районный коэффициент.

Основная заработная плата ( $Z_{осн}$ ) руководителя принята равно 39300 рублей, а исполнителя – 26200 рублей.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_{м} * M}{F_{д}} = \frac{39300 * 10,4}{251} = 1628 \text{ рублей;}$$

$$Z_{дн} = \frac{Z_{м} * M}{F_{д}} = \frac{26200 * 11,4}{275} = 1086 \text{ рублей;}$$

Где  $Z_{м}$  – месячный должностной оклад работника, руб.;  $M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года;  $F_{д}$  – годовой фонд рабочего времени, раб. дн. (табл. 4.6).

Таблица 4.6 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней: - выходные дни	44	48
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени: - отпуск	56	28
- невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	275

Расчёт основной заработной платы приведён в табл. 4.7.

Таблица 4.7 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Разряд	$k_p$	$Z_{м}$ , руб	$Z_{дн}$ , руб.	$T_p$ , раб. дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель	доцент	1,3	39300	1628	57	92796
Инженер	–	1,3	26200	1086	106	115116

Таким образом были рассчитаны затраты на выплату основной зарплаты руководителю и инженеру в течении года разработки проекта в рамках выпускной квалификационной работы.



#### 4.9.2 Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

В данную статью включается сумма выплат, предусмотренных законодательством о труде, например, оплата очередных и дополнительных отпусков; оплата времени, связанного с выполнением государственных и общественных обязанностей; выплата вознаграждения за выслугу лет и т.п. (в среднем – 12 % от суммы основной заработной платы).

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10- 15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,15 \cdot 92796 = 13919 \text{ рублей};$$

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,15 \cdot 115116 = 17267 \text{ рублей};$$

где  $Z_{\text{доп}}$  – дополнительная заработная плата, руб.;  $k_{\text{доп}}$  – коэффициент дополнительной зарплаты;  $Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата, руб.

В таблице 4.8 приведена форма расчета основной и дополнительной заработной платы

Таблица 4.8 – Дополнительная заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Инженер
Основная зарплата	92796	115116
Дополнительная зарплата	13919	17267

В данном разделе были рассчитаны дополнительные затраты на выплату зарплаты сотрудникам за один календарный год.

### 4.9.3 Отчисления на социальные нужды

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$З_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн.рук.}} + З_{\text{осн.инж.}}) = (92796 + 115116) \cdot 0,305 = 63413 \text{ руб.}$$

где  $k_{\text{внеб}}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды.

На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность вводится пониженная ставка – 30,5%.

### 4.9.4 Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др. В расчетах эти расходы принимаются в размере 70 - 90 % от суммы основной заработной платы научно-производственного персонала данной научно-технической организации.

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$\begin{aligned} C_{\text{накл}} &= k_{\text{накл}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}) = 0,8 \cdot (92796 + 13919 + 115116 + 17267) \\ &= 191278 \text{ рублей;} \end{aligned}$$

Где  $k_{\text{накл}}$  – коэффициент накладных расходов.

#### 4.9.5 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Расчитанная величина затрат научно-исследовательской работы является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции. Бюджет затрат по каждому варианту исполнения приведен в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
1. Амортизация оборудования	25410	Пункт 4.9
2. Затраты по основной заработной плате	207912	Пункт 4.9.1
3. Затраты по дополнительной оплате	31186	Пункт 4.9.2
4. Отчисления во внебюджетные фонды	63413	Пункт 4.9.3
5. Накладные расходы	191278	Пункт 4.9.4
<b>Бюджет затрат НИИ</b>	<b>519199</b>	<b>Сумма ст. 1-5</b>

Таким образом, общий бюджет научного исследования составил 1705193 рублей. Большую часть данного бюджета занимают затраты на основную заработную плату исполнителям проекта и накладные расходы.

Корпоративная лицензия на одного пользователя ПО Aspen HYSYS стоит по оценкам от 30 до 50 тысяч долларов в год, что в пересчете (курс 75 рублей за доллар) дает стоимость 2,25 – 3,75 млн. рублей в год за одну лицензию.

Таким образом, стоимость разработки программного модуля процесса отстаивания нефти меньше стоимости лицензии только на 1 рабочее место программы HYSYS, таким образом, себестоимость проекта позволяет реализовывать созданный программный продукт с быстрой окупаемостью.

#### 4.10 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования, нахождение которого связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех вариантов исполнения научного исследования и определяется как [125]:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}},$$

Где  $I_{\Phi}^p$  – интегральный финансовый показатель разработки;

$\Phi_{pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;

$\Phi_{\max}$  – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом (табл. 4.10) [125]:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i,$$

Где  $I_{pi}$  – интегральный показатель ресурсоэффективности для  $i$ -го варианта исполнения разработки;

$a_i$  – весовой коэффициент  $i$ -го варианта исполнения разработки;

$b_i^a, b_i^p$  – балльная оценка  $i$ -го варианта исполнения разработки.

Таблица 4.10 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения

Критерии \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Адекватность разработки	0,30	5	4	5
2. Унифицированность	0,20	4	4	4
3. Простота применения	0,26	5	5	4

Критерии \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
4. Универсальность	0,24	3	3	3
<b>Итого</b>	<b>1</b>	<b>4,05</b>	<b>4,02</b>	<b>3,9</b>

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки определяется по формуле [125]:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p}, \quad I_{финр}^a = \frac{I_m^a}{I_\phi^a}.$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (табл. 4.11), которая рассчитывается по формуле [125]:

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^a}.$$

Таблица 4.11 – Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
Интегральный финансовый показатель разработки	0,972	1	1,002
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,05	4,02	3,9
Интегральный показатель эффективности	4,15	4,02	3,89
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,97	0,94

На основании значений интегральных показателей эффективности вариантов исполнения, оптимальным считается вариант текущего проекта.

#### 4.11 Заключение по разделу финансовый менеджмент

В разделе финансовый менеджмент был проведен анализ потенциальных потребителей результатов исследования, в ходе которого были определены незанятые ниши на рынке.

Проведен анализ конкурентных технических решений, в ходе которого разрабатываемый проект признан конкурентноспособным, определены уязвимости проекта.

Был проведен анализ рисков проекта по диаграмме Исикавы, оценка проекта к готовности к коммерциализации и выбран предпочтительный вариант коммерциализации – лицензионный договор.

Далее были определены цели и результаты проекта, выдвинуты основные критерии к результатам разработки, определены трудозатраты разработчиков, иерархия работ по созданию расчетного модуля, а также проработана диаграмма Гантта, на которой изображен календарный график разработки расчетного модуля.

На основании имеющихся цен, проведена оценка бюджета научного исследования и сравнение с аналогом, в результате которого стоимость проекта оказалась ниже стоимости аналога.

В заключении, был проведен анализ сравнительной эффективности исследования по интегральным показателям. Эффективность разрабатываемого решения выше, чем у рассматриваемых аналогов. Это говорит о том, что проект имеет экономическую эффективность и сравнимую ресурсоэффективность и его разработка целесообразна.

## 5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

Социальная ответственность – ответственность субъекта за воздействие его решений и деятельности на окружающую среду и общество через прозрачное и этическое поведение, которое содействует устойчивому развитию, включая здоровье и благосостояние общества, учитывает ожидания заинтересованных сторон, соответствует применяемому законодательству и согласуется с международными нормами поведения [126].

Разработка научного проекта связана с аналитической работой с использованием персонального компьютера и другого офисного оборудования.

С развитием научно-технического прогресса немаловажную роль играет возможность безопасного исполнения людьми своих трудовых обязанностей.

Охрана здоровья трудящихся, обеспечение безопасности условий труда, ликвидация профессиональных заболеваний и производственного травматизма составляет одну из главных забот человеческого общества. Обращается внимание на необходимость широкого применения прогрессивных форм научной организации труда, сведения к минимуму ручного, малоквалифицированного труда, создания обстановки, исключаящей профессиональные заболевания и производственный травматизм.

На рабочем месте необходимо предусмотреть меры защиты от возможного воздействия опасных и вредных факторов. Уровни этих факторов не должны превышать предельных значений, оговоренных правовыми, техническими и санитарно-техническими нормами. Эти нормативные документы обязывают к созданию на рабочем месте условий труда, при которых влияние опасных и вредных факторов на работающих либо устранено совсем, либо находится в допустимых пределах.

Задачей данного раздела является анализ проблем социальной ответственности с точки зрения потребителя результатов работы.

Поскольку результаты проекта будут использоваться нефтегазовой промышленностью, то в качестве потребителя будет выступать проектный институт, для которой будет произведен расчет математической модели; выявлены всевозможные риски жизни и здоровья работников в процессе трудовой деятельности, несчастные случаи на производстве и профессиональные заболевания; анализированы условия труда и охраны труда, промышленной и экологической безопасности.

## **5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

При выполнении научно-исследовательского проекта необходимо соблюдать все требования трудового кодекса РФ [127].

Правовые и организационные основы и порядок проведения специальной оценки условий труда, правовое положение, права, обязанности и ответственность участников специальной оценки условий труда описаны в Федеральном законе [128].

Надзор и контроль за соблюдением законодательства о труде осуществляют специально уполномоченные государственные органы. К таким органам относятся Федеральная инспекция труда, Государственная экспертиза условий труда, Федеральная служба по труду и занятости населения, Федеральная служба по экологическому, технологическому и атомному надзору (Госгортехнадзор, Госэнергонадзор, Госатомнадзор России), Федеральная служба по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека (Госсанэпиднадзор России) и др. [127].

Работодатель обязан организовать персоналу безопасные рабочие места в соответствии с требованиями, которые утвердил Минтруд приказом от 29.10.2021 № 774н. Это правило распространяется на все организации и



предприятия. Выполнение требований законодательства начинается с определения нормальных условий труда в офисе.

По ст. 37 Конституции обеспечивается не только свобода, но и защита труда. Каждый гражданин имеет право на работу, которая отвечает требованиям гигиены и безопасности. Поэтому работодатели при организации любого рабочего места должны учитывать конституционные права сотрудников.

Если специалист уверен, что руководитель предприятия нарушает его права, не предоставляя оптимальные условия работы, то целесообразно сообщить о данных нарушениях работникам трудовой инспекции или прокуратуры, а также можно подать исковое заявление для получения материальной и моральной компенсации.

В настоящее время действуют СанПиН 2.2.4.335916 «Санитарно-эпидемиологические требования к физическим факторам на рабочих местах» [129], утвержденные Постановлением Главного государственного санитарного врача РФ от 21.06.2016 № 81 (предназначены для граждан, состоящих в трудовых отношениях, индивидуальных предпринимателей и юридических лиц). Этим документом установлены санитарно-эпидемиологические требования к физическим факторам неионизирующей природы на рабочих местах и источникам этих физических факторов, а также требования к организации контроля, методам измерения физических факторов на рабочих местах и мерам профилактики вредного воздействия физических факторов на здоровье работающих.

В отношении офисных работников действуют также следующие санитарные нормы и правила:

1. СанПиН 2.2.0.55596 «Гигиена труда. Гигиенические требования к условиям труда женщин» (утверждены Постановлением Госкомсанэпиднадзора РФ от 28.10.1996 № 32) [130];

2. СНИП 2.09.0487 "Административные и бытовые здания" (утверждены Постановлением Госстроя СССР от 30.12.1987 № 313) [131];

3. СанПиН 2.2.4.129403 «2.2.4. Физические факторы производственной среды. Гигиенические требования к аэроионному составу воздуха производственных и общественных помещений» (утверждены Главным государственным санитарным врачом РФ 18.04.2003) [132].

В помещении, где сотрудники непрерывно находятся более двух часов, должно быть естественное освещение [129]. Исключения составляют помещения, которые разрешено размещать в цокольных и подвальных этажах при необходимости соблюдения технологического процесса. Окна в помещениях, где работают с компьютерами, должны быть ориентированы на север и северо-восток. Оконные проемы необходимо оборудовать регулируемыми жалюзи, внешними козырьками и пр. [133].

Согласно СанПиН 2.2.2/2.4.134003 [133] и п. 3.2.2.4 Перечня вредных и опасных факторов [134] излучение от компьютера, если работник проводит за ним более 50% рабочего времени, является вредным фактором условий труда. Таким образом, поскольку на офисных рабочих местах присутствуют факторы, по уровню своего воздействия отнесенные к вредным, офисные работники, проводящие за компьютером более половины рабочего времени, должны проходить обязательные медосмотры. При этом обязательность прохождения медосмотров работниками, которые подвергаются воздействию вредного фактора (в виде излучения от компьютера более 50% рабочего времени), не ставится в зависимость от результатов специальной оценки условий труда. Даже если условия труда по результатам спецоценки признаны допустимыми, таких работников все равно нужно направлять на обязательные медосмотры, поскольку они подвергаются воздействию вредного фактора.

