

doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-5-825-832

УДК 543.421/.424; 66.914

Контроль состава и определение дозировки ингибиторов гидратообразования по их инфракрасным спектрам

Юлия Сергеевна Кожевина¹✉, Татьяна Николаевна Носенко²

^{1,2} Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ leta-x@mail.ru✉, <https://orcid.org/0009-0006-1359-1235>

² tata-nostra@yandex.ru, tnnosenko@itmo.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4159-133X>

Аннотация

Введение. Исследована возможность повышения точности и оперативности применения инфракрасных спектров термодинамических ингибиторов для контроля их состава и расчета дозировки, необходимой для предотвращения гидратообразования в нефтяной и газовой промышленности. Предложенный метод заключается в определении количества ингибитора для исследуемой системы «газ-вода» и величины снижения температуры начала гидратообразования. Актуальность работы и ее новизна в сравнении с традиционным экспериментальным подходом состоит в появлении возможности качественной и количественной идентификаций до девяти компонентов в составе термодинамического ингибитора, сокращении временных затрат на процессы расчетов. **Метод.** Для решения задачи определения концентрации веществ используется метод инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье. Инфракрасные спектры растворов измерялись в режиме нарушенного полного внутреннего отражения. Для повышения точности измерений концентрации веществ по инфракрасному спектру в условиях многокомпонентности и схожести компонентов по химическому строению предложено применение регрессионной нейронной сети. В обучающую выборку были включены инфракрасные спектры чистых веществ — каждого отдельного компонента, двух- и трехкомпонентные смесевые водные растворы (вода + спирт + гликоль), а также ряд четырехкомпонентных растворов (гликоли + вода). Полученные данные о составе ингибитора использовались при расчете его дозировки для предотвращения гидратообразования в заданных условиях. **Основные результаты.** Продемонстрирована возможность обученной нейронной сети определять концентрации до девяти схожих по своим свойствам веществ в составе термодинамических ингибиторов гидратообразования: метанол, этанол, пропанол, моноэтиленгликоль, диэтиленгликоль, триэтиленгликоль, пропиленгликоль, глицерин. Показано, что применение нейронной сети обеспечивает точность определения концентраций до 2 % об. Апробация предложенного метода обработки результатов контроля состава и определения дозировки термодинамического ингибитора для подавления процесса образования гидратов показала хорошее соответствие результатам традиционно применяемого метода. **Обсуждение.** Предложенный подход позволяет повысить оперативность подбора дозировки ингибиторов. Результаты работы могут найти применение в нефтепромышленной химии для входного контроля и прогнозирования эффективности применения ингибиторов гидратообразования термодинамического типа действия при добыче, подготовке или транспортировке углеводородного сырья.

Ключевые слова

ингибиторы гидратообразования, газогидраты, инфракрасная спектроскопия, хемометрические методы анализа, нейронные сети

Благодарности

Работа была выполнена при поддержке Центра химической инженерии Университета ИТМО.

Ссылка для цитирования: Кожевина Ю.С., Носенко Т.Н. Контроль состава и определение дозировки ингибиторов гидратообразования по их инфракрасным спектрам // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2025. Т. 25, № 5. С. 825–832. doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-5-825-832

Control of composition and determination of dosage of hydrate formation inhibitors by their infrared spectra

Iuliia S. Kozhevina¹✉, Tatiana N. Nosenko²

^{1,2} ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ leta-x@mail.ru✉, <https://orcid.org/0009-0006-1359-1235>

² tata-nosstra@yandex.ru, [tnnosenko@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-4159-133X](https://orcid.org/0000-0003-4159-133X)

Abstract

The possibility of increasing the accuracy and efficiency of using infrared spectra of thermodynamic inhibitors to control their composition and calculate the dosage required for preventing hydrate formation in the oil and gas industry has been studied. The proposed method consists of determining the amount of inhibitor for the studied “gas-water” system and the magnitude of the decrease in the temperature of the onset of hydrate formation. The relevance of the work and its novelty in comparison with the traditional experimental approach consists in the emergence of the possibility of qualitative and quantitative identification of up to nine components in the composition of the thermodynamic inhibitor, reducing the time costs for calculation processes. To solve the problem of determining the concentration of substances, the method of infrared spectrometry with Fourier transformation is used. The infrared spectra of the solutions were measured in the mode of attenuated total internal reflection. To improve the accuracy of measuring the concentration of substances by the infrared spectrum in conditions of multicomponentity and similarity of components by chemical structure, the use of a regression neural network is proposed. The training sample included infrared spectra of pure substances, two-component and three-component mixed aqueous solutions (water + alcohol + glycol), as well as a number of four-component solutions (glycols + water). The obtained data on the composition of the inhibitor were then used to calculate its dosage to prevent hydrate formation under specified conditions. The capability of the trained neural network to determine the concentrations of up to nine substances similar in their properties in the composition of thermodynamic hydrate formation inhibitors has been demonstrated: methanol, ethanol, propanol, monoethylene glycol, diethylene glycol, triethylene glycol, propylene glycol, glycerol. It has been shown that the use of the neural network ensures the accuracy of concentration determination up to 2 % vol. Testing of the proposed method for processing the results of composition control and determining the dosage of the thermodynamic inhibitor for suppressing the hydrate formation process has shown good agreement with the results of the traditionally used method. The proposed approach allows increasing the efficiency of inhibitor dosage selection. The results of the work can be used in oilfield chemistry for incoming control and forecasting the efficiency of using thermodynamic type hydrate inhibitors during the extraction, preparation or transportation of hydrocarbon raw materials.

