

(19)



**Евразийское
патентное
ведомство**

(21) **202000113** (13) **A1**(12) **ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ЕВРАЗИЙСКОЙ ЗАЯВКЕ**(43) Дата публикации заявки
2021.08.12(51) Int. Cl. **G01N 21/31** (2006.01)
G16C 20/20 (2019.01)
G01J 3/30 (2006.01)(22) Дата подачи заявки
2020.02.28**(54) СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА ГАЗА**(96) **2020/ЕА/0012 (ВУ) 2020.02.28**

(72) Изобретатель:

(71) Заявитель:
**БЕЛОРУССКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ (БГУ) (ВУ)****Кугейко Михаил Михайлович,
Баравик Андрей Александрович (ВУ)**

(57) Предлагаемое изобретение относится к области аналитического приборостроения и может быть использовано для измерения концентраций различных газов в атмосфере, технологических процессах и т.д. Задачей изобретения является расширение функциональных возможностей способа определения концентраций компонентного состава за счет использования его в любых газовых смесях с перекрывающимися линиями поглощения входящих в них компонентов, повышение при этом точности измерения концентраций газов. Поставленная задача достигается тем, что в заданном спектральном диапазоне ($\lambda_j - \lambda_k$) видимого и(или) инфракрасного излучения, включающем линии поглощения определяемых компонент, измеряют величины спектрального поглощения $I(\lambda_i)$ для $i=1, 2, 3, \dots, n$ длин волн, разнесенных на $\Delta\lambda$ - ширину спектрального разрешения спектрометра или задаваемую ширину, где $n=(\lambda_j - \lambda_k)/\Delta\lambda$, измеряют температуру $T^\circ\text{K}$ и давление P среды, а численные значения концентрации $M_{k,P,T^\circ\text{K}}$ определяемых газовых компонент k для установленных давления и температуры окружающей среды определяют с использованием уравнений множественной регрессии

$$M_{k,P,T^\circ\text{K}} = a + \sum_{m=1}^N b_m C_m,$$

где N - количество главных компонент для величин поглощения $I(\lambda_i)$, а a и b_m - численные коэффициенты, найденные заранее с использованием метода наименьших квадратов при аппроксимации указанным выше уравнением статических данных о множестве связей величин главных компонент для $I(\lambda_i)$ с концентрацией определяемых газовых компонент при множестве различных значений концентрации состава газовой смеси и учете уширения спектральных линий поглощения за счет температуры и давления, C_m - численное значение главных компонент, выделенных из спектральных значений $I(\lambda_i)$, соответствующие P и $T^\circ\text{K}$, а также численные значения a , b_m и C_m определяют для задаваемого диапазона значений P и $T^\circ\text{K}$.

A1**202000113****202000113****A1**

Способ определения концентрации компонентного состава газа

Предлагаемое изобретение относится к области аналитического приборостроения и может быть использовано для измерения концентраций различных газов в атмосфере, технологических процессах и т. д.

Известные оптико-абсорбционные методы анализа газов основаны на регистрации поглощения определенным газом на длине волны, соответствующей его максимальному коэффициенту поглощения (или в узком интервале длин волн) [1], или на двух длинах волн – на длине максимального коэффициента поглощения и крыле линии, где коэффициент поглощения мал [2]. Данные методы позволяют определить концентрацию газа, если его спектральные линии не перекрываются с линиями других газов, находящихся в смеси.

Для случая перекрытия полос поглощения известен способ [3], заключающийся в посылке и регистрации излучения на длинах волн, одна из которых находится вне полосы поглощения контролируемых газов, а другие на длинах волн, относящихся к центрам полос поглощения контролируемых газов. К недостаткам способа следует отнести: требуется знание, а значит, измерения концентрации контролируемых газов, полученные без учета перекрытия поглощения газов, и установление коэффициентов, использующих форму контуров линий поглощения контролируемых газов, которые, к тому же, зависят от температуры, давления окружающей среды.

Для многокомпонентных газовых сред требуются спектральные измерения поглощения [4]: однако задача нахождения концентрации газовых компонент из результатов измерений относится к классу некорректных математических, поскольку решение таких задач может быть неустойчивым по отношению к малым вариациям (погрешностям) измеряемых данных. Это приводит к большим погрешностям в определении компонентного состава смеси.