Офисным работникам необходимо проходить как обязательный медосмотр при устройстве на работу, так и периодические медосмотры (Письмо Минтруда РФ от 21.03.2014 № 152/ООГ-242).

В соответствии с Порядком проведения медосмотров периодические осмотры проводятся не реже чем в сроки, указанные в Перечне вредных и опасных факторов и Перечне вредных работ [134]. Для офисных работников

периодические медицинские осмотры проводятся не реже одного раза в два года (п. 3.2.2.4 Перечня вредных и опасных факторов). При этом работники в возрасте до 21 года проходят периодические медосмотры ежегодно.

## 5.2 Производственная безопасность

Условия труда, в которых разрабатывается математическая модель для расчета остаточной обводненности в том числе устройства, с помощью которых осуществляется деятельность, могут спровоцировать появление вредных и опасных факторов производства.

При выполнении работ на персональном компьютере (ПЭВМ) согласно «ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация» могут иметь место следующие факторы, представленные в таблице 5.1 [135].

Таблица 5.1 – Возможные опасные и вредные факторы при работе с ПЭВМ

Фактор (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этап работы			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
Повышенное значение напряжения в электрической цепи	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.

Фактор (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этап работы			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
Недостаточная освещенность	+	+	+	СП 52.13330.2016 «Естественное и искусственное освещение». Актуализированная редакция СНиП 23-05-95.
Зрительное напряжение	+	+	+	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы».
Нервно-психические перегрузки, монотонность труда		+	+	Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 №197-ФЗ (ред. от 27.12.2018).

#### 1) Отклонение показателей микроклимата

Микроклимат определяется действующими на организм человека показателями температуры, влажности и скорости движения воздуха. Длительное воздействие на человека неблагоприятных показателей микроклимата ухудшает его самочувствие, снижает производительность труда и приводит к заболеваниям, поэтому в организации должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата, установленные СанПиН 2.2.4.548-96 «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений» [136]. Они представлены в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Оптимальные и допустимые величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Оптимальные значения характеристик микроклимата				
Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	22-24	21-25	40-60	0,1
Теплый	23-25	22-26	40-60	0,1
Допустимые значения характеристик микроклимата				
Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	20-25	19-26	15-75	0,1
Теплый	21-28	20-29	15-75	0,1-0,2

2) Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека

В деятельности организации широко используется электричество для питания компьютерной техники, которая может являться источником опасности. Несоблюдение правил ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. «Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов» может привести к опасным последствиям [137]. Поражение электрическим током может произойти при прикосновении к токоведущим частям, находящимся под напряжением, на которых остался заряд или появилось напряжение.

Электрический ток оказывает на человека термическое, электролитическое, биологическое и механическое воздействие. Действие электрического тока на человека приводит к травмам или гибели людей. Для

переменного тока частотой 50 Гц допустимое значение напряжения прикосновения составляет 2 В, а силы тока – 0,3 мА, для тока частотой 400 Гц, соответственно – 2 В и 0,4 мА, для постоянного тока – 8 В и 1 мА.

Мерами защиты от воздействия электрического тока являются оградительные устройства, устройства автоматического контроля и сигнализации, изолирующие устройства и покрытия, устройства защитного заземления, устройства автоматического отключения, предохранительные устройства.

### 3) Недостаточная освещенность

Недостаточная освещенность рабочей зоны помещения, оборудованной ПК, также является одной из причин нарушения зрительной функции, а также влияет на общее самочувствие и эффективность труда.

Искусственное освещение в помещениях для эксплуатации ПК должно осуществляться системой общего равномерного освещения. В случаях преимущественной работы с документами, следует применять системы комбинированного освещения (к общему освещению дополнительно устанавливаются светильники местного освещения, предназначенные для освещения зоны расположения документов). Окна в помещениях, где эксплуатируется вычислительная техника, преимущественно должны быть ориентированы на север и северо-восток. Нормируемые показатели естественного, искусственного и совмещенного освещения в соответствии с СанПиНом 2.2.1/2.1.1.1278-03 указаны в таблице 5.3 [138].

Таблица 5.3 – Нормируемые показатели естественного, искусственного

и совмещенного освещения

Помещения	Рабочая поверхность и плоскость нормирования КЕО и освещенности (Г-горизонтальная, В-вертикальная) и высота плоскости над полом	Естественное освещение		Совмещенное освещение	
		КЕО $e_n$ , %		КЕО $e_n$ , %	
		При верхнем или комбинированном	При боковом освещении	При верхнем или комбинированном	При боковом освещении
Кабинеты, офисы, рабочие комнаты	$\Gamma - 0,8$	3,0	1,0	1,8	0,6
Помещения	Искусственное освещение				
	Освещенность, лк				
	При комбинированном освещении		При общем освещении	Показатель дискомфорта, М, не более	Коэффициент пульсации освещенности, Кл, %, не более
	Всего	От общего			
Кабинеты, офисы, рабочие комнаты	400	200	300	40	15

#### 4) Зрительное напряжение

Работа на ПК сопровождается постоянным и значительным напряжением функций зрительного анализатора. Одной из основных особенностей является иной принцип чтения информации, чем при обычном

чении. Чтобы снизить зрительное напряжение нужно соблюдать визуальные параметры экрана (таблица 5.4).

Таблица 5.4 – Допустимые визуальные параметры устройств отображения информации [139]

Параметр	Допустимые значения
Яркость белого поля	Не менее 35 кд/кв.м
Неравномерность яркости рабочего поля	Не более 20 %
Контрастность (для монохромного режима)	3 : 1
Пространственная нестабильность изображения (непреднамеренное изменение положения фрагментов изображения экрана)	Не более $2 \cdot 10L - 4L$ , где L – расстояние наблюдения

#### 5) Нервно-психические перегрузки

Нервно-психические перегрузки – совокупность таких сдвигов в психофизиологическом состоянии организма человека, которые развиваются после совершения работы и приводят к временному снижению эффективности труда. Состояние утомления (усталость) характеризуется определенными объективными показателями и субъективными ощущениями.

Нервно-психические перегрузки подразделяются на следующие:

- умственное перенапряжение;
- перенапряжение анализаторов;
- монотонность труда;
- эмоциональные перегрузки.

При первых симптомах психического перенапряжения необходимо:

- дать нервной системе расслабиться;
- рационально чередовать периоды отдыха и работы;
- начать заниматься спортом;
- ложиться спать в одно и то же время;



- в тяжелых случаях обратиться к врачу.

Естественно, что полностью исключить провоцирующие факторы из жизни вряд ли удастся, но можно уменьшить их негативное воздействие, давая нервной системе необходимый отдых.

### 5.2.1 Расчет искусственного освещения для офисного помещения

Приведем расчет искусственного освещения для офисного помещения, в котором осуществляется разработка ПО. Размеры офиса: ширина  $A = 5$  м, длина  $B = 20$  м, высота  $H = 6$  м. В офисе используются светильники-панели типа ОД (светильник общего освещения) белого света мощностью 30 Вт и со световым потоком  $\Phi = 8000$  лм. Общее число светильников в офисе равно  $n = 21$ . Коэффициент пульсации ламп данного типа не превышает 5 %, что соответствует нормам.

Освещенность помещения рассчитывается по формуле:

$$E_{\Phi} = \frac{n \cdot \eta \cdot \Phi}{S \cdot k \cdot z}; \quad (5.1)$$

Где  $n$  – количество светильников в помещении;  $\eta$  – коэффициент использования светового потока;  $\Phi$  – световой поток светильника, лм;  $S$  – площадь помещения,  $m^2$ ;  $k$  – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника;  $z$  – коэффициент неравномерности освещения.

Коэффициент запаса  $k$  учитывает запыленность светильников и их износ. Для помещений с вычислительной техникой  $k = 1,5$ . Поправочный коэффициент для люминесцентных ламп равен  $z = 1,1$ . Площадь помещения равна  $S = A \cdot B = 5 \cdot 20 = 100 m^2$ .

Индекс помещения определяется по формуле:

$$i = \frac{S}{h \cdot (A+B)}; \quad (5.2)$$

Где  $S$  – площадь помещения,  $m^2$ ;  $A$  – длина комнаты, м;  $B$  – ширина комнаты, м;  $h$  – высота подвеса светильников, м.

При этом расчетная высота подвеса светильников над рабочей поверхностью ( $h$ ) в офисе определяется по формуле:

$$h = H - h_p - h_c = 6 - 0,8 - 0,1 = 5,1 \text{ м}; \quad (5.3)$$

где  $H$  – высота потолка в помещении, м;  $h_p$  – расстояние от пола до рабочей поверхности стола, м;  $h_c$  – расстояние от потолка до светильника, м.

Подставим полученное значение в формулу для расчета индекса помещения:

$$i = \frac{100}{5,1*(5+20)} = 0,78; \quad (5.4)$$

Потолок в помещении чистый, оклеенный белыми панелями; стены бетонные, оклеенные светлыми обоями с окнами; рабочая поверхность содержит ПЭВМ, значит, примем коэффициенты отражения от стен  $\rho_c = 30 \%$ , потолка  $\rho_{п} = 50 \%$  и от рабочей поверхности  $\rho_p = 20 \%$ . По таблице коэффициентов использования светового потока светильников для соответствующих значений  $i$ ,  $\rho_c$ ,  $\rho_{п}$ , определяем коэффициент использования светового потока. Для светильника при  $i = 0,78$ ;  $\rho_c = 30 \%$  и  $\rho_{п} = 50 \%$  коэффициент использования светового потока равен  $40,8 \%$ .

Следовательно, освещенность определяется по формуле:

$$E_{\phi} = \frac{21*0,408*8000}{100*1,5*1,1} = 415 \text{ лк}; \quad (5.5)$$

В рассматриваемом помещении освещенность должна составлять не менее 400 лк согласно СНиП 23-05-95 [5]. В данном помещении освещенность составила 415 лк и находится в пределах нормы

Определим количество рядов светильников:

$$n_{\text{ряд}} = \frac{B - \frac{2}{3}L}{L} + 1; \quad (5.6)$$

Где  $n_{\text{ряд}}$  – количество рядов;  $B$  – ширина комнаты;  $L$  – расстояние между рядами светильников.

$$n_{\text{ряд}} = \frac{20 - \frac{2}{3}*2,5}{2,5} + 1 = 7; \quad (5.7)$$

Далее определяется количество светильников в одном ряду:

$$n_{\text{св}} = \frac{A - \frac{2}{3}L}{l_{\text{св}} + 0,5} = 3; \quad (5.8)$$

Умножаем количество рядов на количество светильников и определяем общее количество светильников.

$$n_{\text{общ}} = n_{\text{ряд}} * n_{\text{св}} = 7 * 3 = 21; \quad (5.9)$$

Находим общее количество ламп, для этого умножаем количество светильников на количество ламп в одном из них.

$$n_{\text{общ л}} = n_{\text{общ}} * n_{\text{л}} = 21 * 2 = 42; \quad (5.10)$$

Затем узнаем мощность электрической установки, для этого умножаем общее количество ламп на мощность одной лампы.

$$P_{\text{общ}} = n_{\text{общ л}} * P_{\text{л}} = 42 * 125 = 5,25 \text{ кВт}. \quad (5.11)$$

### 5.3 Экологическая безопасность

В лабораториях и на предприятиях, производственная деятельность которых связана с вредными веществами, должны быть разработаны нормативно-технические документы по безопасности труда при производстве, применении и хранении вредных веществ; установлены специальные системы по рекуперации вредных веществ и очистки от них технологических выбросов, нейтрализации отходов производства, промывных и сточных вод. Кроме всего вышеперечисленного, предприятие должно вести контроль за содержанием вредных веществ в воздухе рабочей зоны и обеспечивать средствами индивидуальной защиты работающих [140].

Отходы нефти и нефтепродуктов со сточными водами попадают в природные воды, оказывая вредное воздействие на флору и фауну.