Keywords

hydrate formation inhibitors, gas hydrates, Fourier-transform infrared spectroscopy, projection on latent structures, chemometric methods of analysis, neural networks

Acknowledgements

The study was facilitated through the provision of materials and resources by the Center for Chemical Engineering of the ITMO University.

For citation: Kozhevina Iu.S., Nosenko T.N. Control of composition and determination of dosage of hydrate formation inhibitors by their infrared spectra. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2025, vol. 25, no. 5, pp. 825–832 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-5-825-832

Введение

Добыча нефти и газа в основном сопровождается образованием газовых гидратов, которые, несмотря на свою необходимость в вопросах хранения и транспортировки значительных объемов газа [1–6], являются причинами закупорки технологического оборудования [7]. Для предупреждения и борьбы с гидратными отложениями, кроме различных технических и технологических решений, выделяют ингибиторы гидратообразования — химические составы (реагенты), обладающие способностью растворять уже образовавшиеся агломерации кристаллов гидратов или подавлять их рост и скопление [8]. Ингибиторы различают по механизму воздействия на процесс образования гидратов. Разные типы ингибиторов отличаются по составу действующих веществ [9, 10].

В настоящей работе исследуются ингибиторы гидратообразования термодинамического типа действия, которые за счет изменения термодинамических свойств системы сокращают области температур и давлений, при которых в системе может начаться гидратообра-

зование. Способность ингибитора предотвращать гидратообразование оценивается по величине снижения температуры его начала и количеству (дозировке) ингибитора, которое это снижение обеспечивает. При этом поддерживается условие неизменности состава газа и термобарического режима в исследуемой системе без ингибитора и с ингибитором [11]. Одним из наиболее достоверных способов подбора эффективной дозировки ингибитора является экспериментальный [12, 13]. Однако для его реализации требуются значительные временные (время проведения эксперимента может занимать 12–24 ч) и материальные (специализированное оборудование) затраты. Таким образом, актуально привлечение экспрессных способов определения дозировки ингибитора для обеспечения безгидратного режима работы исследуемой системы.

Как показывают последние исследования, снижение температуры начала гидратообразования и дозировка ингибитора при фиксированном давлении зависят главным образом от качественного и количественного составов ингибитора [14, 15]. Паспортные данные коммерческих ингибиторов не могут дать точные представ-

ления о его составе, концентрации компонентов ингибитора представлены в широком диапазоне, что не дает возможности оценить его необходимое количество.

Для контроля состава нефтепромысловых химических реагентов, в том числе ингибиторов гидратообразования, применяются методы рамановской спектроскопии [16], инфракрасной (ИК) спектроскопии [17], масс-спектроскопии [18] и тонкослойной хроматографии [19]. В известных работах представлены в основном ингибиторы коррозии, деэмульгаторы. Чаще решается задача установления качества реагента (подлинность, постоянство состава), но не определения качественного и количественного составов. Последнее актуально для ингибиторов гидратообразования, когда необходимо установление его дозировки. Детализация компонентного состава нефтепромысловых реагентов определяется как практическая значимая техническая задача [20].

В настоящей работе представлен новый алгоритм оперативного определения эффективной дозировки термодинамических ингибиторов гидратообразования.

Материалы и методы

Исследуемые материалы (пробоподготовка).

Среди веществ, обладающих термодинамически ингибирующим действием на газовые гидраты, чаще всего применяются одно-, двух- и трехатомные спирты, которые составляют активную основу компонентов ингибиторов. Для проведения исследования приготовлены модельные растворы, в состав которых вошли 9 типичных для них веществ: вода (в качестве растворителя) и действующие вещества: метанол (химически чистый (хч), АО «Вектон»), этанол (хч, АО «Вектон»), пропанол (хч, ООО «КОМПОНЕНТ-РЕАКТИВ»), моноэтиленгликоль (хч, АО «ЭКОС-1»), диэтиленгликоль (чистый для анализа (чда), АО «РоссПолимер»), триэтиленгликоль (хч, АО «РоссПолимер»), пропиленгликоль (хч, АО «ЭКОС-1»), глицерин (чда, АО «ЭКОС-1»). В смесевых модельных растворах содержание компонентов было равномерно распределено в области от 0 до 100 % по объему (% об.). Двухкомпонентные растворы — водные растворы каждого из 8 перечисленных спиртов с шагом концентрации в 20 % по объему. Трехкомпонентные растворы: растворитель — вода, первый действующий компонент — одноатомный спирт (метанол/этанол/пропанол), второй — многоатомный спирт (моноэтиленгликоль/диэтиленгликоль/триэтиленгликоль/пропиленгликоль/глицерин).

Подобная схема приготовления применялась для 15 возможных из указанных веществ пар: одноатомный спирт — многоатомный спирт (например, вода-метанол-этиленгликоль, вода-метанол-глицерин, вода-этанол-этиленгликоль и т. д.). Четырехкомпонентные растворы: вода и смесь многоатомных спиртов.