Известен способ измерения газового состава атмосферного воздуха, в котором измерения проводятся путем сравнения спектров рассеянного солнечного излучения, приходящего с горизонтального участка атмосферы, и солнечного излучения, освещающего этот участок атмосферы сверху [5]. В этом случае длина горизонтальной трассы определяется как величина, обратная коэффициенту ослабления солнечного излучения, прошедшего этот участок атмосферы. Поэтому применение этого способа осложняется необходимостью определения коэффициента ослабления солнечного излучения на соответствующем участке атмосферы, т.е. необходимостью использования дополнительной измерительной аппаратуры.

Известен способ одновременного измерения абсолютного и относительного содержания окислов углерода CO и CO₂ в газообразной среде для мониторинга содержания этих окислов, например, в атмосфере, выдыхаемом воздухе, в частности для биомедицинской диагностики [6]. Для

анализа используются линии поглощения CO и CO₂, попадающие в спектральную область, перекрываемую перестраиваемым полупроводниковым лазером, и не перекрывающиеся с линиями поглощения паров воды. Оптическую частоту лазера сканируют за счет накачки лазера периодически повторяющимися импульсами тока определенной амплитуды, длительности и частоты повторения. Лазерное излучение пропускают через многоходовую оптическую кювету, содержащую исследуемую газовую среду, с определенной длиной оптического пути. Изобретение позволяет одновременно определять концентрации молекул CO и CO₂. Способ требует использования не перекрывающихся с линиями поглощения паров воды линий поглощения Р-ветви CO из фундаментальной колебательно-вращательной полосы 1-0 и линии поглощения полосы 20001-01101 CO₂, расположенных в спектральном диапазоне от 2100 см⁻¹ до 2125 см⁻¹.

Наиболее близким техническим решением к заявляемому является способ, заключающийся в циклическом во времени или одновременном измерении поглощения излучения анализируемым газом на различных комбинациях длин волн (от восьми до девяти длин волн в каждой комбинации λ – в зависимости от состава среды) [7]. Недостатком данного способа является то, что данные комбинации выбираются исходя из того, к какой категории относится газ, что, в свою очередь, определяется предварительным измерением поглощения посылаемого излучения анализируемым газом на семи длинах волн инфракрасного из этого же спектрального диапазона. Кроме того, концентрации рассчитываются из решения неоднородной линейной системы уравнений (относится к классу некорректных обратных задач) методом наименьших квадратов с итерационным уточнением коэффициента с использованием преобразования Хаусхолдера. Данная методика расчета требует выполнения условия, что во всем используемом диапазоне зависимость коэффициентов поглощения от долей компонентов газа должна быть линейной при любых соотношениях между этими компонентами (для атмосферных газов это не выполняется). Только в этом случае возможно однозначное определение долей компонентов газа по измеренным значениям коэффициента поглощения. Более того, на точность определения концентрации компонентов влияет и погрешность получения измерительной информации, поскольку интерпретация результатов относится к классу некорректных обратных задач. Данный способ к тому же позволяет определить компонентный состав только природного газа и газовых смесей на его основе – в других смесях он не работает.

Задачей изобретения является расширение функциональных возможностей способа определения концентраций компонентного состава за счет использования его в любых газовых смесях с перекрывающимися линиями поглощения входящих в них компонентов, повышение при этом точности измерения концентраций газов.

Решение поставленной задачи достигается тем, что в известном способе

определения компонентного состава природного газа в реальном масштабе времени, в заданном спектральном диапазоне $(\lambda_j - \lambda_k)$ видимого и (или) инфракрасного излучения, включающем линии поглощения определяемых компонент, измеряют величины спектрального поглощения $I(\lambda_i)$ для $i=1,2,3,\dots,n$ длин волн, разнесенных на $\Delta\lambda$ – ширину спектрального разрешения спектрометра или задаваемую, где $n=(\lambda_j - \lambda_k)/\Delta\lambda$, измеряют температуру T^0K и давление P среды, а численные значения концентрации M_{k,P,T^0K} определяемых газовых компонент для установленных давления и температуры окружающей среды определяют с использованием уравнений множественной регрессии