Загазовывание на предприятии связано с поступлением в атмосферу газообразных загрязнителей, наибольшее значение среди которых имеют метан и его газообразные гомологи, пары летучих жидкостей: ацетона, метанола, бензола, толуола и т.д.; пары легких углеводородов. Загазовывание приводит к различным эффектам: кислотным дождям, парниковому эффекту,

появлению озоновых дыр.

На данном рабочем месте выявлен предполагаемый источник загрязнения окружающей среды, а именно воздействие на литосферу в результате образования отходов при поломке предметов вычислительной техники и оргтехники.

Очень важно знать, что профессиональное оборудование, используемое на предприятиях, содержит немало вредных веществ и, следовательно, может быть источником загрязнения литосферы. С целью защиты литосферы после завершения срока службы их необходимо утилизировать, и выкидывать на обычную свалку опасно как для окружающей среды, так и для здоровья людей.

Сегодня утилизация производственного оборудования – это обязательная процедура для всех официально работающих предприятий и юридических лиц. Нарушение ее ведет к налоговой и административной ответственности.

Вышедшее из строя ПЭВМ и сопутствующая оргтехника относится к IV классу опасности и подлежит специальной утилизации. Для оказания наименьшего влияния на окружающую среду, необходимо проводить специальную процедуру утилизации ПЭВМ и оргтехники, при которой более 90% отправится на вторичную переработку и менее 10% будут отправлены на свалки. При этом она должна соответствовать процедуре утилизации ГОСТ Р 53692-2009 Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов [141].

Помимо этого, немаловажным является процесс утилизации бумаги, полимерных и металлических бутылок и банок, пищевых отходов, использованных в значительных количествах при реализации данной научной работы. Ведь хранилища отходов на текущий момент крайне близки к заполнению или переполнены – и на территории городов постоянно образуются новые и новые стихийные свалки, и утилизация макулатуры с последующим запуском продуктов переработки в производство является

наиболее приемлемой схемой, решающей многие вопросы.

Селективный сбор таких отходов следует осуществлять в специальные контейнеры, расположенные в местах сбора твердых бытовых отходов, в жилых районах, у магазинов, торговых точек, в зонах отдыха.

## **5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

### **5.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть при разработке объекта исследований**

Разрабатываемое в рамках ВКР программное обеспечение не может являться причиной возникновения чрезвычайных ситуаций.

Однако чрезвычайные ситуации могут возникнуть на этапе разработке ПО. На территории офисного здания, где ведется работа над проектом, могут возникнуть следующие ЧС: пожар, ураган, опасность терроризма, обрушение здания, землетрясение, выход из строя коммунальных систем.

Наиболее вероятным чрезвычайным происшествием является пожар в здании [142]. В следующем подразделе рассмотрены мероприятия по предотвращению пожара и порядок действий в случае его возникновения.

### **5.4.2 Мероприятия по предотвращению ЧС и порядок действий в случае возникновения ЧС**

К числу мероприятий по предупреждению пожаров относят: строгое соблюдение мер безопасности; организация оповещения руководящего состава, формирований и населения; специальная подготовка и оснащение формирований. Для предупреждения возгораний в здании необходимо соблюдать правила пожарной безопасности: не оставлять включенными электроприборы; не включать в одну розетку одновременно несколько мощных потребителей электроэнергии, а также не перегружать розетку; не

применять бенгальские огни, хлопушки, свечи и другие пиротехнические изделия в помещениях; не устраивать игры со спичками и всеми легковоспламеняющимися предметами и т.д.

Мероприятия по предупреждению пожаров на объектах включают в себя прежде всего следующие профилактические меры: периодические проверки состояния пожарной безопасности объекта; проведение пожарно-технических обследований объекта представителями Государственного пожарного надзора с вручением предписаний; постоянный контроль за проведением пожароопасных работ; проведение инструктажей с рабочими и служащими объекта по вопросам пожарной безопасности; проверку исправности и правильного содержания средств пожаротушения, противопожарного водоснабжения и систем извещения о пожарах и прочее согласно ГОСТ 12.1.1004-91 «Пожарная безопасность. Общие требования» [143]. Эвакуация людей при пожаре и других чрезвычайных ситуациях выполняется без паники и в соответствии с планом, размещенным в здании, в котором выполняется ВКР.

### **5.5 Заключение по разделу социальная ответственность**

В ходе выполнения работы над разделом «Социальная ответственность» были выявлены опасные и вредные факторы, воздействию которых может быть подвержен разработчик ПО на рабочем месте офисного типа. Был проведен анализ влияния объекта исследования на окружающую среду и мероприятия по ее защите. Выявлены наиболее вероятные ЧС, проработаны мероприятия по их предотвращению и порядок действий в случае их возникновения. Также проведен анализ нормативной документации, проработаны правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности на рабочем месте офисного типа.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения выпускной квалификационной работы был подготовлен литературный обзор по теме «Водонефтяные эмульсии», который в полном объеме описывает основные свойства эмульсии, а также способы их разделения. Литературный обзор был составлен на основе множества зарубежных и отечественных статей. Часть обзора с описанием и сравнением основных программных продуктов для моделирования процессов подготовки нефти была переведена на иностранный язык.

В главе 2 описан объект исследования – водонефтяная эмульсия, а также приведены основные свойства данного объекта. Метод исследования процесса – математическое моделирование, которое подразумевает использование специализированного программного обеспечения для написания кода – «Python». Дополнительно с математической моделью представлены основные результаты работы по изучению скорости осаждения капель воды в нефтяной среде в лабораторных условиях. Описано основное оборудование и реагенты, которые были использованы при проведении экспериментов. Работа по изучению процесса осаждения и коалесценции капель воды в нефти планируется проводиться дополнительно в рамках изучения программы аспирантуры.

В главе с расчетами представлен порядок расчета остаточной обводненности, дополнительно приведены формулы для расчета основных параметров. Для представленной в главе 2 нефти была рассчитана остаточная обводненность – 1,5 %. Также в данной главе приведены зависимости показателя остаточной обводненности нефти от физико-химических свойств флюида и технологических параметров процесса. По кривым графика на рисунках раздела 3 можно сделать вывод о том, что модель работает верно, так как все зависимости научно обоснованы.

В ходе выполнения диссертации составлен раздел «Финансовый менеджмент», который отражает экономическую составляющую проекта. В данном разделе приведена экономическая целесообразность разработки в сравнении с аналогами. Приведены все основные диаграммы и таблицы с расчетами.

В главе 5 изучено влияние разработки математической модели на окружающую среду. Рассмотрены основные правовые и организационные нормы при проведении работ по написанию работы, также изучены основные чрезвычайные ситуации, которые могут произойти на рабочем месте студента. Дополнительно выполнен расчет искусственного освещения в помещении, в котором производились работы.

В дальнейшем планируется связать математическую модель с действующей установкой для расчета остаточной обводненности в динамическом режиме, а также дополнить данную модель возможностью включения деэмульгаторов, которые используются на установках подготовки нефти.



## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1        Официальный сайт международного энергетического агентства (IEA). [Электронный ресурс]: <https://www.iea.org/about> (дата обращения: 21.05.2023)
- 2        J. You, C. Li, D. Liu. Influence of the aggregation state of asphaltenes on structural properties of the model oil/brine interface. *Energy Fuels*, 33 (4) (2019), pp. 2994-3002, 10.1021/acs.energyfuels.8b04439.
- 3        D. Clause, D. Daniel-David, F. Gomez. Emulsion stability and interfacial properties – application to complex emulsions of industrial interest. *Colloid Stability*, 3 (2011), pp. 119-149, 10.1002/9783527631193.
- 4        Z. Wang, X. Lin, T. Yu. Formation and rupture mechanisms of visco-elastic interfacial films in polymer-stabilized emulsions. *J. Dispersion Sci. Technol.*, 40 (2019), pp. 612-626, 10.1080/01932691.2018.1478303.
- 5        F. Yu, H. Jiang, Z. Fan. Formation and flow behaviors of in situ emulsions in heavy oil reservoirs. *Energy Fuels*, 33 (2019), pp. 5961-5970, 10.1021/acs.energyfuels.9b00154.
- 6        B. Ding, G. Zhang, J. Ge. Research on mechanisms of alkaline flooding for heavy oil. *Energy Fuels*, 24 (2010), pp. 6346-6352, 10.1021/acs.energyfuels.100849u.
- 7        N.M. Zadymova, Z.N. Skvortsova, V.Y. Traskine. Rheological properties of heavy oil emulsions with different morphologies. *J. Petrol. Sci. Eng.*, 149 (2017), pp. 522-530, 10.1016/j.petrol.2016.10.063.
- 8        H. Zhong, T. Yang, H. Yin. Role of alkali type in chemical loss and ASP-flooding enhanced oil recovery in sandstone formations. *SPE Reservoir Eval. Eng.*, 23 (2020), pp. 431-445, 10.2118/191545-PA.
- 9        Lim, J.; Wong, S.; Law, M.; Samyudia, Y.; Dol, S. A Review on the Effects of Emulsions on Flow Behaviours and Common Factors Affecting the Stability of Emulsions. *J. Appl. Sci.* 2015, 15, 167–172.

- 10 Kokal, S.L. Crude-Oil Emulsions: A State-of-the-Art Review. *SPE Prod. Facil.* 2005, 20, 5–13.
- 11 He, L.; Lin, F.; Li, X.; Sui, H.; Xu, Z. Interfacial sciences in unconventional petroleum production: From fundamentals to applications. *Chem. Soc. Rev.* 2015, 44, 5446–5494.
- 12 Menon, V.; Wasan, D. Particle—fluid interactions with application to solid-stabilized emulsions part II. The effect of adsorbed water. *Colloids Surf.* 1986, 19, 107–122.
- 13 Winsor, P.A. Binary and multicomponent solutions of amphiphilic compounds. Solubilization and the formation, structure, and theoretical significance of liquid crystalline solutions. *Chem. Rev.* 1968, 68, 1–40.
- 14 McClements, D.J. Lipid-based Emulsions and emulsifiers. *Food Lipid Chem. Nutr. Biotechnol.* 2008, 3, 63–98.
- 15 Fingas, M.; Fieldhouse, B. Studies of the formation process of water-in-oil emulsions. *Mar. Pollut. Bull.* 2003, 47, 369–396.
- 16 Umar, A.A.; Saaid, I.B.M.; Sulaimon, A.A.; Pilus, R.B.M. A review of petroleum emulsions and recent progress on water-in-crude oil emulsions stabilized by natural surfactants and solids. *J. Pet. Sci. Eng.* 2018, 165, 673–690.
- 17 Gillberg, G.; Lehtinen, H.; Friberg, S. NMR and IR investigation of the conditions determining the stability of microemulsions. *J. Colloid Interface Sci.* 1970, 33, 40–53.
- 18 Friberg, S.; Mandell, L.; Fontell, K.; Lindblad, C.-G.; Lindberg, A.A.; Jansen, G.; Lamm, B.; Samuelsson, B. Mesomorphous Phases in Systems of Water-Nonionic Emulsifier-Hydrocarbon. *Acta Chem. Scand.* 1969, 23, 1055–1057.
- 19 Schramm, L.L. Emulsions: Fundamentals and Applications in the Petroleum Industry. In *Petroleum Emulsion*; Schramm, L.L., Ed.; American Chemical Society: Washington, DC, USA, 1992.