Оборудование. Регистрация спектров чистых веществ — каждого отдельного компонента и приготовленных смесевых модельных растворов проводилась на ИК-Фурье-спектрометре BRUKER Tenzor 37, оснащенном приставкой нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) с кристаллом KBr с алмазным на-

пылением. Инструментальные параметры регистрации спектров: диапазон волновых чисел от 600 до 4000 см^{-1} с разрешением 2 см^{-1} , усреднение по 16 измерениям.

В процессе регистрации спектра обеспечивалось его непрерывное добавление на поверхность кристалла приставки НПВО для поддержания постоянства концентрации летучих соединений в составе образца.

Обработка результатов измерений. Полученные ИК спектры проходили предобработку (корректировка базовой линии) с использованием программного обеспечения OPUS 7.5. Методика выбора метода предобработки ИК спектров для создания обучающей выборки описана в работе [21].

Несмотря на то, что количественное и качественное определения состава вещества по его ИК спектру типично для современной химии, с ростом компонентности исследуемых образцов (более трех составляющих) задача определения количественного состава смесей усложняется и сопровождается потерей точности измерений. Это характерно для растворов и смесей, содержащих вещества, сходные по химическому строению, например, растворов органических соединений. Проблема наличия перекрывающихся областей колебаний характеристических групп в случае определения количественного состава частично решается хемометрическими методами. В настоящей работе предложено применить искусственную нейронную сеть (ИНС). Такой подход, наряду с другими методами многомерного моделирования, все чаще используется для качественного и количественного регрессионного спектрального анализа [22].

В работе выбрана регрессионная нейронная сеть, реализованная в виде многослойного перцептрона. Его обучение осуществляется с использованием метода обратного распространения ошибки.

Определение минимально необходимой дозировки, обеспечивающей снижение температуры гидратообразования для достижения безгидратного режима работы в заданных условиях, на основании величин концентраций активных компонентов ингибитора выполнялось с использованием зависимости Н.А. Шостака [23].

Программный код предлагаемого алгоритма реализован на языке Python¹.

Результаты и обсуждение

Описание блок-схемы (модулей) обработки результатов измерений. На вход предлагаемой схемы (рис. 1) поступают предобработанные ИК спектры ингибитора: полного состава («первого» спектра X_1) и после испарения летучей части («последнего» спектра X_n). Каждый спектр представляет собой вектор из 3525 значений амплитуд при различных значениях волновых чисел.

В первом модуле по последнему спектру (X_n) ингибитора определяется его тип действия **type** [10].

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://fips.ru/EGD/46e9ef46-f15b-4d0c-b81d-6bbdc16cb314> (дата обращения: 04.09.2025).

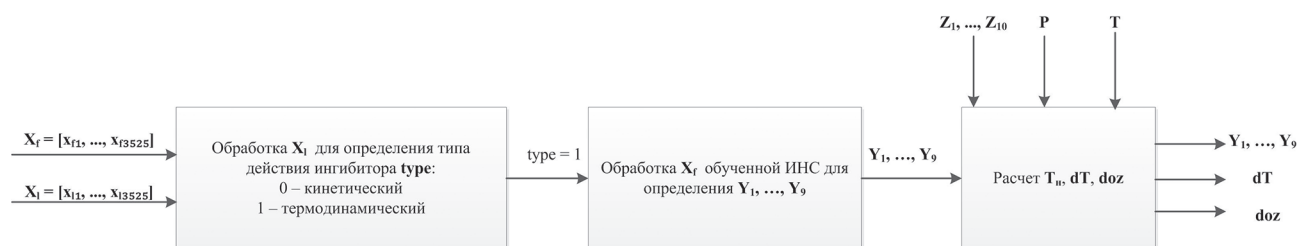


Рис. 1. Блок-схема обработки результатов измерений состава и расчета дозировки ингибиторов гидратообразования по их инфракрасным спектрам

Fig. 1. Block diagram for processing the results of composition measurements and calculating the dosage of hydrate formation inhibitors based on their infrared spectra

Во втором модуле производится определение количественного и качественного составов ($Y_1, \dots, Y_9$) термодинамического ингибитора по его «первому» спектру (X_f), заключающееся в использовании обученной на модельных образцах регрессионной нейронной сети.

В третьем модуле производится расчет минимально необходимой дозировки термодинамического ингибитора **doz**, обеспечивающей снижения температуры гидратообразования **dT** для достижения безгидратного режима работы в заданных условиях. Расчет выполнен на основании значения температуры начала гидратообразования в системе без ингибитора T_n (вычисляется по зависимостям [23]), а также определенных в предыдущем модуле значений концентраций компонентов и введенных пользователем состава газа $Z_1, \dots, Z_{10}$ (мол.%) и рабочих давлении P и температуре T .

Результатом обработки исходных параметров являются значения объемной концентрации девяти компонентов $Y_1, \dots, Y_9$ (вода (растворитель), метанол, этанол,

пропанол, моноэтиленгликоль, диэтиленгликоль, триэтиленгликоль, пропиленгликоль, глицерин), объемной дозировки ингибитора **doz** и расчетного значения снижения температуры гидратообразования **dT**, которое обеспечивает расчетная дозировка.