$$M_{k,P,T^0K} = a + \sum_{m=1}^N b_m C_m$$

где N – количество главных компонент C_m для величин поглощения $I(\lambda_i)$, a и b_m – численные коэффициенты, найденные заранее с использованием метода наименьших квадратов при аппроксимации указанным выше уравнением статических данных о множестве связей величин главных компонент для $I(\lambda_i)$ с концентрацией определяемых газовых компонент при множестве различных значений концентрации состава газовой смеси и учете уширения спектральных линий поглощения за счет температуры и давления. Кроме того, в уравнении множественной регрессии численные значения a , b_i и C_m определяют также для задаваемого диапазона значений P и T^0K .

Сущность изобретения поясняется фиг.1 – фиг.3, где на фиг.1 приведена функциональная схема системы, реализующей способ, а на фиг. 2 и фиг.3 соответственно коэффициенты a , b_m регрессивного соотношения при значениях температур в интервале 253 – 293 T^0K для H_2O и CO_2 .

Функциональная схема системы (фиг.1) содержит источник светового излучения 1 в задаваемом спектральном диапазоне $(\lambda_j - \lambda_k)$ видимого и (или) ИК диапазона, спектрометр 2, фотоприемное устройство 3 и информационно – измерительный блок 4.

Принцип действия системы основан на измерении фотоприемным устройством 3 прошедших через спектрометр 2 в спектральном диапазоне $(\lambda_j - \lambda_k)$ величин сигналов $P(\lambda_i)$ от источника 1 для каждой из регистрируемых длин волн, определении величины $I(\lambda_i)$ спектрального поглощения излучения, проходящего через исследуемую среду на длинах волн λ_i , соответствующих значениям $i=1,2,3,\dots, n$, $n=(\lambda_j - \lambda_k)/\Delta\lambda$, где $\Delta\lambda$ – ширина спектрального разрешения спектрометра или задаваемая, определяющая количество длин волн n , на которых проводятся измерения поглощения (в идеальном случае соответствует спектральному разрешению используемого спектрометра 3). Определение величин поглощения $I(\lambda_i)=P(\lambda_i)/P_1(\lambda_i)$ требует знания аппаратных констант $P_1(\lambda_i)$, которые устанавливаются путем проведения калибровочных измерений в отсутствие определяемых газовых

компонент. Задаваемый спектральный диапазон ($\lambda_j - \lambda_k$) должен включать линии поглощения компонентов анализируемой смеси газов.

Информационно-измерительный блок 4, выполненный на микропроцессоре, управляет процессом измерения и обрабатывает измерительную информацию относительно определяемых параметров контролируемой газовой смеси.

При прохождении излучения на указанных выше длинах волн происходит поглощение его компонентами газовой смеси. Величины сигналов для каждой из регистрируемых длин волн $P(\lambda_i)$ можно записать в следующем виде:

$$P(\lambda_i) = A_i P_0(\lambda_i) \exp\left\{-\sum_{k=1}^s M_k \sigma_k(\lambda_i) \ell\right\}, \quad (1)$$

где M_k – концентрации k -ой газовой компоненты на длине волны λ_i ;

s – число газовых компонент в смеси;

$\sigma_k(\lambda_i)$ – сечение поглощения соответствующих газовых компонент смеси;

ℓ – длина измерительной трассы (или ячейки, если газ находится в оптической кювете);

$P_0(\lambda_i)$ – энергия посылаемого излучения;

A_i – аппаратная константа измерительной системы для каждой из длин волн λ_i .

Выражение (1) содержит аппаратные константы $P_0(\lambda_i)$ и A_i , которые определяются измерением сигналов $P(\lambda_i)$, проходящих через участок среды длиной l , в отсутствие определяемых газовых компонент. Другими словами, данная процедура является калибровкой измерительной системы для получаемых величин поглощения.

В самом деле, при отсутствии на исследуемом участке l газовых компонент величины регистрируемых сигналов $P(\lambda_i)$ для каждой из длин волн λ_i равны

$$P_1(\lambda_i) = A_i P_0(\lambda_i), \quad (2)$$

а

$$I(\lambda_i) = P(\lambda_i)/P_1(\lambda_i) = \exp\left\{-\sum_{k=1}^s M_k \sigma_k(\lambda_i) \ell\right\},$$

таким образом, является величиной спектрального поглощения.