- 20 Oh, C.; Chung, S.-C.; Shin, S.-I.; Kim, Y.C.; Im, S.-S.; Oh, S.-G. Distribution of Macropores in Silica Particles Prepared by Using Multiple Emulsions. *J. Colloid Interface Sci.* 2002, 254, 79–86.
- 21 McClements, D.J. *Food Emulsions: Principles, Practices, and Techniques*; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 2004.
- 22 Guzey, D.; McClements, D.J. Formation, stability and properties of multilayer emulsions for application in the food industry. *Adv. Colloid Interface Sci.* 2006, 128–130, 227–248.
- 23 Yan, X.; Ma, C.; Cui, F.; McClements, D.J.; Liu, X.; Liu, F. Protein-stabilized Pickering emulsions: Formation, stability, properties, and applications in foods. *Trends Food Sci. Technol.* 2020, 103, 293–303.
- 24 Mukherjee, S.; Kushnick, A.P. *Effect of Demulsifiers on Interfacial Properties Governing Crude Oil Demulsification*; ACS Publications: Washington, DC, USA, 1989; pp. 364–374.
- 25 Hu, G.; Li, J.; Zeng, G. Recent development in the treatment of oily sludge from petroleum industry: A review. *J. Hazard. Mater.* 2013, 261, 470–490.
- 26 Zhang, J.; Li, J.; Thring, R.W.; Hu, X.; Song, X. Oil recovery from refinery oily sludge via ultrasound and freeze/thaw. *J. Hazard. Mater.* 2012, 203–204, 195–203.
- 27 Azad, A.R.M.; Ugelstad, J.; Fitch, R.M.; Hansen, F.K. Emulsification and Emulsion Polymerization of Styrene Using Mixtures of Cationic Surfactant and Long Chain Fatty Alcohols or Alkanes as Emulsifiers. In *Emulsion Polymerization*; ACS Publications: Washington, DC, USA, 1976; pp. 1–23.
- 28 Asselah, A.; Pinazo, A.; Mezei, A.; Pérez, L.; Tazerouti, A. Self-Aggregation and Emulsifying Properties of Methyl Ester Sulfonate Surfactants. *J. Surfactants Deterg.* 2017, 20, 1453–1465.
- 29 Akkuş-Dağdeviren, Z.B.; Wolf, J.D.; Kurpiers, M.; Shahzadi, I.; Steinbring, C.; Bernkop-Schnürch, A. Charge reversal self-emulsifying drug delivery systems: A comparative study among various phosphorylated surfactants. *J. Colloid Interface Sci.* 2021, 589, 532–544.

- 30 Wu, Z.; Li, Y.; Li, J.; Wang, M.; Wang, Z. Study on the properties and self-assembly of fatty alcohol ether carboxylic ester anionic surfactant and cationic surfactant in a mixed system. *New J. Chem.* 2019, 43, 12494–12502.
- 31 Li, H.-P.; Zhao, H.; Liao, K. The Preparation of Asphalt Emulsions with Dissymmetric Gemini Quaternary Ammonium Salts Cationic Surfactants. *Energy Sources Part A Recover. Util. Environ. Eff.* 2013, 35, 2285–2293.
- 32 Mahmoud, S.A.; Dardir, M.M. Synthesis and Evaluation of a New Cationic Surfactant for Oil-Well Drilling Fluid. *J. Surfactants Deterg.* 2010, 14, 123–130.
- 33 Liu, J.; Liu, Z.; Yuan, T.; Wang, C.; Gao, R.; Hu, G.; Xu, J.; Zhao, J. Synthesis and properties of zwitterionic gemini surfactants for enhancing oil recovery. *J. Mol. Liq.* 2020, 311, 113179.
- 34 Zhou, M.; Zhou, L.; Guo, X. Synthesis of Sulfobetaine-Type Zwitterionic Gemini Surfactants (EAPMAC) and Their Oilfield Application Properties. *J. Surfactants Deterg.* 2019, 22, 23–32.
- 35 Bowers, R.R.; Temkin, A.M.; Guillette, L.J.; Baatz, J.E.; Spyropoulos, D.D. The commonly used nonionic surfactant Span 80 has RXR $\alpha$  transactivation activity, which likely increases the obesogenic potential of oil dispersants and food emulsifiers. *Gen. Comp. Endocrinol.* 2016, 238, 61–68.
- 36 Opawale, F.O.; Burgess, D.J. Influence of Interfacial Properties of Lipophilic Surfactants on Water-in-Oil Emulsion Stability. *J. Colloid Interface Sci.* 1998, 197, 142–150.
- 37 Ghaicha, L.; Leblanc, R.M.; Villamagna, F.; Chattopadhyay, A.K. Monolayers of Mixed Surfactants at the Oil-Water Interface, Hydrophobic Interactions, and Stability of Water-in-Oil Emulsions. *Langmuir* 1995, 11, 585–590.
- 38 Wollenweber, C.; Makievski, A.; Miller, R.; Daniels, R. Adsorption of hydroxypropyl methylcellulose at the liquid/liquid interface and the effect on emulsion stability. *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 2000, 172, 91–101.

- 39 Morais, W.J.S.; Franceschi, E.; Dariva, C.; Borges, G.R.; Santos, A.F.; Santana, C.C. Dilatational Rheological Properties of Asphaltenes in Oil–Water Interfaces: Langmuir Isotherm and Influence of Time, Concentration, and Heptol Ratios. *Energy Fuels* 2017, 31, 10233–10244.
- 40 Tchoukov, P.; Yang, F.; Xu, Z.; Dabros, T.; Czarnecki, J.; Sjöblom, J. Role of Asphaltenes in Stabilizing Thin Liquid Emulsion Films. *Langmuir* 2014, 30, 3024–3033.
- 41 Langevin, D.; Argillier, J.-F. Interfacial behavior of asphaltenes. *Adv. Colloid Interface Sci.* 2016, 233, 83–93.
- 42 Yang, F.; Tchoukov, P.; Dettman, H.; Teklebrhan, R.B.; Liu, L.; Dabros, T.; Czarnecki, J.; Masliyah, J.; Xu, Z. Asphaltene Subfractions Responsible for Stabilizing Water-in-Crude Oil Emulsions. Part 2: Molecular Representations and Molecular Dynamics Simulations. *Energy Fuels* 2015, 29, 4783–4794.
- 43 Ma, J.; Li, X.; Zhang, X.; Sui, H.; He, L.; Wang, S. A novel oxygen-containing demulsifier for efficient breaking of water-in-oil emulsions. *Chem. Eng. J.* 2020, 385, 123826.
- 44 Jian, C.; Poopari, M.R.; Liu, Q.; Zerpa, N.; Zeng, H.; Tang, T. Reduction of Water/Oil Interfacial Tension by Model Asphaltenes: The Governing Role of Surface Concentration. *J. Phys. Chem. B* 2016, 120, 5646–5654.
- 45 Li, D.D.; Greenfield, M.L. Chemical compositions of improved model asphalt systems for molecular simulations. *Fuel* 2014, 115, 347–356.
- 46 Deniz, C.U.; Yasar, M.; Klein, M.T. Stochastic Reconstruction of Complex Heavy Oil Molecules Using an Artificial Neural Network. *Energy Fuels* 2017, 31, 11932–11938.
- 47 Rocha, J.A.; Baydak, E.; Yarranton, H.W. What Fraction of the Asphaltenes Stabilizes Water-in-Bitumen Emulsions? *Energy Fuels* 2018, 32, 1440–1450.
- 48 Gray, M.R.; Tykwinski, R.R.; Stryker, J.M.; Tan, X. Supramolecular Assembly Model for Aggregation of Petroleum Asphaltenes. *Energy Fuels* 2011, 25, 3125–3134.

- 49 Osborn, H.T.; Akoh, C.C. Effect of emulsifier type, droplet size, and oil concentration on lipid oxidation in structured lipid-based oil-in-water emulsions. *Food Chem.* 2004, 84, 451–456.
- 50 McClements, D.J. Protein-stabilized emulsions. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* 2004, 9, 305–313.
- 51 Nakamura, A.; Takahashi, T.; Yoshida, R.; Maeda, H.; Corredig, M. Emulsifying properties of soybean soluble polysaccharide. *Food Hydrocoll.* 2004, 18, 795–803.
- 52 Dickinson, E. Hydrocolloids as emulsifiers and emulsion stabilizers. *Food Hydrocoll.* 2009, 23, 1473–1482.
- 53 Lee, D.; Kim, J.H. Emulsion polymerization of styrene using an alkali-soluble random copolymer as polymeric emulsifier. *J. Polym. Sci. Part A Polym. Chem.* 1998, 36, 2865–2872.
- 54 Lee, D.-Y.; Kim, J.-H.; Min, T.-I. Role of alkali-soluble random copolymer in emulsion polymerization. *Asp. E* 1999, 153, 89–97.
- 55 Zhou, J.; Wang, L.; Ma, J. Recent Research Progress in the Synthesis and Properties of Amphiphilic Block Co-polymers and Their Applications in Emulsion Polymerization. *Des. Monomers Polym.* 2009, 12, 19–41.
- 56 Edwards, S.E.; Flynn, S.; Hobson, J.J.; Chambon, P.; Cauldbeck, H.; Rannard, S.P. Mucus-responsive functionalized emulsions: Design, synthesis and study of novel branched polymers as functional emulsifiers. *RSC Adv.* 2020, 10, 30463–30475.
- 57 Ding, P.; Liu, W.; Zhao, Z. Roles of short amine in preparation and sizing performance of partly hydrolyzed ASA emulsion stabilized by Laponite particles. *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 2011, 384, 150–156.
- 58 Nie, L.; Liu, S.; Shen, W.; Chen, D.; Jiang, M. One-pot synthesis of amphiphilic polymeric Janus particles and their self-assembly into supermicelles with a narrow size distribution. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 119, 6437–6440.

- 59 Cheng, L.; Zhang, G.; Zhu, L.; Chen, D.; Jiang, M. Nanoscale Tubular and Sheetlike Superstructures from Hierarchical Self-Assembly of Polymeric Janus Particles. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2008, 47, 10171–10174.
- 60 Li, X.; Chen, L.; Cui, D.; Jiang, W.; Han, L.; Niu, N. Preparation and application of Janus nanoparticles: Recent development and prospects. *Coord. Chem. Rev.* 2021, 454, 214318.
- 61 Yi, C.; Yang, Y.; Jiang, J.; Liu, X.; Jiang, M. Research and application of particle emulsifiers. *Prog. Chem.* 2011, 23, 65.
- 62 Lagaly, G.; Reese, M.; Abend, S. Smectites as colloidal stabilizers of emulsions: I. Preparation and properties of emulsions with smectites and nonionic surfactants. *Appl. Clay Sci.* 1999, 14, 83–103.
- 63 Dimitrova, T.D.; Leal-Calderon, F.J. Forces between emulsion droplets stabilized with Tween 20 and proteins. *Langmuir* 1999, 15, 8813–8821.
- 64 Salou, M.; Siffert, B.; Jada, A. Study of the stability of bitumen emulsions by application of DLVO theory. *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 1998, 142, 9–16.
- 65 De Vleeschauwer, D.; Van der Meeren, P.J. Colloid chemical stability and interfacial properties of mixed phospholipid–non-ionic surfactant stabilized oil-in-water emulsions. *Colloids Surfaces. A Physicochem. Eng. Asp.* 1999, 152, 59–66.
- 66 Petkov, J.; Sénéchal, J.; Guimberteau, F.; Leal-Calderon, F. Indirect Evidence for Non-DLVO Forces in Emulsions. *Langmuir* 1998, 14, 4011–4016.
- 67 Gunning, A.P.; Mackie, A.R.; Wilde, A.P.J.; Morris, V.J. Atomic Force Microscopy of Emulsion Droplets: Probing Droplet–Droplet Interactions. *Langmuir* 2003, 20, 116–122.
- 68 Dagastine, R.; Stevens, G.; Chan, D.; Grieser, F. Forces between two oil drops in aqueous solution measured by AFM. *J. Colloid Interface Sci.* 2004, 273, 339–342.

- 69 Shi, C.; Zhang, L.; Xie, L.; Lu, X.; Liu, Q.; He, J.; Mantilla, C.A.; Berg, F.G.A.V.D.; Zeng, H. Surface Interaction of Water-in-Oil Emulsion Droplets with Interfacially Active Asphaltenes. *Langmuir* 2017, 33, 1265–1274.
- 70 Liu, J.; Xu, Z.; Masliyah, J. Colloidal forces between bitumen surfaces in aqueous solutions measured with atomic force microscope. *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 2005, 260, 217–228.
- 71 Morris, V.J.; Woodward, N.C.; Gunning, A.P. Atomic force microscopy as a nanoscience tool in rational food design. *J. Sci. Food Agric.* 2011, 91, 2117–2125.
- 72 Silva, H.D.; Cerqueira, M.Â.; Vicente, A.A. Nanoemulsions for Food Applications: Development and Characterization. *Food Bioprocess Technol.* 2012, 5, 854–867.
- 73 Wang, Z.; Xu, Y.; Liu, Y.; Liu, X.; Rui, Z. Molecular Dynamics-Based Simulation on Chemical Flooding Produced Emulsion Formation and Stabilization: A Critical Review. *Arab. J. Sci. Eng.* 2020, 45, 7161–7173.
- 74 Li, B.; Zhang, L.; Liu, S.; Fan, M. Effects of Surfactant Headgroups on Oil-in-Water Emulsion Droplet Formation: An Experimental and Simulation Study. *J. Surfactants Deterg.* 2019, 22, 85–93.
- 75 Kong, X.; Zhao, J.; Zhang, L.; Liang, Z.; Wang, J. Design, synthesis and characterization of bitumen emulsifiers based on molecular simulation. *Kem. Ind.* 2019, 68, 1–6.
- 76 Liu, J.; Zhao, Y.; Ren, S. Molecular Dynamics Simulation of Self-Aggregation of Asphaltenes at an Oil/Water Interface: Formation and Destruction of the Asphaltene Protective Film. *Energy Fuels* 2015, 29, 1233–1242.
- 77 Dehaghani, A.H.S.; Taleghani, M.S.; Badizad, M.H.; Daneshfar, R. Simulation study of the Gachsaran asphaltene behavior within the interface of oil/water emulsion: A case study. *Colloids Interface Sci. Commun.* 2019, 33, 100202.
- 78 Niu, Z.; Ma, X.; Manica, R.; Yue, T. Molecular Destabilization Mechanism of Asphaltene Model Compound C5Pe Interfacial Film by EO-PO



Copolymer: Experiments and MD Simulation. *J. Phys. Chem. C* 2019, 123, 10501–10508.