Обучение искусственной нейронной сети

На основании известных спектров (160 спектров) модельных смесей составлена обучающая выборка для регрессионной нейронной сети. В обучающую выборку включены ИК спектры чистых веществ — каждого отдельного компонента, двух- и трехкомпонентные (вода + спирт + гликоль) смесевые водные растворы, а также ряд четырехкомпонентных (гликоли + вода) для учета взаимного влияния гликолей в присутствии воды. Пример спектральных данных модельных растворов, использующихся в обучающей выборке, приведен на рис. 2.

Видно, что в спектрах приготовленных модельных растворов с увеличением концентрации спирта наблю-

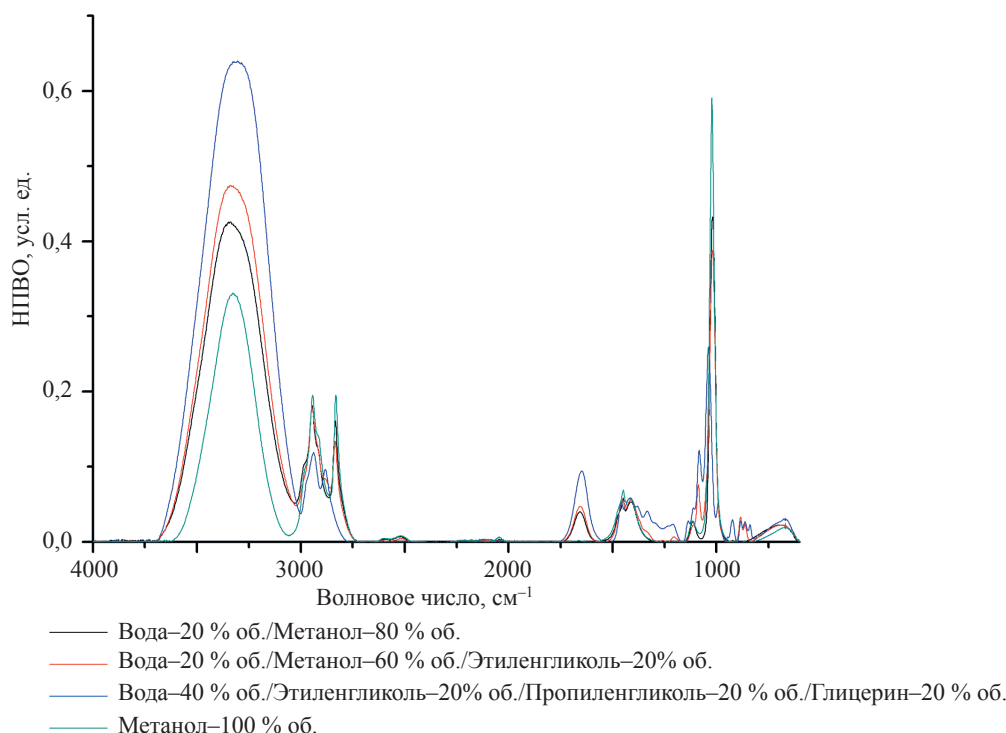


Рис. 2. Инфракрасные спектры модельных растворов в составе обучающей выборки

Fig. 2. Infrared spectra of model solutions in the training set

дается уменьшение интенсивности: высокочастотной полосы 3300 см^{-1} валентных колебаний гидроксильных ОН-групп; деформационных колебаний связанных ОН-групп молекул воды в области $1650\text{--}1637\text{ см}^{-1}$.

При этом, увеличивается интенсивность: для группы пиков в интервале $3000\text{--}2800\text{ см}^{-1}$, которая соответствует валентным колебаниям связей С–Н; колебаний группы $-\text{CH}_2$ в области спектра около 2920 см^{-1} (кроме водно-метанольного раствора); в области деформационных колебаний связей С–Н ($1450\text{--}1400\text{ см}^{-1}$); пиков при волновом числе $1110\text{--}1080\text{ см}^{-1}$ деформационных колебаний гидроксильной группы спиртов; при волновом числе $1040\text{--}1020\text{ см}^{-1}$, соответствующей полосе поглощения валентных колебаний связи С–О; деформационных колебаний связи С–О (880 см^{-1} , 860 см^{-1}) (кроме водно-метанольного раствора).

Спектральные данные модельных растворов представляют собой вектора (массивы) из 3525 значений амплитуд при разных значениях волновых чисел. Эти данные использованы для обучения регрессионной нейронной сети, способной определять концентрации компонентов в составе исследуемых растворов на основании ИК спектра. ИНС автоматически выявляет в этом спектре сложные, неочевидные закономерности, например, наличие определенных функциональных групп или связей, преобразует их через последовательность математических операций и выдает на выходе результат — концентрацию. Набор нейронов на входе — спектральные данные (полученные в средней ИК области в режиме НПВО); модельного раствора — набор интенсивностей (НПВО уд. ед.), каждая из которых соответствует волновому числу из диапазона измерения (3525 значений); на выходе — концентрация вещества — 9 значений, что соответствует числу определяемых компонентов. По результатам настройки гиперпараметров многослойного перцептрона определяются оптимальные, с точки зрения прогностической способности, алгоритмы оптимизации и функции активации по каждому определяемому компоненту в составе смеси. На основании [22] определено, что для достижения точности в многослойном перцептроне необходимо использовать два скрытых слоя, содержащих 128 и 64 нейрона. Определено оптимальное количество

максимальных итераций. Для моделей по определению содержания воды, диэтиленгликоля и триэтиленгликоля оказалось достаточным 200 максимальных итераций, для остальных — 500 . Значения остальных параметров использовались по умолчанию, которые при изменении не оказали существенного воздействия на улучшение прогностической способности нейронной сети. Вследствие различия оптимальных параметров для нейронной сети в зависимости от определяемого вещества, было обучено 9 моделей для определения каждого вещества в отдельности. Параметры качества отражены в табл. 1. Оценка прогностической способности нейронной сети проведена на тестовой выборке, состоящей из 30 проверочных образцов. Для каждого вещества по результатам определения его концентрации в каждом из проверочных образцов определено значение средней абсолютной погрешности (Mean Absolute Error, MAE) (табл. 1). Из данных табл. 1 следует, что максимальное значение MAE определения концентрации вещества с учетом округления до целых не превышает значения 2% об.