Будем оперировать сейчас отношением сигналов $I(\lambda_i) = P(\lambda_i)/P_1(\lambda_i)$, являющимся величиной поглощения, которое равно

$$I(\lambda_i) = \exp\left\{-\sum_{k=1}^s M_k \sigma_k(\lambda_i) \ell\right\}. \quad (3)$$

Для $I(\lambda_i) = P(\lambda_i)/P_1(\lambda_i)$, нормированного на энергию посылаемого излучения и аппаратурные константы, выражение (3) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \ln I(\lambda_1) &= -\frac{1}{\rho} (M_1 \sigma_1(\lambda_1) + M_2 \sigma_2(\lambda_1) + M_3 \sigma_3(\lambda_1) \dots M_s \sigma_s(\lambda_1)), \\ \ln I(\lambda_2) &= -\frac{1}{\rho} (M_1 \sigma_1(\lambda_2) + M_2 \sigma_2(\lambda_2) + M_3 \sigma_3(\lambda_2) \dots M_s \sigma_s(\lambda_2)) \\ &\dots\dots\dots(4) \\ \ln I(\lambda_n) &= -\frac{1}{\rho} (M_1 \sigma_1(\lambda_n) + M_2 \sigma_2(\lambda_n) + M_3 \sigma_3(\lambda_n) \dots M_s \sigma_s(\lambda_n)). \end{aligned}$$

Для интерпретации измерительной информации необходимо решить систему уравнений (4), которую можно записать в виде

$$Bx=F,$$

где

$$B = \begin{pmatrix} \sigma_1(\lambda_1) & \sigma_2(\lambda_1) & \dots & \sigma_s(\lambda_1) \\ \sigma_1(\lambda_2) & \sigma_2(\lambda_2) & \dots & \sigma_s(\lambda_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_1(\lambda_n) & \sigma_2(\lambda_n) & \dots & \sigma_s(\lambda_n) \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \dots \\ M_s \end{pmatrix}, \quad F = -\frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} I(\lambda_1) \\ I(\lambda_2) \\ \dots \\ I(\lambda_n) \end{pmatrix}.$$

Однако поскольку измеряемые величины поглощения и величины сечений поглощения определяются с погрешностями, то данная система относится к системе неоднородного вида. Эта система относится к классу некорректных обратных задач. Решение таких задач может быть неустойчивым по отношению к малым вариациям (погрешностям) измеряемых данных. Это приводит к большим погрешностям в определении компонентного состава смеси [4,7].

Значения $I(\lambda_i)$ можно рассматривать как компоненты случайного вектора $\vec{I}(\lambda_i)$. Разложим вектор $\vec{I}(\lambda_i)$ по системе ортонормированных базисных векторов (главных компонент)

$$\vec{I}(\lambda_i) = \vec{I}(\lambda_i) + VC_m$$

где V – матрица со столбцами из главных компонент C_m , численные значения которых определяются как проекции вектора $\vec{I}(\lambda_i)$ на пространство из главных компонент. Находятся по формуле [8]:

$$C_m = V^t (\vec{I}(\lambda_i) - \vec{I}(\lambda_i)) \quad (5)$$

где индекс t означает операцию транспонирования.

В связи с быстрой сходимостью рассматриваемого разложения на первые базисные векторы приходится большая часть изменчивости вектора $\vec{I}(\lambda_i)$, а соответствующие им главные компоненты содержат в себе

практически столько информации, сколько ее было в исходных данных. Следовательно, для восстановления концентраций компонентного состава газовой смеси M_k можно использовать не сам вектор измерений, а его главные компоненты.