79 Duan, M.; Song, X.; Zhao, S.; Fang, S.; Wang, F.; Zhong, C.; Luo, Z. Layer-by-Layer Assembled Film of Asphaltenes/Polyacrylamide and Its Stability of Water-in-Oil Emulsions: A Combined Experimental and Simulation Study. *J. Phys. Chem. C* 2017, 121, 4332–4342.

80 Lv, G.; Gao, F.; Liu, G.; Yuan, S. The properties of asphaltene at the oil-water interface: A molecular dynamics simulation. *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 2017, 515, 34–40.

81 Chen, G.; Hao, B.; Wang, Y.; Wang, Y.; Xiao, H.; Li, H.; Huang, X.; Shi, B. Insights into Regional Wetting Behaviors of Amphiphilic Collagen for Dual Separation of Emulsions. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2021, 13, 18209–18217.

82 Baiz, C.R.; Błasiak, B.; Bredenbeck, J.; Cho, M.; Choi, J.-H.; Corcelli, S.A.; Dijkstra, A.G.; Feng, C.-J.; Garrett-Roe, S.; Ge, N.-H.; et al. Vibrational Spectroscopic Map, Vibrational Spectroscopy, and Intermolecular Interaction. *Chem. Rev.* 2020, 120, 7152–7218.

83 Wang, H.; Gao, T.; Xiong, W. Self-Phase-Stabilized Heterodyne Vibrational Sum Frequency Generation Microscopy. *ACS Photon.* 2017, 4, 1839–1845.

84 Roy, S.; Gruenbaum, S.M.; Skinner, J.L. Theoretical vibrational sum-frequency generation spectroscopy of water near lipid and surfactant monolayer interfaces. II. Two-dimensional spectra. *J. Chem. Phys.* 2014, 141, 22D505.

85 Hosseinpour, S.; Götz, V.; Peukert, W. Effect of Surfactants on the Molecular Structure of the Buried Oil/Water Interface. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 25143–25150.

86 Singh, P.C.; Nihonyanagi, S.; Yamaguchi, S.; Tahara, T. Ultrafast vibrational dynamics of water at a charged interface revealed by two-dimensional heterodyne-detected vibrational sum frequency generation. *J. Chem. Phys.* 2012, 137, 094706.

- 87 Roy, S.; Gruenbaum, S.M.; Skinner, J.L. Theoretical vibrational sum-frequency generation spectroscopy of water near lipid and surfactant monolayer interfaces. *J. Chem. Phys.* 2014, 141, 18C502.
- 88 Pullanchery, S.; Kulik, S.; Rehl, B.; Hassanali, A.; Roke, S.J.S. Charge transfer across C–HO hydrogen bonds stabilizes oil droplets in water. *Science* 2021, 374, 1366–1370.
- 89 Kilpatrick, P.K. Water-in-Crude Oil Emulsion Stabilization: Review and Unanswered Questions. *Energy Fuels* 2012, 26, 4017–4026.
- 90 Gupta, A.; Eral, H.B.; Hatton, T.A.; Doyle, P.S. Nanoemulsions: Formation, properties and applications. *Soft Matter* 2016, 12, 2826–2841.
- 91 Marrucci, G. A theory of coalescence. *Chem. Eng. Sci.* 1969, 24, 975–985.
- 92 Ravera, F.; Dziza, K.; Santini, E.; Cristofolini, L.; Liggieri, L. Emulsification and emulsion stability: The role of the interfacial properties. *Advances in Colloid and Interface. Science* 2021, 288, 102344.
- 93 Zhang, Z.; Xu, G.Y.; Wang, F.; Dong, S.L.; Li, Y.M. Characterization and demulsification of poly (ethylene oxide)–block–poly (propylene oxide)–block–poly (ethylene oxide) copolymers. *J. Colloid Interface Sci.* 2014, 277, 464–470.
- 94 Delgado-Linares, J.G.; Pereira, J.C.; Rondón, M.; Bullon, J.; Salager, J.L. Breaking of water-in-crude oil emulsions. 6. Estimating the demulsifier performance at optimum formulation from both the required dose and the attained instability. *Energy Fuels* 2016, 30, 5483–5491.
- 95 Mohammed, R.; Bailey, A.; Luckham, P.; Taylor, S. Dewatering of crude oil emulsions 2. Interfacial properties of the asphaltic constituents of crude oil. *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* 1993, 80, 237–242.
- 96 Goldszal, A.; Bourrel, M. Demulsification of Crude Oil Emulsions: Correlation to Microemulsion Phase Behavior. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2000, 39, 2746–2751.

- 97 Al-Sabagh, A.M.; Kandile, N.G.; El-Ghazawy, R.A.; El-Din, M.R.N. Synthesis and evaluation of some new demulsifiers based on bisphenols for treating water-in-crude oil emulsions. *Egypt. J. Pet* 2011, 20, 67–77.
- 98 Hu, C.; Liu, S.; Fang, S.; Xiang, W.; Duan, M. Dissipative particle dynamics investigation of demulsification process and mechanism of comb-like block polyether. *Polym. Adv. Technol.* 2018, 29, 3171–3180.
- 99 Chen, T.; Mohammed, R.; Bailey, A.; Luckham, P.; Taylor, S. Dewatering of crude oil emulsions 4. Emulsion resolution by the application of an electric field. *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* 1994, 83, 273–284.
- 100 Kotsaridou-Nagel, M.; Kragert, B. Demulsifying water-in-oil emulsions through chemical addition. *Erdoel Erdgas Kohle* 1996, 112, 72–79.
- 101 Urdahl, O.; Sjöblom, J. Water-in-crude oil emulsions from the Norwegian Continental Shelf. A stabilization and destabilization study. *J. Dispers. Sci. Technol.* 1995, 16, 557–574.
- 102 Hartands, S.; Jeelani, S.A.K. A study of demulsifying mechanism on crude oil demulsifier. *Colloids Surf.* 1994, 88, 289–302.
- 103 Bhardwaj, A.; Hartland, S.J. Kinetics of coalescence of water droplets in water-in-crude. *Disper. Sci. Technol.* 1994, 15, 133–136.
- 104 Sjöblom, J. *Emulsions—A Fundamental and Practical Approach*; Kluwer Academic Publishers: Dordrecht, The Netherlands, 1992; pp. 103–106.
- 105 Bhardwaj, A.; Hartland, S. Dynamics of Emulsification and Demulsification of Water in Crude Oil Emulsions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1994, 33, 1271–1279.
- 106 Zolfaghari, R.; Fakhru’L-Razi, A.; Abdullah, L.C.; Elnashaie, S.S.E.H.; Pendashteh, A. Demulsification techniques of water-in-oil and oil-in-water emulsions in petroleum industry. *Sep. Purif. Technol.* 2016, 170, 377–407.
- 107 Detloff, T.; Lerche, D. Centrifugal separation in tube and disc geometries: Experiments and theoretical models. *Acta Mech.* 2008, 201, 83–94.

108 Chiesa, M.; Ingebrigtsen, S.; Melheim, J.; Hemmingsen, P.; Hansen, E.; Hestad, Ø. Investigation of the role of viscosity on electrocoalescence of water droplets in oil. *Sep. Purif. Technol.* 2006, 50, 267–277.

109 Guo Kun, Q. Analysis on factors influencing crude oil demulsification effectiveness by ultrasonic wave. *Pet. Geol. Recovery Effic.* 2005, 12, 76–78.

110 Tan, W.; Yang, X.; Tan, X. Study on Demulsification of Crude Oil Emulsions by Microwave Chemical Method. *Sep. Sci. Technol.* 2007, 42, 1367–1377.

111 Kujawa, J.; Cerneaux, S.; Kujawski, W.; Knozowska, K. Hydrophobic Ceramic Membranes for Water Desalination. *Appl. Sci.* 2017, 7, 402.

112 Nadarajah, N.; Singh, A.; Ward, O.P. Evaluation of a mixed bacterial culture for demulsification of water-in-petroleum oil emulsions. *World J. Microbiol. Biotechnol.* 2002, 18, 435–440.

113 Choudhary, P.; Srivastava, R.K.; Mahendra, S.N.; Motahhir, S. Sustainable Solution for Crude Oil and Natural Gas Separation using Concentrated Solar Power Technology. *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* 2017, 225, 12134.

114 Sousa, A.M.; Pereira, M.J.; Matos, H.A. Oil-in-water and water-in-oil emulsions formation and demulsification. *J. Pet. Sci. Eng.* 2021, 210, 110041.

115 Leontyeva A.I., Fadhli K.H.K.A., Farhan W.H., Mathematical modeling of the separation process of oil-water emulsions using a demulsifier of natural origin. - 2020 International science and technology condereence on earth science, Vladivostok.

116 Lanre Oshinowo, Ehab Elsaadawy, Regis Vilagines // CFD modeling of oil-water separation efficiency in three-phase separators. - 10th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries SINTEF, Trondheim, Norway 17-19 June 2014.

117 Э.Р. Тухбатова, А.А. Мусин, Р.Р. Юлмухаметова, Л.А. Ковалева. Исследование влияния тепловой конвекции на процесс разрушения водонефтяной эмульсии при СВЧ воздействии. Башкирский государственный

университет. Россия, Республика Башкортостан. «Вестник Башкирского университета», 2017. Т. 22 № 4.

118 Ковалева Л.А., Зиннатуллин Р.Р., Муллаянов А.И., Мавлетов М.В., Благодичиннов В.Н. Эволюция микроструктуры водонефтяных эмульсий в высокочастотных и сверхвысокочастотных электромагнитных полях // Теплофизика высоких температур. 2013. Т. 51. № 6. С. 952–955. DOI: 10.7868/S0040364413060173.

119 ГОСТ Р 8.610-2004. «Государственная система обеспечения единства измерений. Плотность нефти. Таблицы пересчета.

120 Макарова Т.П., Г.Ф. Харисова. Технология переработки нефти и газа: Методические указания по проведению практических занятий по дисциплине «Технология переработки нефти и газа» для студентов заочной формы обучения и студентов АЗЦ МРЦПК РТ специальности 080502 «Экономика и управление на предприятиях нефтяной и газовой промышленности». – Альметьевск: Альметьевский государственный нефтяной институт, 2009. – 84 с.

121 ГСССД 2-77. «Таблицы стандартных справочных данных. Вода. Плотность при атмосферном давлении и температурах от 0 до 100 °С».

122 Конструирование и расчет машин химических производств: Учебник для машиностроительных вузов по специальности «Химическое машиностроение и аппаратостроение» / Ю.И. Гусев, И.Н. Карасев, Э.Э. Кольман-Иванов и др. – М.: Машиностроение, 1985. – 408 с., ил.

123 Гаврикова Н.А. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р. Тухватулина, И.Г. Видяев, Г.Н. Серикова, Н.В. Шаповалова; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 73 с.

124 Руководство к своду знаний по управлению проектами (Руковод-ство РМВОК), 4-е издание, 2008 г. – 241 с.

125 Методические рекомендации по оценке эффективности инвестиционных проектов (вторая редакция), утверждено Министерство экономики РФ, Министерство финансов РФ № ВК 477 от 21.06.1999 г. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.cfin.ru/>, свободный.

126 Международный стандарт ICCSR 26000:2011. Социальная ответственность организации. Требования / Междунар. комитет по корпорат. соц. ответственности. – 2011.

127 Трудовой кодекс РФ (ТК РФ) от 30.12.2001 N 197-ФЗ.