Экспериментальные данные. Апробация предлагаемого алгоритма выполнена на примере коммерческого ингибитора, состоящего из 95% об. метанола и 5% об. воды.

ИК спектры — «первый» (полного состава) и «последний» (после испарения летучей части) исследуемого коммерческого ингибитора представлены на рис. 3.

По «последнему» спектру коммерческого ингибитора определен тип действия — термодинамический.

Результат работы нейронной сети по определению качественного и количественного составов исследуемого коммерческого ингибитора по его «первому» спектру отображен в табл. 2.

Расчет дозировки исследуемого коммерческого ингибитора для предотвращения гидратообразования проводился для составов газов: метан — $82,48\%$ мол. %, этан — $4,23\%$ мол. %, азот — $2,78\%$ мол. %, углекислый газ — $1,95\%$ мол. %, пропан — $1,44\%$ мол. %, бутан — $1,22\%$ мол. %; при рабочих давлении и температуре — 3 МПа и $262,5\text{ К}$. Для расчета дозировки ингибитора при заданных условиях предварительно вычислены температура начала гидратообразования при задан-

Таблица 1. Метрики качества обученной нейронной сети
Table 1. Quality metrics of constructed neural networks

Вещество	RMSE, % об.	R-Square	MAE, % об.
Метанол	0,801	0,978	0,404
Этанол	0,820	0,978	0,610
Пропанол	0,805	0,998	0,401
Вода	1,815	0,979	0,812
Моноэтиленгликоль	1,102	0,998	0,702
Пропиленгликоль	1,606	0,989	0,800
Глицерин	1,910	0,979	1,181
Диэтиленгликоль	0,500	0,979	0,405
Триэтиленгликоль	1,408	0,989	0,400

Примечание. RMSE — среднеквадратичное отклонение прогноза; R-Square — доля дисперсии зависимых переменных.

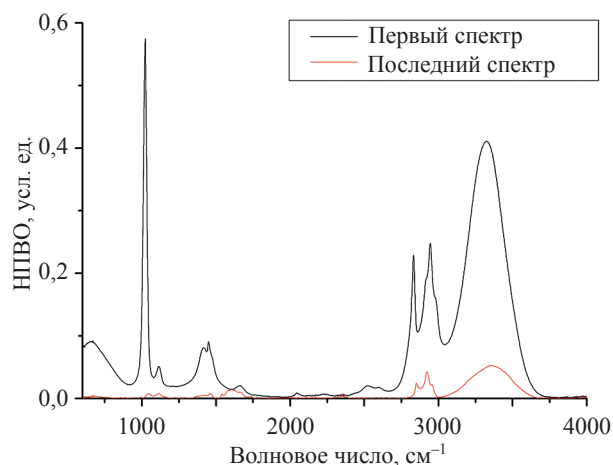


Рис. 3. Полученные инфракрасные спектры коммерческого ингибитора («первый» — спектр полного состава, «последний» — спектр после испарения летучей части)

Fig. 3. The obtained IR spectra of the commercial inhibitor (the first spectrum is the spectrum of the complete composition, the second spectrum is the spectrum after evaporation of the volatile part)

Таблица 2. Состав тестируемого ингибитора, определенный при реализации предлагаемого алгоритма

Table 2. The composition of the tested inhibitor, determined during the implementation of the proposed algorithm

Компонент	Прогнозируемое значение, % об.
Метанол	95,2
Этанол	0,3
Пропанол	0,0
Вода	4,0
Моноэтиленгликоль	0,8
Пропиленгликоль	0,0
Глицерин	0,3
Диэтиленгликоль	0,0
Триэтиленгликоль	0,0

ном давлении в системе без ингибитора, значение которой составило 279 К, и минимально необходимое для заданных условий снижение температуры начала гидратообразования — 16,5 К. Расчетное значение дозировки ингибитора, необходимое для достижения

определенного снижения температуры гидратообразования и обеспечивающей безгидратный режим работы при заданных условиях составило 19 % об.

Сравнение результатов работы предлагаемого алгоритма с результатами, которые получаются при реализации традиционного экспериментального подхода [24, 25] для пяти коммерческих ингибиторов, показало расхождение в определении дозировки, необходимой для предотвращения гидратообразования, не более 2 % об. При этом получено снижение температуры начала гидратообразования максимум на 0,5 К, что в производственных условиях технологически приемлемо. Длительность традиционного экспериментального подбора дозировки составляет в среднем 12–24 ч [24, 25], использование предложенного алгоритма сокращает эту процедуру до 5 мин, повышая оперативность процесса подбора дозировки и обеспечивая значительную экономию времени и ресурсов.