С точки зрения оперативности определения концентраций компонентного состава газовой смеси представляет интерес возможность их расчета на основе аналитического выражения, связывающего их с главными компонентами вектора $\vec{I}(\lambda_i)$ для используемых длин волн $n=(\lambda_j-\lambda_k)/\Delta\lambda$. Такое выражение может быть получено на основе измерений или численного расчета $I(\lambda_i)$ для множества ситуаций или моделирующих его фантомов с известными значениями концентраций M_{k,P,T^0K} компонентного состава газовой смеси при различных значениях ее температуры T^0K и давления P (т.е. учитывается уширение спектральных линий с их изменением) и последующего регрессионного анализа ансамбля реализаций M_{k,P,T^0K} и $I(\lambda_i)$. В частности, в качестве такого выражения можно использовать регрессионные соотношения [8]

$$M_{k,P,T^0K} = a + \sum_{m=1}^N b_m C_m, \quad (6)$$

где N – количество главных компонент.

Численное значение a , b_m определяются путем расчета по формуле (5) главных компонент C_m для всех реализаций $I(\lambda_i)$, каждой из которых соответствует конкретное значение M_{k,P,T^0K} , и использовании метода наименьших квадратов для аппроксимации статистической связи между C_m и M_{k,P,T^0K} .

После получения векторов $\vec{I}(\lambda_i)$ и среднего вектора $\vec{I}(\lambda_i)$, V , а также вышеотмеченного аналитического выражения (6) они могут применяться для получения по измеряемым значениям $I(\lambda_i)$ уже неизвестных заранее концентраций компонентного состава газовой смеси. Численное значение a , b_m , C_m устанавливаются для каждой пары значений давления P и температуры T^0K .

Таким образом, способ определения концентраций компонентного состава газовых смесей включает нахождение по формуле (5) главных компонент для величин спектрального поглощения и определении концентрации на основе регрессионного соотношения (6), соответствующего температуре и давлению в смеси в момент проведения измерений.

Рассмотрим более детально процесс получения главных компонент C_m и коэффициентов регрессии a , b_m на примере определения концентрации газовых компонент – концентрации паров воды H_2O и углекислого газа CO_2 в атмосфере. Это актуальная в настоящее время задача в связи с парниковым эффектом, с которым связывают происходящие изменения в климате. А CO_2

и пары воды являются главными компонентами, обуславливающими данный эффект. Влажность же атмосферы к тому же один из важнейших метеопараметров атмосферы.

Возможности предлагаемого способа оценим для определения водяного пара и углекислого газа в атмосфере по спектральным измерениям поглощения в диапазоне 2640 – 2840 нм, в котором существует сильное перекрытие их линий поглощения.

Для получения главных компонент и коэффициентов регрессии было проведено моделирование процесса поглощения на основе данных из базы HITRAN, которая служит инструментом для расчета поглощения света в газовых средах, включая атмосферу. Рассчитывались величины поглощения $I(\lambda_i)$ в диапазоне 2640 – 2840 нм с шагом 20 нм для случайных значений концентраций паров H_2O и CO_2 из диапазона от 0,1% до 5% для H_2O и от 0,2% до 3% для CO_2 . Измерительная база задавалась равной 10 м.

При расчете моделируемой выборки $I(\lambda_i)$ для каждой температуры и давления учитывалось уширение спектральных линий от их величины. Используя полученные значения $I(\lambda_i)$, были выделены главные компоненты C_m для каждой из температур и давления, равного 1 атм. Объем каждой из выборок составлял 2000 состояний. Приведённые ниже результаты получены для двух главных компонент C_m , которые покрывают 99,9% вариативности данных.

Численные значения C_{mi} главных компонент представляют собой линейную комбинацию из спектрального поглощения в интервале 2640-2840 нм с шагом 20 нм (для $n=(\lambda_j-\lambda_k)/\Delta\lambda=10$ длин волн).

$$C_m = \sum_{i=1}^{10} c_{mi} I(\lambda_i), \quad (7)$$

Множители C_{mi} при спектральных коэффициентах поглощения для главных компонент C_m приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Длины волн, нм	Значения c_{1i}	Значения c_{2i}
2660	0.3218	-0.2689
2680	0.3263	0.2245
2700	0.2504	0.6195
2720	0.3285	0.1991
2740	0.3155	-0.3217
2760	0.3336	-0.1175
2780	0.3122	0.3449
2800	0.3348	0.0888

2820	0.3152	-0.3232
2840	0.3151	-0.3240

Далее с использованием методов наименьших квадратов была установлена статистическая зависимость между главными компонентами C_m , коэффициентами a , b_m и концентрациями компонентов в смеси M_{k,p,T^0K} . Коэффициенты a , b_m регрессивного соотношения (6) для значений температур в интервале 253 – 293 T^0K приведены на фиг. 2 и 3 (по оси x расположены значения температуры T^0K).