128 Федеральный закон: "О специальной оценке условий труда", от 28.12.2013 г. N 426-ФЗ.

129 СанПиН 2.2.4.335916 «Санитарно-эпидемиологические требования к физическим факторам на рабочих местах» от 21.06.2016.

130 СанПиН 2.2.0.55596 «Гигиена труда. Гигиенические требования к условиям труда женщин».

131 СНиП 2.09.0487 "Административные и бытовые здания".

132 СанПиН 2.2.4.129403 «2.2.4. Физические факторы производственной среды. Гигиенические требования к аэроионному составу воздуха производственных и общественных помещений».

133 СанПиН 2.2.2/2.4.134003 «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы».

134 Перечень вредных и (или) опасных производственных факторов, при наличии которых проводятся обязательные предварительные и периодические медицинские осмотры (обследования), утв. Приказом Минздравсоцразвития РФ от 12.04.2011 № 302н.

135 ГОСТ 12.0.003-2015 ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.

136 СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

137 ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.

138 СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03 «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий».

139 Постановление Главного государственного санитарного врача РФ от 03.06.2003 N 118 (ред. от 21.06.2016) О введении в действие санитарно-эпидемиологических правил и нормативов СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 (вместе с СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. 2.2.2. Гигиена труда, технологические процессы, сырье, материалы, оборудование, рабочий инструмент. 2.4. Гигиена детей и подростков. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы, утв. Главным государственным санитарным врачом РФ 30.05.2003)

140 ГОСТ 12.1.007-76 «Система стандартов безопасности труда. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности».

141 ГОСТ Р 53692-2009 «Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов».

142 «Трудовой кодекс Российской Федерации» от 30.12.2001 N 197-ФЗ [Электронный ресурс]: КонсультантПлюс. Надежная правовая поддержка. URL: [http://www.consultant.ru/document/cons\\_doc\\_LAW\\_34683/](http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_34683/), свободный – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 5.05.2023.

143 ГОСТ 12.1.004-91 «Пожарная безопасность. Общие требования» [Электронный ресурс]: Электронный фонд правовых и нормативно-технических документов. URL: <https://docs.cntd.ru/document/9051953>, свободный – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 8.05.2023.

144 Официальный сайт компании «AspenTech». [Электронный ресурс] - <https://www.aspentech.com/en> (дата обращения: 09.09.2022).

145 Официальный сайт компании «Ansys». [Электронный ресурс] - <https://www.ansys.com/> (дата обращения: 09.09.2022).

146 Цифровой двойник. Моделирование процесса гидрооблагораживания нефтяных фракций с применением методов машинного обучения. Деловой журнал «Neftegas.ru»: Цифровизация. 2019 г. [Электронный ресурс] - <https://magazine.neftegaz.ru/upload/iblock/948/948400dd16fdd527cd2c43d2eb49bcbd.pdf> (дата обращения 22.10.2022).

147 Официальный сайт группы компаний «РусскийСАПР». [Электронный ресурс] - <https://rusapr.ru/pages/shortcode/schneider-electric-invensys/26-software/se/108-hextran?ysclid=17u5kl9cpe354606178> (дата обращения: 09.09.2022).

148 Официальный сайт компании по разработке компьютерных тренажеров для нефтегазового сектора «RTSim». [Электронный ресурс] - <https://rtsim.ru/about?ysclid=17u5ppg1lx755380894> (дата обращения: 09.09.2022).

149 Д. С. Сидоров, А. А. Хоменко. Моделирование блока ректификации в программе RTSim. Вестник технологического университета. 2015. Т.18, №10.

150 Официальный сайт компании «Аэрогаз». [Электронный ресурс] - <http://aerogas.ru/aerosym.html> (дата обращения: 09.09.2022).

151 Официальный сайт компании «GIBBS». [Электронный ресурс] - <http://www.gibbsim.ru/node/16> (дата обращения: 09.09.2022).

152 О.Ю. Манихин, Д.А. Ожерельев, М.В. Медведев, Н.Р. Георгиевская. Комплексное моделирование технологических процессов промышленной подготовки углеводородного сырья с применением отечественного программного обеспечения. Журнал «Газовая промышленность»: Автоматизация. № 7. 771. 2018 г.

153 Официальный сайт компании «ChemFort». [Электронный ресурс] - <http://chemfort.ru/> (дата обращения: 09.09.2022)



## ПРИЛОЖЕНИЕ А

### Раздел 1.7

#### The main developers of mathematical models of oil treatment processes in Russia and foreign countries

Обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Котельников Александр		

Руководитель ВКР:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Долганов И.М.	к.т.н.		

Консультант – лингвист отделения иностранных языков ШБИП:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Надеина Л.В.	к. филол. н.		

## 1.7 The main developers of mathematical models of oil treatment processes in Russia and foreign countries

Modern chemical-technological processes are so complex that for their change it is necessary to use not only analytics, but also the results of simulation modeling. In this case, it is necessary to work with a model of a physical object and it is on the model to study its properties and behavior in any situations. There are many software packages for this.

Secondly, simulation modeling makes it possible to more effectively perform the study, design and optimization of the technological process: since working with the model takes into account the influence of many different parameters on the chemical technological process (CTP), the technologist will be able to find those qualitative and quantitative characteristics that will save time and money to change the HTP, as well as reduce the likelihood of errors.

For example, in the fuel industry, simulation software products are used for processing heavy sour oil and oil treatment. The application in the pharmaceutical industry is designed to simulate reactive and batch distillations of hydrocarbons.

### 1.7.1 Foreign programs

#### 1.7.1.1 HYSYS and HYSIM

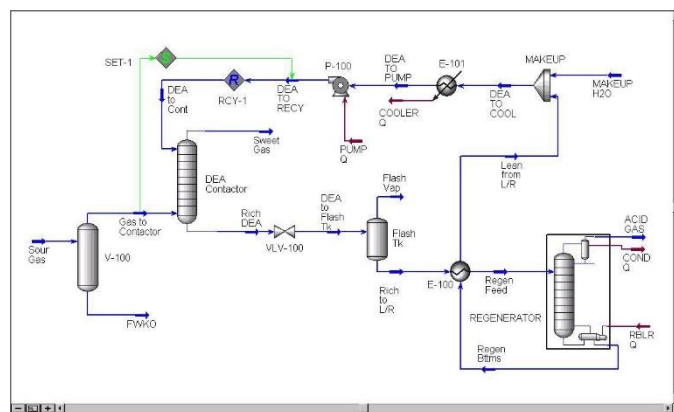


Fig. A.1 AspenHYSYS modeling system

Products of the Canadian company Hyprotech Ltd. Hysim is a product for PC/DOS platform. It allows you to perform static simulation of almost all major gas processing, oil refining and petrochemical processes.

Particular emphasis is placed on working with the Peng-Robinson equation of state. The program has an extended set of modifications of the Peng-Robinson equation of state, including work with asymmetric binary interaction coefficients and various displacement rules, modifications for working with water, glycols and amines. The package has an original, highly advanced algorithm for calculating distillation columns, has virtually no restrictions on the set of specified specifications and the complexity of the column.

The program has a tabular data entry, which then builds an image of the scheme in the AUTOCAD format. The additional Hyprop package makes it possible to effectively process experimental data on the properties of pure components and then use the obtained correlations in calculations.

In 1996, the company introduced a new development - Hysys, designed specifically for 32-bit PC / Windows platforms. Version V12.2 is currently out. It is possible to perform calculations of the main design characteristics of separation equipment, tanks, heat exchange equipment, tray and packed distillation columns and estimate the cost of equipment. However, it is worth noting that for domestic companies there are certain difficulties with the choice of equipment, since in this software the choice is made on the basis of foreign norms and rules. For each simulation and output of results, it is necessary to compare the selected equipment with the requirements of the regulatory and technical documentation of the Russian Federation.

All models in aspenONE software products are based on process knowledge and combine all previous engineering and information technology innovations to provide reliable results proven in real industrial installations. The calculation error in the Hysys software is approximately 15% [144].

### 1.7.1.2 HoneyWell Unisim Design

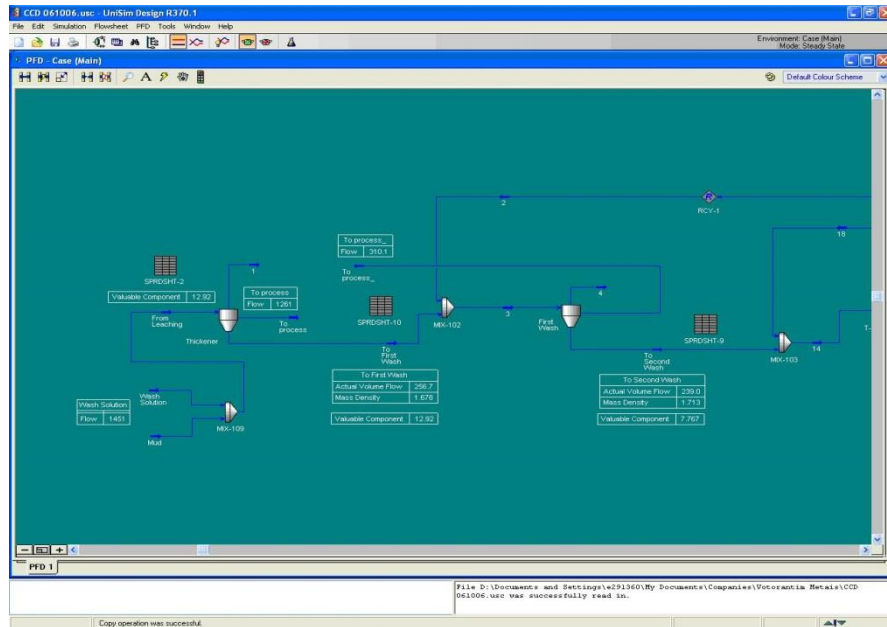


Fig. A.2 Modeling program UniSim Design

UniSim Design is a user-friendly, interactive process modeling software environment that allows engineers to create static and dynamic models for plant design, performance monitoring, troubleshooting, process optimization, plant planning, and asset management.

The program contains five different optimization methods designed for problems without restrictions and with restrictions. There is a special mechanism for returning to the starting point in case the optimization algorithm “drives” the circuit into an unrealizable area. UniSim Design contains a set of auxiliary programs (utilities) that can be assigned to streams or operations. These programs interact with circuit variables and provide the user with additional information.

The most important feature of the UniSim Design program is its multi-circuit architecture. The interface of the UniSim Design program is organized in such a way that it corresponds to the approach to process modeling described above, being, in

fact, its integral part. A well-organized interface is the most important prerequisite for successful simulation (of course, provided that the applied computational methods are adequate). In this work, UniSim Design is used to compare the existing gas treatment scheme and the modernized one, to compare thermobaric parameters, commercial gas composition, and technological regime [145].

In the article [146], a comparison of simulators with an experiment for the process of stabilization of hydrotreated diesel fuel is considered. As a result of the study, it was found that the calculation error for Unisim Design was approximately 17%.

### 1.7.1.3 Modelling system “Hextran”

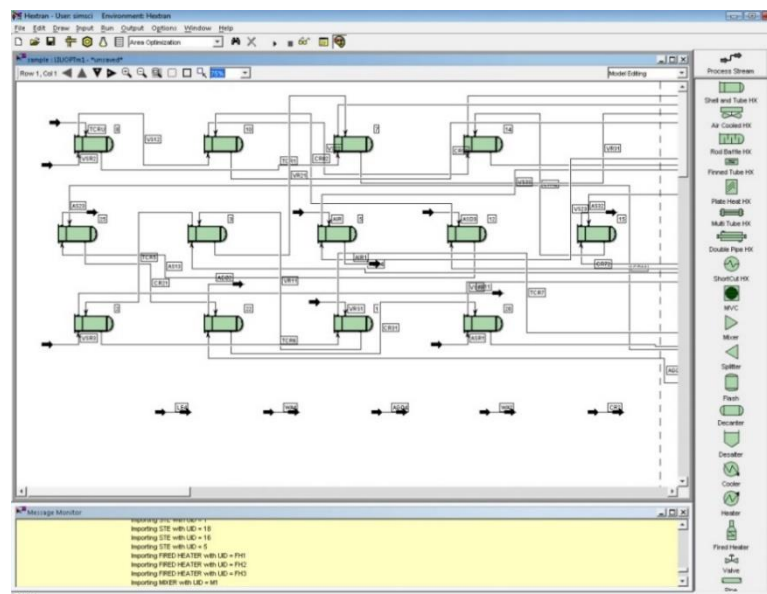


Fig. A.3 HEXTRAN

HEXTRAN is the first SIMSCI product implemented in the SIM4ME user environment and therefore has become the main technology for modeling and optimizing heat transfer systems for all SIM4ME environments. HEXTRAN users will continually see updates to the look and functionality.

