

## **Анализ компонентного состава природного газа методом инфракрасной фурье-спектроскопии**

**Гылка Роман Андреевич**

МГТУ им. Н.Э. Баумана

gyylkara@student.bmstu.ru

**Фуфурин Игорь Леонидович**

МГТУ им. Н.Э. Баумана

igfil@mail.ru

**Винтайкин Иван Борисович**

АО «Центр прикладной физики МГТУ им. Н.Э. Баумана»

Vintaikin\_IVan@mail.ru

**Морозов Андрей Николаевич**

МГТУ им. Н.Э. Баумана

amor@bmstu.ru

*Представлена обработка экспериментальных данных, полученных на основе метода инфракрасной фурье-спектроскопии. В результате снят спектр природного газа с помощью фурье-спектрометра с кюветой. На базе полученного спектра и спектров газов из базы данных NIST рассчитаны приблизительные концентрации основных газов в составе природного газа и рассчитаны погрешности измерений. За основные газы были приняты метан, этан, пропан и углекислый газ.*

**Ключевые слова:** природный газ, закон Бугера — Ламберта — Бера, инфракрасная спектроскопия, фурье-спектроскопия

### **Введение**

В настоящее время важно знать состав природного газа для использования его в разных областях деятельности человека. Этот газ широко используется в энергетике как энергоноситель и в крупнотоннажной химии как источник углеводородного сырья для синтеза полимеров и азотных удобрений. Основу природного газа составляет метан, но обычно в его состав входят и более тяжелые углеводороды: этан, пропан, бутан. Также в составе природных газов в качестве примесей присутствуют водород, сероводород, азот, углекислота, гелий и другие инертные газы. Существуют разные методы анализа газа: механические, акустические, тепловые, магнитные, оптические, ионизационные, масс-спектрометрические, электрохимические, полупроводниковые.

Для анализа состава природного газа применяют акустический метод, основанный на измерении поглощения или скорости распространения звуковых и ультразвуковых волн в газовой смеси. Используют тепловые методы, основанные на измерении теплопроводности газовой смеси (термокондуктометрический метод) или теплового эффекта радиации с участием определяемого компонента (термохимический метод). Мы выбрали оптический метод, измеряющий оптическую плотность, который относится к абсорбционным методам. Абсорбционные методы основаны на измерении селективного поглощения инфракрасного (ИК), ультрафиолетового (УФ) или видимого излучения контролируемым компонентом.

Был использован метод инфракрасной фурье-спектроскопии для анализа компонентного состава природного газа. Для измерения спектров поглощения использовали фурье-спектрометр с кюветой, внутри которой и находится исследуемый газ, который

был разбавлен, поскольку оптический путь излучения достаточно большой и большая часть излучения поглощается.

## Описание экспериментальной установки

Общий вид экспериментальной установки показан на рис. 1, схема — на рис. 2.



**Рис. 1.** Общий вид установки

Установка содержит следующие основные блоки: 1 — газосмеситель; 2 — баллон с природным газом; 3 — баллон с азотом (газом-разбавителем); 4 — фурье-спектрометр с кюветой; 5 — компьютер подключенный к спектрометру.

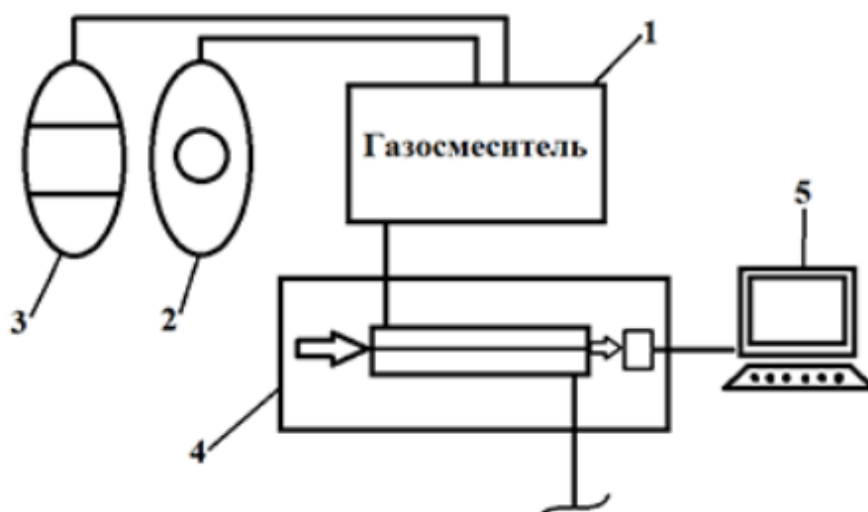


Рис. 2. Схема установки

С помощью газосмесителя 1 природный газ из баллона 2 разбавляется азотом из баллона 3 и подводится по трубке в кювету спектрометра 4. В кювете через газ проходит излучение, чей оптический путь равен 6 м. Полученные данные на спектрометре сохраняются на компьютере 5. Природный газ выходит из кюветы по трубке в атмосферу.