Оценка погрешности восстановления концентраций паров H_2O и CO_2 была проведена на выборке $I(\lambda_i)$ при наложении на каждое значение из нее погрешности 5% (объем выборки – 500). Задаваемые значения концентраций паров H_2O и сравнивались с рассчитываемыми по (6). Средние значения погрешностей для концентраций паров H_2O и CO_2 приведены в таблице 2. Как видно из таблицы погрешности восстановления составили для паров H_2O и CO_2 соответственно менее 2% и менее 4%, что говорит об устойчивости регрессионных соотношений к погрешностям измерения величин поглощения ~5%.

Оценивалась погрешность восстановления концентрации CO_2 с использованием указанного выше диапазона длин волн и по методу дифференциального поглощения как наиболее точному и устойчивому из известных к погрешностям измерений регистрируемых сигналов (максимально исключая эти погрешности в условиях отсутствия перекрытия спектральных линий компонентов газа). Однако даже при использовании наиболее слабого перекрытия спектральных линий в данном диапазоне длин волн при определении концентрации CO_2 по данному методу в реальной атмосфере погрешности составляют более 80% (смотри таблицу 2).

Таблица 2.

T^0K	Средняя погрешность восстановления для молекул H_2O , метод регрессионных соотношений	Средняя погрешность восстановления для молекул CO_2 , метод регрессионных соотношений	Средняя погрешность восстановления для молекул CO_2 , метод дифференциального поглощения
253	1.84	3.94	83.03
254	1.86	3.91	83.76
255	1.94	3.72	83.74
256	1.91	3.82	83.72
257	1.93	3.83	83.69

T ⁰ K	Средняя погрешность восстановления для молекул H ₂ O, метод регрессионных соотношений	Средняя погрешность восстановления для молекул CO ₂ , метод регрессионных соотношений	Средняя погрешность восстановления для молекул CO ₂ , метод дифференциального поглощения
258	1.90	3.88	83.67
259	1.88	3.79	83.65
260	1.86	3.70	82.97
261	1.90	3.79	83.61
262	1.87	3.89	83.59
263	1.90	3.80	82.91
264	1.88	3.91	82.89
265	1.93	3.81	83.53
266	1.90	3.85	83.51
267	1.90	3.72	82.83
268	1.96	3.94	82.81
269	1.96	3.80	81.62
270	1.99	3.91	81.60
271	1.86	3.68	83.41
272	1.85	3.83	83.39
273	1.88	3.94	82.84
274	1.96	3.77	82.70
275	1.97	3.85	81.50
276	1.93	3.79	81.48
277	1.94	3.73	82.35
278	2.01	3.85	82.33
279	1.93	3.89	81.58
280	1.94	3.89	81.56
281	1.94	3.65	81.61
282	1.99	3.63	81.59
283	1.96	3.68	83.19
284	1.95	3.72	83.17
285	1.92	3.76	82.51
286	1.92	3.74	82.49
287	1.90	3.90	83.12

$T^{\circ}K$	Средняя погрешность восстановления для молекул H_2O , метод регрессионных соотношений	Средняя погрешность восстановления для молекул CO_2 , метод регрессионных соотношений	Средняя погрешность восстановления для молекул CO_2 , метод дифференциального поглощения
288	1.88	3.80	83.10
289	1.90	3.77	83.09
290	1.94	3.82	83.07
291	1.97	3.68	82.41
292	1.88	3.77	83.04
293	1.91	3.88	83.02

В аналитическом выражении (6), связывающем концентрации компонентов газовой смеси его с главными компонентами вектора измерений $\vec{I}(\lambda_i)$ для длин волн $n=(\lambda_j-\lambda_k)/\Delta\lambda$, численные значения a , b_m , C_m устанавливались для каждой пары величин давления P и температуры $T^{\circ}K$. Представляет практический интерес проводить измерения и в условиях, не требующих знания величин давления P и температуры $T^{\circ}K$ исследуемой газовой смеси. Численные значения a , b_m , C_m для (6) в виде

$$M_k = a + \sum_{m=1}^N b_m C_m \quad (8)$$

и в этом случае устанавливаются на основе измерений или численного расчета $I(\lambda_i)$ для множества ситуаций или моделирующих его фантомов с известными значениями концентраций M_k компонентного состава газовой смеси при различных значениях ее температуры и давления и последующего регрессионного анализа ансамбля реализаций M_k и $I(\lambda_i)$ [8].