Заключение

В работе предложено использование инфракрасных спектров термодинамических ингибиторов гидратообразования для контроля их состава и расчета дозировки, необходимой для предотвращения гидратообразования. Представлен способ обработки спектров, позволяющий повысить оперативность (длительность сокращается до 5 мин) определения предотвращающей гидратообразование дозировки термодинамических ингибиторов в сравнении с традиционным экспериментальным подходом за счет использования инфракрасной спектроскопии. Предложена нейронная сеть, обученная на инфракрасных спектрах модельных составов термодинамических ингибиторов. Применение созданной нейронной сети обеспечивает качественную (до 9 компонентов) и количественную оценки состава термодинамических ингибиторов с точностью, согласно значению средней абсолютной погрешности, до 2 % об. по инфракрасным спектрам, что повышает информативность контроля состава ингибиторов. Результаты работы могут найти применение в нефтепромышленной химии для входного контроля и прогнозирования эффективности применения ингибиторов гидратообразования термодинамического типа действия, используемых для предотвращения образования газогидратов при добыче, подготовке или транспортировке углеводородного сырья.

Литература

1. Истомин В.А., Якушев В.С., Квон В.Г., Долгаев С.И., Чувилин Е.М. Направления современных исследований газовых гидратов // Газохимия. 2009. № 5. С. 56–63.
2. Макогон Ю.Ф. Природные газовые гидраты: распространение, модели образования, ресурсы // Российский химический журнал. 2003. Т. 47. № 3. С. 70–79.
3. Соловьёв В.А. Природные газовые гидраты как потенциальное полезное ископаемое // Российский химический журнал. 2003. Т. 47. № 3. С. 59–69.
4. Makogon Y.F. Natural gas hydrates — A promising source of energy // Journal of Natural Gas Science and Engineering. 2010. V. 2. N 1. P. 49–59. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2009.12.004>

References

1. Istomin V.A., Yakushev B.C., Kvon V.G., Dolgaev S.I., Chuvilin E.M. State-of-the-art research of the gas hydrates. *Gazokhimiya*, 2009, no. 5, pp. 56–63. (in Russian)
2. Makogon Yu.F. Natural gas hydrates: distribution, formation models, resources. *Rossiiskij Himicheskij Zhurnal*, 2003, vol. 47, no. 3, pp. 70–79. (in Russian)
3. Solov'ev V.A. Natural gas hydrates as a potential mineral resource. *Rossiiskij Himicheskij Zhurnal*, 2003, vol. 48, no. 3, pp. 59–69. (in Russian)
4. Makogon Y.F. Natural gas hydrates — A promising source of energy. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2010, vol. 2, no. 1, pp. 49–59. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2009.12.004>