The graphical user interface is based on the Java programming language and offers a built-in HTML help system. These characteristics make it possible to obtain standard data tables in HTML and Excel formats. The new graphical user interface provides a great display of post-processing and plots results based on target networks, master result curves, and zone analysis operations.

How to use HEXTRAN:

- Design of heat exchangers;
- Operational analysis of heat exchangers;
- Pinch analysis;
- Network synthesis (Network synthesis);
- Optimization;
- Control of production parameters;
- Analysis of heat exchanger cleaning.

HEXTRAN can be used in the following industries

- Oil production;
- Gas processing industry;
- Oil refining industry;
- Petrochemical industry;
- Chemical industry;
- Design and construction.

Users of HEXTRAN find that the program improves efficiency in all types of design and analysis work: individual heat exchanger and network design, pinch

analysis, heat exchanger zonal analysis, dual flow system, site payback period, and cleaning cycle optimization [147].

## 1.7.2 Software complexes developed in Russia

### 1.7.2.1 Simulators for oil and gas processing industries «RTSim»

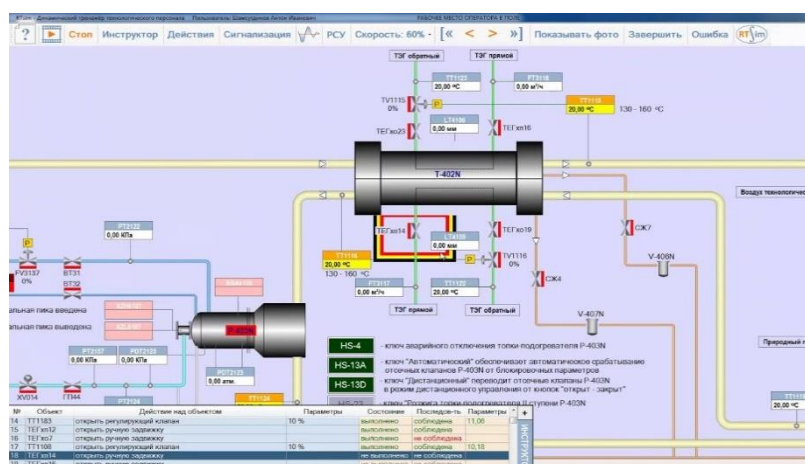


Fig. A.4 Window of the modeling program RTSim

RTsim simulators, using adequate mathematical models of technological processes and the principles of game mechanics via the Internet, will train thousands of employees, reducing capital costs and reducing the launch time of oil and gas processing production.

With 23 years of experience in mathematical modeling and development of computer simulators, RTSIM offers the use of a specialized Russian computer simulator under the RTsim trademark at gas processing and petrochemical facilities. Research is carried out with grant support from the Skolkovo Foundation.

In 1997, while working on a Ph.D., a group of young scientists headed by a doctor of sciences developed a computer mathematical model of a complex chemical

process. In the same year, the first operator-technologist simulator for a petrochemical enterprise was completed.

For 23 years, simulators have been installed at dozens of enterprises of the country OAO Nizhnekamskneftekhim, OAO Kazanorgsintez, OAO Tatneft, OAO Novatek, OAO Kuibyshev Refinery, OAO Petrokam, ZAO Severtex, OAO Orgenergoneft and etc.

In 2009 understanding came about the need to create a new platform that combines the adequacy of modeling with the convenience and simplicity of developing a simulator.

In 2014 the company introduced to the market a new platform for the designer of the operator-technologist simulator RTsim.

To order a simulator you must fill out a special questionnaire, in which you must specify the main equipment, auxiliary equipment. It is also possible to specify which process control systems are already present on the plants.

Production of the company:

- Operator simulators for training the personnel of complex oil refining / chemical industries in trouble-free operation - implemented since 1996.
- Continuous optimization through detailed comparison of the parameters of the simulated process with real data of the operating production, search for bottlenecks, energy saving - in development
- The use of dynamic modeling will allow for a more complete risk analysis (HAZOP) and optimization of the production under construction, allowing you to increase safety and at the same time remove the redundancy of engineering solutions - in development



- The use of dynamic modeling in the educational process will allow, using interactivity and visibility, to improve the quality of students' education - implemented since 2008 [148].

In the article [149] it is proposed to evaluate the work of the RTSim package, designed for modeling dynamic chemical-technological systems. To analyze its capabilities a model of the K-1 column was built, which serves as a deethanizer in the HFC scheme. Comparing the flow parameters at the inlet and outlet of the column for the models in Chemcad and RTSim, conclusions were drawn about the design capabilities of RTSim in relation to separators.

The results of RTSim calculations for the deethanizer column are quite accurate, since the calculation error is 0.05%.

### 1.7.2.2 Modelling system “AeroSym”

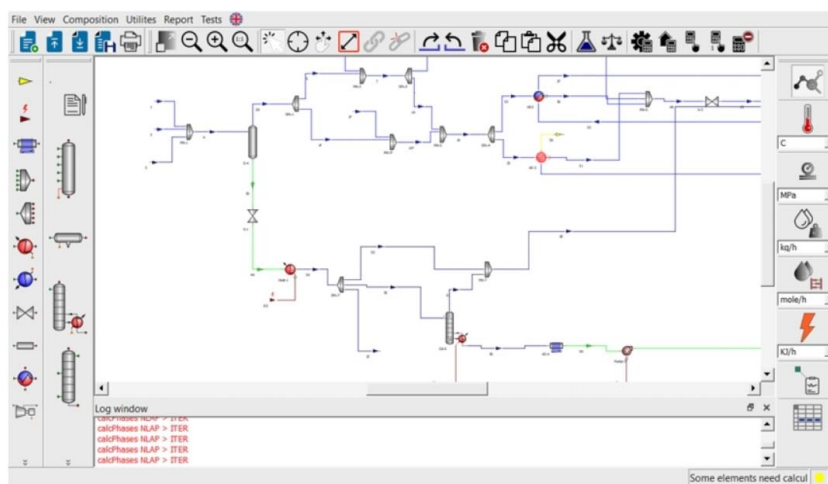


Fig. A.5 The working window of the program Aerosym

Aerosym is a Russian software package for modeling gas and condensate treatment and processing processes. This program has all the necessary equipment for CGTU modeling: separators, mixers, dividers, pumps, air coolers, heat

exchangers, coolers, heaters, stabilization and fractionation columns, ejectors, in-line separators, compressors, expanders, throttles.

The software package is designed to simulate thermodynamic processes in equipment that is part of complex gas treatment units, as well as in smart blocks of the inlet manifold, which are ejector-separation process equipment. The software package can be used for technological modeling of various combinations of technological schemes for gas treatment and processing, as well as for performing work related to finding the best places for introducing smart blocks of the inlet manifold in order to improve the energy efficiency of gas and condensate production from low-pressure wells.

The software package provides the following functions:

- calculation of thermodynamic characteristics of process flows based on the modified Peng-Robinson equation, namely, heat and material balances of flows and their compositions, including the water phase;
- calculation of technological devices: separators, mixers, dividers, pumps, air coolers, heat exchangers, coolers, heaters, stabilization and fractionation columns, ejectors, inline separators, compressors, expanders, chokes;
- simulation of smart blocks of the inlet manifold.

Advantages:

The main value of our services and business opportunities for our clients:

- Increasing the productivity of technological equipment;
- Timely and cost effective product development;
- Optimization of oil and gas production;
- Reducing the risk of inefficient process units.

AEROGAS LLC expands the boundaries of numerical simulation of the flow in the process of oil and gas processing by constantly improving our CFD programs. This makes it possible to simulate real processes of more complex two-phase flows in process and related equipment, such as turbo expanders, gas-liquid separators, two-phase pumps, etc. Therefore, we can help you solve production problems in the most cost-effective way.”

#### Experience:

AEROGAS LLC has experience in modeling two-phase flows in the process of natural gas processing, acquired over the years of development of in-line separation and ejection technologies. AEROGAS LLC applies its flow analysis capabilities to the following projects:

- Modeling and optimization of in-line separation;
- Modeling and optimization of ejector systems;
- Modeling and optimization of gas-liquid separators;
- Modeling and optimization of a multi-cyclone separator to determine separation efficiency;
- Simulation of Venturi tubes for mass flow limitation in order to determine the critical mass flow and pressure losses in normal operating mode and emergency mode;
- Simulation of a centrifugal compressor to determine the flow rate;
- Modeling and optimization of a new capacitor design;
- Modeling the distribution of particles in a gas pipeline
- Simulation of vortex induced oscillations on offshore structures and riser systems.

Through partnerships with leading software manufacturers, Aerogas LLC is able to offer integrated and cost-effective services for a wide range of industry flow problems [150].

### 1.7.2.3 Modelling system “GIBBS”

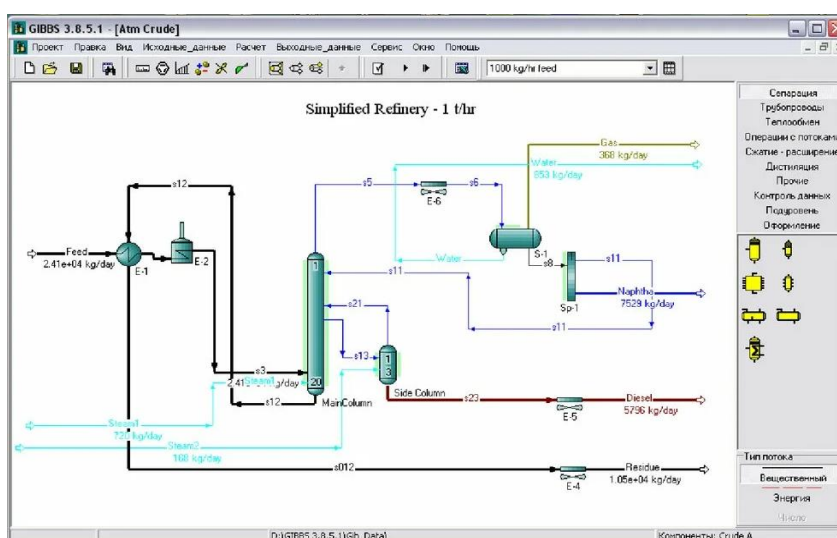


Fig. A.6 Window of the GIBBS modeling system

GIBBS is a computer program for complex modeling of technological processes of field preparation, processing and transportation of natural and associated gas, gas condensate and oil.

The most complete set of models makes it possible to describe the properties of raw materials and products, determine the costs of heat, energy, material and heat balance of production, mass and volume yields and composition of products, their compliance with current standards.

The theoretical methods used which are based on the principles of modern technical thermodynamics, and the use of the equation of state for calculating phase transformations and thermophysical properties of hydrocarbon mixtures are

universal and they allow to model the following technological processes in a wide range of conditions:

- Processes for field treatment of natural gas, including low-temperature separation and condensation units;
- gas treatment processes with introduction, collection and regeneration of hydrate inhibitors;
- processes of field and factory preparation and processing of gas condensate and oil, including deethanization, stabilization and fractionation;
- processes of amine gas purification from acidic components.

To obtain the main thermophysical characteristics of hydrocarbon mixtures in GIBBS, cubic equations of state are used:

- Peng-Robinson;
- Redlich-Kwong modified by Soave and Grabosky-Daubert;
- Peng-Robinson modified by Strizhek-Vera;
- Redlich-Kwong modified by S.D. Badger (requires a special extension).

Models of oil and gas condensate systems by composition can be created both on the basis of more than 400 individual components available, and on the basis of laboratory data on the fractional composition and physical properties of oil and gas condensate.

The program uses some methods for calculating thermophysical properties that increase the accuracy of modeling oil and gas condensate systems.

- One of the biggest problems in the practical use of cubic equations is the lack of accuracy in calculating the density of the liquid phase, which leads to a discrepancy between mass and volume flow characteristics, which directly affect production accounting. In GIBBS, this problem is solved by using a special

COSTALD equation for calculating the densities of saturated and compressed liquids, developed by Hankinson and Thomson, on the one hand, and a special method for calculating of hydrocarbon fractions, developed by A.I. Brusilovsky, which makes it possible to improve the accuracy of calculating the density of the liquid hydrocarbon phase;

- For water-oil emulsions (if the liquid phase is a stream of immiscible water and hydrocarbon phases), the viscosity and density of the mixture are calculated according to special mixing rules.