### Математическая часть

Для обработки данных спектра газа использовали закон Бугера — Ламберта — Бера:

$$I = I_0 \exp(-\chi_\lambda C d).$$

Для расчета концентраций газов в газовой смеси понадобится лишь оптическая плотность. За основные компоненты были взяты метан, этан, пропан и углекислый газ. Так, по закону Бугера — Ламберта — Бера каждый компонент вносит свой вклад на каждой длине волны в зависимости от его концентрации. Данные спектров можно представить как матрицу  $(4 \times N)$  умноженную на матрицу  $(1 \times 4)$  с соответствующими коэффициентами, а результатом будет матрица  $(1 \times N)$ :

$$A \times K = B.$$

Чтобы найти коэффициенты, воспользуемся псевдообратной матрицей к матрице газов, так как эта матрица не является квадратной:

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T;$$

$$K = A^+ B.$$

Таким образом, получена концентрация, умноженная на оптический путь. Данные о спектрах газа выбраны из базы данных NIST, где газы разбавлены и их оптический путь составляет всего 5 см. Конечно, рассматриваемая газовая смесь также разбавлена, но сильнее, а оптический путь составляет 6 м. Используя эту информацию, можно рассчитать коэффициенты:

$$C_{new}^i = k_i \frac{C_{old}^i d_{old}}{d_{new}}.$$

Рассчитанные молярные концентрации веществ представлены в таблице.

Вещество	По паспорту, %	Полученные, %
Метан	95,2	63
Этан	2,69	14
Пропан	0,836	16,13
CO <sub>2</sub>	0,247	6,86

Соответствующие зависимости показаны на рис. 3.

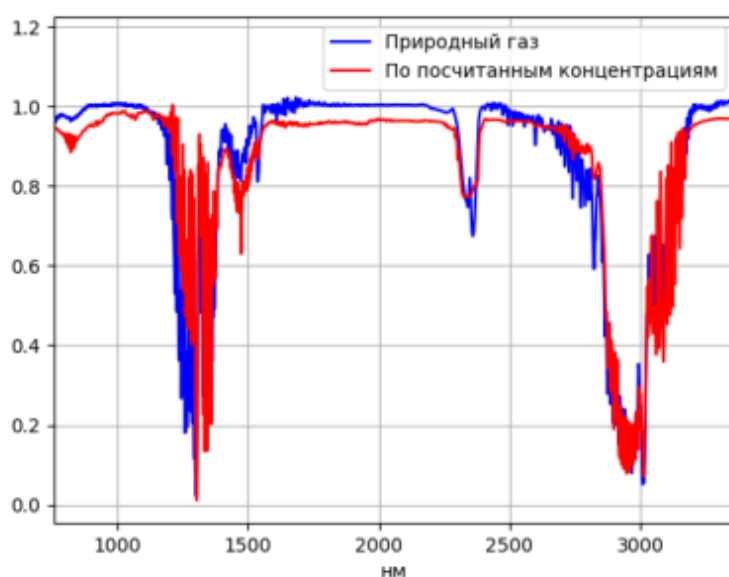


Рис. 3. Результаты расчета

## Заключение

Погрешность основного газа метана составляет 33 %. Причиной такой значительной разницы между данными служит то, что полученные результаты получены на основе только четырех компонентов газовой смеси, а сам природный газ содержит еще и бутан, пентан и другие органические соединения. Другой причиной служит поглощение интенсивности излучения окружающим воздухом.

## Литература

- [1] Морозов А. Н., Светличный С. И. Основы фурье-спектрометрии. Москва, Наука, 2006, 275 с.
- [2] Morozov A.N. et al. Statistical estimation of the probability of the correct substance detection in FTIR spectroscopy. *Computer Optics*, 2015, vol. 39. no. 4, pp. 614–621.  
DOI: <https://doi.org/10.18287/0134-2452-2015-39-4-614-621>
- [3] Морозов А.Н., Светличный С.И., Фуфурин И.Л. Коррекция волновых чисел в панорамном фурье-спектрометре. Докл. академии наук, 2015, т. 464, №. 2, с. 156–156.
- [4] Балашов А.А. и др. Фурье-спектрометр ФСП-03. Приборы и техника эксперимента, 2013, № 3, с. 142–142.
- [5] Fodor G.E. Analysis of natural gas by fourier transform infrared spectroscopy. Interim Report TFLRF No. 31. U.S. Army TARDEC Mobility Technology Center-Belvoir Fort Belvoir, Virginia. Contract No. DAAK70-92-C-0059