**Уравнение состояния PC-SAFT: перспективы применения в нефтегазовой отрасли**

**Ибрагимов Б.А.1, Бевзо М.О.2**

1Студент, 2Аспирант

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия

E-mail: 1bulat.ibragimov.2021@inbox.ru, 2bevzomo@gmail.com

В нефтегазовой отрасли актуальными являются точные методы моделирования таких сложных систем, как многокомпонентные смеси углеводородов, содержащие, например, полярные и ассоциирующие компоненты. Уравнение состояния PC-SAFT (Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory) представляется перспективным решением проблем, возникающих при работе с такими системами, и обеспечивает высокую точность и универсальность в моделировании сложных смесей, таких как нефть, газ, вода и полимерные соединения. Это уравнение опирается на принципы статистической механики, а также учитывает влияние взаимодействий в системе твердых цепей, дисперсионных, ассоциативных взаимодействий.

Уравнение состояния PC-SAFT не только успешно предсказывает свойства нефти и природного газа и позволяет рассчитывать фазовые равновесия в растворах, но и имеет большие перспективы дальнейшего развития. К примеру, при моделировании нетрадиционных ресурсов, таких как сланцевая нефть или газ, тяжелые нефти и битумы, для которых известные уравнения состояния вносят большую погрешность, препятствующую точному прогнозу поведения вещества.

В рамках настоящего доклада уравнение состояния PC-SAFT сопоставляется с наиболее используемыми в нефтегазовой отрасли кубическими уравнениями состояния. Обсуждаются различия в принципах построения этих уравнений состояния, а также разница в параметризации чистых веществ.

Приводятся результаты численного моделирования физических свойств и парожидкостных равновесий ряда углеводородов, выполненные с использованием уравнения состояния PC-SAFT. Аналогичные расчеты проведены с применением самого популярного в нефтегазовой отрасли кубического уравнения состояния – уравнения Пенга–Робинсона. Сопоставление результатов расчетов, выполненных с помощью этих уравнений состояния, помогает выявить особенности описания углеводородных систем с использованием уравнения состояния PC-SAFT.

**Литература**

1. Gross J., Sadowski G. Perturbed-chain SAFT: An equation of state based on a perturbation theory for chain molecules // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2001. Т.40, №4. С.1244–1260.
2. Брусиловский А. И. Фазовые превращения при разработке месторождений нефти и газа. - М.: Грааль, 2002. 575 с.
3. Исаева А.В., Бевзо М.О. Расчет фазовых равновесий чистых легких углеводородов с помощью уравнения состояния PC-SAFT и алгоритма прямой минимизации энергии // ВМУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2023. Т.78, №6. С.2360903–1— 2360903–10.