- Calculations of non-ideal systems using correlations of Wilson and Renon activity coefficients (NRTL).

- Calculations of processes for cleaning process gases from acidic components with aqueous solutions of ethanolamines (special extension is required);

- Calculation of material and heat balances for sulfur production by the Claus process (requires a special extension) [151].

In the article [152] some examples are considered that illustrate the possibilities of using the GIBBS software, as well as a comparison of the results obtained with the data on modeling on the HYSYS software and experimental or actual values obtained during the operation of a production facility.

Based on the results of the comparison, it was concluded that when modeling the process of low-temperature separation, the calculated data on the flow rate of unstable condensate differ by no more than 0,26 %, for gas - by 0,33 %, for water-methanol solution (WMS) - by 8,5 %.

#### **1.7.2.4 Modelling system “ChemFort”**

The Comfort modeling system is a tool for verification and design calculations of material and heat balances of various chemical industries. "Comfort" consists of a control program and modules for calculating devices. The control

program with a specific set of technological modules forms a subject-oriented modeling program that allows you to perform calculations for a specific class of chemical-technological schemes. The program has the means to calculate all the main fractionation processes for gas processing [153].

### 1.7.3 Comparison of foreign and domestic modeling systems

In order to understand what are the pros and cons of the presented programs, it is necessary to understand what each program lacks. Table X.1 shows the manufacturer and main licenses of some of the programs for modeling oil and gas treatment processes.

*Table A.1*

Main manufacturers and licenses of some modeling systems

Name	Aspen HYSYS	Aspen Plus	Pro II	GIBBS	ChemFort
<b>Manufacturer</b>					
<b>Country</b>	Canada	USA	Great Britain	Russia	Russia
<b>Main developer</b>	Hypritech LTD	Aspen Tech	Invensys	TopEnergobusiness	Chemfort
<b>Year of production</b>	1996	1991	1992	1992 (DOS version), 2003	2011
<b>License</b>					
<b>Local license</b>	+	+	+	+	+
<b>Web license</b>	+	+	-	+	-
<b>Free license</b>	-	-	-	Functionality is limited	45 days

\* The software packages in the table have various forms of licensing: local, network, and free. A local license provides for the installation of the program on a specific computer, is authorized and works only on it. A network license is designed to install the product on multiple computers, but the number of concurrent users must not exceed the number of purchased licenses. The free license is distributed for "familiarization" with software features that have time or functional limitations.

Each of the presented software products assumes minimum system requirements for its full-fledged operation - the presence of Microsoft OS and a license.

*Table A.2*

Operating system requirements

<b>Name</b>	<b>Aspen HYSYS</b>	<b>Aspen Plus</b>	<b>Pro II</b>	<b>GIBBS</b>	<b>ChemFort</b>
<b>Operating system</b>	Windows	Windows	Windows	Windows	Windows
<b>RAM</b>	2 Gb	2 Gb	64 Mb	1 Gb	256 Mb
<b>Hard Disk capacity</b>	40 Gb	40 Gb	250 Mb	1 Gb	2 Gb
<b>Availability of additional software</b>	Microsoft Office	Microsoft Office	-	Microsoft Office	Delphi 7

On the Russian and foreign markets there are many CTP simulation tools with different functionality and purpose. To assess the potential of a software product, several key characteristics were identified. The limitations of the software capabilities immediately became obvious: a small functionality of interactive debuggers, a small number of typical models, the absence of structural modeling, a large error in calculations, and others.

These restrictions require the software user to have special knowledge in the field of mathematical description of processes and in programming.

The impossibility of real-time modeling and the impossibility of software optimization taking into account various factors is a serious constraint for its application in automatic control systems for complex and fast processes.

Unpromising are those software products that do not provide accurate and up-to-date information, which is especially important in the face of fierce competition in terms of price / quality / quantity, energy costs and the efficiency of production equipment.



Table A.3

Comparison of the functionality of modeling systems of foreign and domestic production

<b>Software characteristic</b>	<b>Aspen HYSYS</b>	<b>Aspen Plus</b>	<b>Pro II</b>	<b>GIBBS</b>	<b>ChemFort</b>
<b>Library and Templates</b>	+	+	+	+	+
<b>Creating Libraries and Templates</b>	+	+	+	+	-
<b>Programming language</b>	Visual Basic, C++	Visual Basic, C++	Visual Basic	Delphi, Visual Basic	Delphi, Fortran
<b>Stationary systems</b>	+	+	+	+	+
<b>Dynamic systems</b>	+	+	+	-	-
<b>Discrete event simulation</b>	+	+	-	-	-
<b>Structural modeling</b>	-	-	-	-	-
<b>Combined approach</b>	+	+	+	-	-
<b>Simulation in real time</b>	+	+	-	-	-
<b>Optimization module</b>	+	+	-	+	-
<b>Streams of random numbers</b>	+	+	-	-	-
<b>Independent runs of the simulated system</b>	+	+	-	-	-
<b>Scenario development</b>	+	+	+	-	-
<b>Design of Experiments</b>	+	+	-	-	-
<b>Interactive debugger</b>	+	+	+	-	-

The software products include ready-made modules that describe technological apparatuses, physical and chemical properties of components, which make it possible to simplify the construction of technical solutions for the technological process for their calculations.

If the number of modules is limited, the software will not allow you to simulate complex technical solutions, since this requires constant improvement of programs.

*Table A.4*

Availability of separate modules for the calculation of various technological processes

<b>Module name</b>	<b>Aspen HYSYS</b>	<b>Aspen Plus</b>	<b>Pro II</b>	<b>GIBBS</b>	<b>ChemFort</b>
<b>Components</b>	+	+	+	+	+
<b>Distillation columns</b>	+	+	+	+	+
<b>Pipelines</b>	+	+	+	+	-
<b>Reactors</b>	+	+	+	+	+
<b>Adsorbers</b>	+	+	-	-	-
<b>Heat exchangers</b>	+	+	+	+	-
<b>Pumps and compressors</b>	+	+	-	+	-

A key feature of any software is a user-friendly graphical interface that reduces labor costs for performing certain functions and provides the result in an intuitive way for the user. The presence in the program of such features as graphical construction, interactive debugger, documentation, allows you to reduce the time for developing circuits.

*Table A.5*

Interface of software systems

<b>Module name</b>	<b>Aspen HYSYS</b>	<b>Aspen Plus</b>	<b>Pro II</b>	<b>GIBBS</b>	<b>ChemFort</b>
<b>Interface language</b>	Multi-language	English	English	Multi-language	Russian
<b>Customizing menus and toolbars</b>	+	+	+	+	-
<b>Graphic construction</b>	+	+	+	+	+
<b>Animation</b>	+	+	-	-	-

<b>Module name</b>	<b>Aspen HYSYS</b>	<b>Aspen Plus</b>	<b>Pro II</b>	<b>GIBBS</b>	<b>ChemFort</b>
<b>Documentation</b>	+	+	+	+	+
<b>Import drawings</b>	+	+	-	-	-

Each modeling system has its pros and cons. The analysis given in the tables above revealed the parameters that need to be improved in domestic software in order to compete with the main manufacturers of modeling systems in oil and gas treatment and processing.

The analysis also makes it possible to identify the main parameters that must be taken into account when designing and developing new systems for modeling various processes.

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б



Рисунок А.1 – Кювета, наполненная нефтяной фракцией. Подача капель воды осуществляется с помощью шприцевого насоса и специального сопла определенного размера



Рисунок А.2 – Шприцевой насос для регулирования равномерной подачи воды в кювету



Рисунок А.3 – Камера «Miro C110» для фиксации осаждения капель воды в нефтяной среде

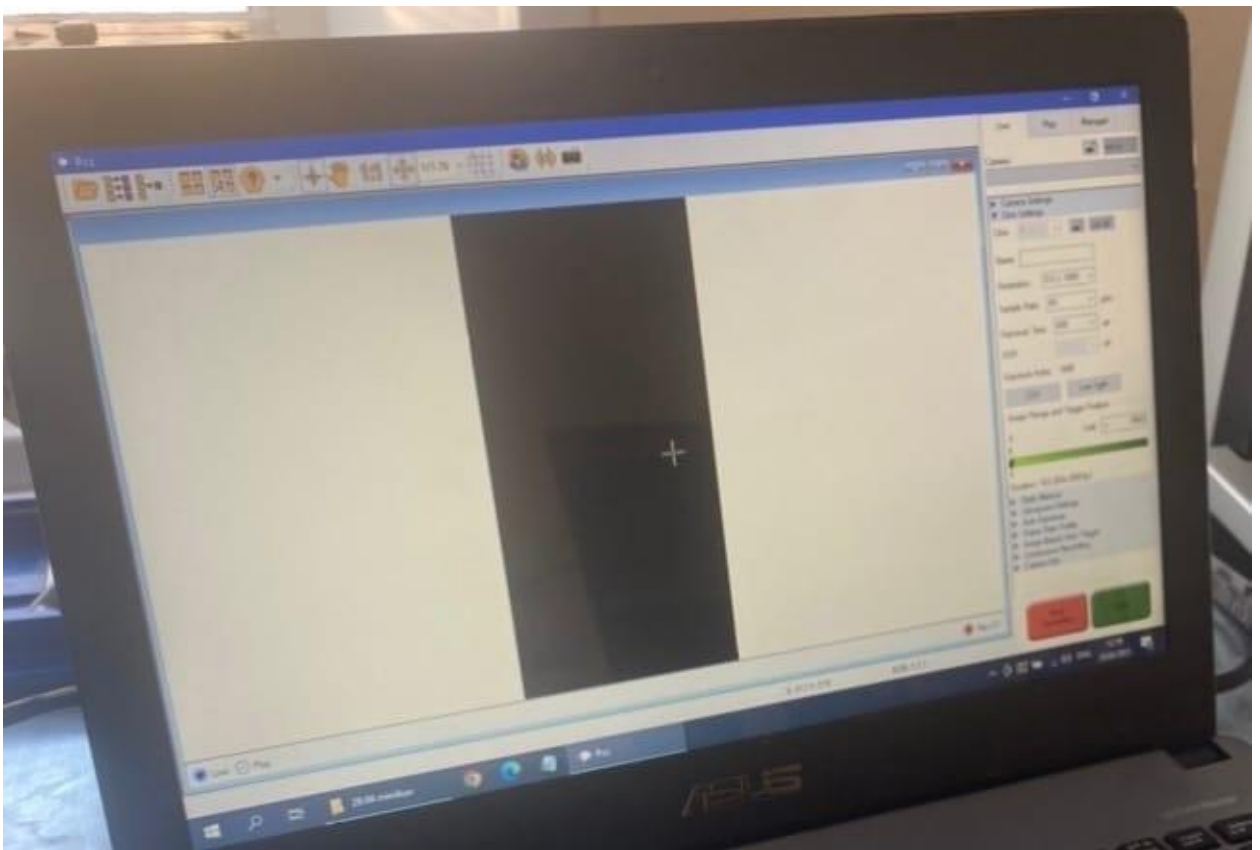


Рисунок А.4 – Ноутбук с программой для обработки видеозображения с камеры в режиме реального времени

## ПРИЛОЖЕНИЕ В

Таблица Б.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							
1. Адекватность разработки	0,20	4	4	5	0,80	0,80	1
2. Унифицированность	0,11	4	3	4	0,44	0,33	0,44
3. Простота применения	0,20	5	4	5	1	0,80	1
4. Универсальность	0,14	3	3	3	0,42	0,42	0,42
Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
1. Финансирование научной разработки	0,13	1	2	4	0,13	0,26	0,52
2. Наличие сертификации разработки	0,22	1	1	1	0,22	0,22	0,22
<b>Итого</b>	<b>1</b>				<b>3,01</b>	<b>2,83</b>	<b>3,60</b>

## ПРИЛОЖЕНИЕ Г

Таблица Б.1 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	4	5
Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	4	4
Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	3	4
Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	3	4
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	3
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	4	4
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	3
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	3
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	4
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	3	3
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	2	2
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	2	2
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	3	3
Проработан механизм реализации научного проекта	3	3
<b>Итого баллов</b>	<b>44</b>	<b>48</b>