5. Hongsheng D., Wang J., Xie Z., Wang B., Zhang L., Shi Q. Potential applications based on the formation and dissociation of gas hydrates // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2021. V. 143. P. 110928. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.110928>
6. Thakre N., Jana A.K. Physical and molecular insights to Clathrate hydrate thermodynamics // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2021. V. 135. P. 110150. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110150>
7. Sloan E.D., Koh C.A., Sum A. *Natural Gas Hydrates in Flow Assurance*. Gulf Professional Publishing, 2010. 224 p.
8. Грицишин Д.Н., Квон В.Г., Истомин В.А., Минигулов Р.М. Технологии предупреждения гидратообразования в промысловых системах: проблемы и перспективы // *Газохимия*. 2009. № 10. С. 32–40.
9. Келланд М.А. Промысловая химия в нефтегазовой отрасли. СПб.: Профессия, 2015. 607 с.
10. Ворожцова Ю.С., Носенко Т.Н., Успенская М.В. Определение типа действия ингибиторов гидратообразования по их инфракрасным спектрам // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2023. Т. 23. № 4. С. 669–675. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-4-669-675>
11. Semenov A.P., Medvedev V.I., Gushchin P.A., Vinokurov V.A. Kinetic inhibition of hydrate formation by polymeric reagents: effect of pressure and structure of gas hydrates // *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. 2016. V. 51. N 6. P. 679–687. <https://doi.org/10.1007/s10553-016-0658-5>
12. Gjertsen L.H., Fadnes F.H. Measurements and predictions of hydrate equilibrium conditions // *Annals of the New York Academy of Sciences*. 2006. V. 912. N 1. P. 722–734. <https://doi.org/10.1111/j.1749-6632.2000.tb06828.x>
13. Tohidi B., Burgass R.W., Danesh A., Ostergaard K.K., Todd A.C. Improving the accuracy of gas hydrates dissociation point measurements // *Annals of the New York Academy of Sciences*. 2000. V. 912. N 1. P. 924–931. <https://doi.org/10.1111/j.1749-6632.2000.tb06846.x>
14. Zaporozhets E.P., Shostak N.A. Efficiency estimation of the singleand multicomponent anti-hydrate reagents // *Journal of Mining Institute*. 2019. V. 238. P. 423–429. <https://doi.org/10.31897/PMI.2019.4.423>
15. Муратова Э.Ж., Крапивин В.Б., Истомин В.А., Федулов Д.М., Квон В.Г., Герасимов Ю.А., Сергеева Д.В., Тройникова А.А., Семенов А.П. Ингибитор гидратообразования на основе смесей моноэтиленгликоля и метанола // *Вести газовой науки*. 2023. № 4 (56). С. 145–154.
16. Гусаков В.Н., Катермин А.В., Михайлова Л.Р., Горбунов В.В., Невядовский Е.Ю. Разработка методологии оперативного контроля качества нефтепромысловых химических реагентов // *Нефтегазовое дело*. 2021. Т. 19. № 4. С. 81–89. <https://doi.org/10.17122/ngdelo-2021-4-81-89>
17. Ракитин А.Р., Боженкова Г.С., Киселев С.А. Стеванович Е., Кильматов А.А. Инфракрасная спектроскопия для контроля качества ингибиторов коррозии // *Нефтепромысловое дело*. 2022. № 11 (647). С. 69–76. [https://doi.org/10.33285/0207-2351-2022-11\(647\)-69-76](https://doi.org/10.33285/0207-2351-2022-11(647)-69-76)
18. Суховерхов С.В., Задорожный П.А., Полякова Н.В. Применение инструментальных методов для анализа объектов нефтепромысловой химии // *Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук*. 2021. № 5 (219). С. 134–143. https://doi.org/10.37102/0869-7698_2021_219_05_11
19. Саранцева В.Д., Бадамшин А.Г., Каштанова Л.Е. Оценка возможности применения методов тонкослойной хроматографии и ИК-спектроскопии в лабораторных исследованиях по подбору химических реагентов // *Практические аспекты нефтепромысловой химии*. 2023. С. 146–147.
20. Ишмияров Э.Р., Прокудина В.Д. Формирование инструментального лабораторного подхода по контролю качества нефтепромысловых химических реагентов // *Экспозиция Нефть Газ*. 2024. № 8 (109). С. 134–143. <https://doi.org/10.24412/2076-6785-2024-8-134-143>
21. Кожевина Ю.С., Носенко Т.Н., Успенская М.В. Оценка количественного состава ингибиторов гидратообразования по их инфракрасным спектрам // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2024. Т. 24. № 3. С. 366–374. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2024-24-3-366-374>
22. Лаптинский К.А., Буриков С.А., Сарманова О.Э., Вервальд А.М., Утегенова Л.С., Пластинин И.В., Доленко Т.А. Диагностика вредных примесей в водных средах с помощью спектроскопиче-
5. Hongsheng D., Wang J., Xie Z., Wang B., Zhang L., Shi Q. Potential applications based on the formation and dissociation of gas hydrates. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2021, vol. 143, pp. 110928. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.110928>
6. Thakre N., Jana A.K. Physical and molecular insights to Clathrate hydrate thermodynamics. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2021, vol. 135, pp. 110150. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110150>
7. Sloan E.D., Koh C.A., Sum A. *Natural Gas Hydrates in Flow Assurance*. Gulf Professional Publishing, 2010, 224 p.
8. Gritichin D.N., Kvon V.G., Istomin V.A., Minigulov R.M. Technologies for preventing hydrate formation in production systems: challenges and prospects. *Gazohimiya*, 2009, no. 10, pp. 32–40. (in Russian)
9. Kelland M.A. *Production Chemicals for the Oil and Gas Industry*. CRC Press, 2009, 456 p.
10. Vorozhtsova Iu.S., Nosenko T.N., Uspenskaya M.V. Determination of the action type of hydrate formation inhibitors by their infrared spectra. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 4, pp. 669–675. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-4-669-675>
11. Semenov A.P., Medvedev V.I., Gushchin P.A., Vinokurov V.A. Kinetic inhibition of hydrate formation by polymeric reagents: effect of pressure and structure of gas hydrates. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, 2016, vol. 51, no. 6, pp. 679–687. <https://doi.org/10.1007/s10553-016-0658-5>
12. Gjertsen L.H., Fadnes F.H. Measurements and predictions of hydrate equilibrium conditions. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 2006, vol. 912, no. 1, pp. 722–734. <https://doi.org/10.1111/j.1749-6632.2000.tb06828.x>
13. Tohidi B., Burgass R.W., Danesh A., Ostergaard K.K., Todd A.C. Improving the accuracy of gas hydrates dissociation point measurements. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 2000, vol. 912, no. 1, pp. 924–931. <https://doi.org/10.1111/j.1749-6632.2000.tb06846.x>
14. Zaporozhets E.P., Shostak N.A. Efficiency estimation of the singleand multicomponent anti-hydrate reagents. *Journal of Mining Institute*, 2019, vol. 238, pp. 423–429. <https://doi.org/10.31897/PMI.2019.4.423>
15. Muratova E.Zh., Krapivin V.B., Istomin V.A., Fedulov D.M., Kvon V.G., Gerasimov Iu.A., Sergeeva D.V., Troinikova A.A., Semenov A.P. Hydrate inhibitor based on mixtures of monoethylene glycol and methanol. *Vesti Gazovoj Nauki*, 2023, no. 4 (56). pp. 145–154. (in Russian)
16. Gusakov V.N., Katermin A.V., Mikhailova L.R., Gorbunov V.V., Neviadovskii E.Iu. Methodology for quality control and application of oilfield chemicals. *Petroleum Engineering*, 2021, vol. 19, no. 4, pp. 81–89. (in Russian). <https://doi.org/10.17122/ngdelo-2021-4-81-89>
17. Rakitin A.R., Bozhenkova G.S., Kiselev S.A. Stevanovich E., Kilmamatov A.A. Infrared spectroscopy for quality control of corrosion inhibitors. *Oilfield Engineering*, 2022, no. 11 (647), pp. 69–76. (in Russian). [https://doi.org/10.33285/0207-2351-2022-11\(647\)-69-76](https://doi.org/10.33285/0207-2351-2022-11(647)-69-76)
18. Sukhoverkhov S.V., Zadorozhnyi P.A., Poliakova N.V. Application of instrumental methods for oilfield chemistry objects analysis. *Vestnik of the Far East Branch of the Russian Academy of Sciences*, 2021, no. 5 (219), pp. 134–143. (in Russian). https://doi.org/10.37102/0869-7698_2021_219_05_11
19. Sarantseva V.D., Badamshin A.G., Kashtanova L.E. Evaluation of the possibility of using thin-layer chromatography and IR spectroscopy methods in laboratory studies concerning the selection of chemical reagents. *Proc. of the Practical Aspects of Oilfield Chemistry*, 2023, pp. 146–147. (in Russian)
20. Ishmiiarov E.R., Prokudina V.D. Ormation of an instrumental laboratory approach to quality control of oilfield chemical reagents. *Exposition Oil Gas*, 2024, no. 8 (109), pp. 134–143. (in Russian). <https://doi.org/10.24412/2076-6785-2024-8-134-143>
21. Kozhevina Iu.S., Nosenko T.N., Uspenskaya M.V. Assessment of the quantitative composition of hydrate formation inhibitors by their infrared spectra. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 3, pp. 366–374. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2024-24-3-366-374>
22. Laptinskiy K. A., Burikov S.A., Sarmanova O.E., Vervald A.M., Utegenova L.S., Plastinin I.V., Dolenko T. A. Diagnostics of harmful impurities in aqueous media using spectroscopic methods and

- ских методов и алгоритмов машинного обучения // Оптика и спектроскопия. 2023. Т. 131 № 6. С. 810–816. <https://doi.org/10.21883/OS.2023.06.55915.106-23>
23. Запорожец Е.П., Шостак Н.А. Расчет эффективности одно- и многокомпонентных антигидратных реагентов, Записки Горного института. 2019. Т. 238. С. 423–429. <https://doi.org/10.31897/PMI.2019.4.423>
 24. Kunakova A.M., Usmanova F.G., Vorozhtsova I.S., Lanchuk I.V. Approaches to the selection of effective inhibitors of gas hydrate formation // Proc. of the SPE Russian Petroleum Technology Conference. 2019. P. 1–23. <https://doi.org/10.2118/196781-MS>
 25. Кунакова А.М., Усманова Ф.Г., Ворожцова Ю.С., Гоголева А.Д. Оценка эффективности ингибиторов гидратообразования изотермическим методом // PRОнефть. Профессионально о нефти. 2019. № 1 (11). С. 18–21. <https://doi.org/10.24887/2587-7399-2019-1-18-21>
 - machine learning algorithms. *Optics and Spectroscopy*, 2023, vol. 131, no. 6, pp. 765–771. <https://doi.org/10.61011/EOS.2023.06.56664.106-23>
 23. Shostak N.A., Zaporozhets E.P. Efficiency estimation of the single- and multicomponent anti-hydrate reagents. *Journal of Mining Institute*, 2019, vol. 238, pp. 423–429. (in Russian). <https://doi.org/10.31897/PMI.2019.4.423>
 24. Kunakova A.M., Usmanova F.G., Vorozhtsova I.S., Lanchuk I.V. Approaches to the selection of effective inhibitors of gas hydrate formation. *Proc. of the SPE Russian Petroleum Technology Conference*. 2019. pp. 1–23. <https://doi.org/10.2118/196781-MS>
 25. Kunakova A.M., Usmanova F.G., Vorozhtsova Iu.S., Gogoleva A.D. Evaluation of the effectiveness of hydrate-formation inhibitors by the isothermal method. *PROneft. Professionals about Oil*, 2019, no. 1 (11), pp. 18–21. (in Russian). <https://doi.org/10.24887/2587-7399-2019-1-18-21>

Авторы

Кожевина Юлия Сергеевна — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57215118092](https://orcid.org/0009-0006-1359-1235), <https://orcid.org/0009-0006-1359-1235>, leta-x@mail.ru

Носенко Татьяна Николаевна — кандидат технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, [sc 57190940294](https://orcid.org/0000-0003-4159-133X), <https://orcid.org/0000-0003-4159-133X>, tata-nostra@yandex.ru, tnnosenko@itmo.ru

Authors

Iuliia S. Kozhevina — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57215118092](https://orcid.org/0009-0006-1359-1235), <https://orcid.org/0009-0006-1359-1235>, leta-x@mail.ru

Tatiana N. Nosenko — PhD, Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, [sc 57190940294](https://orcid.org/0000-0003-4159-133X), <https://orcid.org/0000-0003-4159-133X>, tata-nostra@yandex.ru, tnnosenko@itmo.ru

Статья поступила в редакцию 12.05.2025

Одобрена после рецензирования 05.09.2025

Принята к печати 25.09.2025

Received 12.05.2025

Approved after reviewing 05.09.2025

Accepted 25.09.2025



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»