Однако если для (6) используется вектор реализаций $\vec{I}(\lambda_i)$, соответствующий разным значениям M_k для конкретных (измеренных) значений давления P и температуры $T^{\circ}K$, то для (8) вектор реализаций \vec{I} включает все значения $I(\lambda_i)$, соответствующие разным значениям M_k для любых значений P и $T^{\circ}K$ из задаваемого диапазона их разброса (задается диапазон изменений M_k , P и $T^{\circ}K$).

После получения векторов $\vec{I}(\lambda_i)$ и среднего вектора $\vec{I}(\lambda_i)$, V , а также вышеотмеченного аналитического выражения они могут применяться для получения по измеренным значениям $I(\lambda_i)$ уже неизвестных заранее концентраций компонентного состава газовой смеси. При этом не требуется знание температуры и давления газовой смеси.

Возможности предлагаемого способа по пункту 2 формулы изобретения оценивались для определения водяного пара и углекислого газа в атмосфере

по спектральным измерениям поглощения в диапазоне 2640 – 2840 нм, в котором существует сильное перекрытие их линий поглощения (для тех же условий что и по пункту 1 формулы изобретения). Коэффициенты линейной регрессии для значений температур в интервале 253-293 $T^{\circ}K$, давления 1 атм. приведены в таблице 3.

Средние значения погрешностей для паров H_2O и CO_2 составили соответственно 3.6% и 6.1%.

Таблица 3.

/	H_2O	CO_2
a	-0.004	0,0368
b_1	0,0161	-0.0010
b_2	-0.0200	0,0258

Как следует из изложенного и в этом случае для интерпретации измерительной информации в условиях сильного перекрытия линий поглощения не требуется выполнения каких либо условий или использования дополнительной информации о состоянии исследуемой среды. Способ обладает устойчивостью к погрешностям измерений величин поглощения (в то время как известные методы из-за некорректности решаемых задач могут приводить к большим погрешностям в определении концентраций компонентного состава газовой смеси).

Таким образом, предлагаемый способ позволяет расширить функциональные возможности известных способов и систем газового анализа многокомпонентных смесей за счет возможностей использования для любых газовых смесей даже в условиях сильного перекрытия спектральных линий поглощения входящих в них компонентов, повышает точность определения концентраций за счет устойчивости к погрешностям используемой измерительной информации. К тому же, позволяет определять компонентный состав газовых смесей в реальном масштабе времени, т. е. решить поставленную задачу.

Используемая литература

1. Дивин А.Г., Понамарев С.В. Методы и средства измерения, испытания и контроля. (Ч.4 Методы и средства измерения состава веществ), Тамбов: Изд-во ФТБОУВПО «ТГТУ», 2014. – (С. 35–45).
2. Межерис Р. Лазерное дистанционное зондирование. М.: Мир 1987. – (С. 276 – 279).
3. Патент ВУ № 12455С₁, G01N21/31, 2009, 10, 30
4. Ионин А.А., Климачев Ю.М., Козлов А.Ю., Котков А.А. Анализ многокомпонентных газовых смесей с помощью лазера, действующего на

- основных и обертоновых переходах молекулы окиси углерода. – Препринт, Москва, 2011. – (С. 5–20).
5. Патент SU №1764014А1, G01W 1/00 (1990.01), заявка 89 4767898, G01H 1/00, 27.10.89, Бюл. № 23
 6. Патент RU 2384836С₁, G01N21/39, G01N21/61, 20.03.2010, Бюл. № 8
 7. Патент RU №2441219 С₁, G01N21/31, 27.01.2012, Бюл. № 3.
 8. Лысенко С.А. Методы оптической диагностики биологических объектов. Минск: БГУ, 2014. – С. 49–52.

Формула изобретения

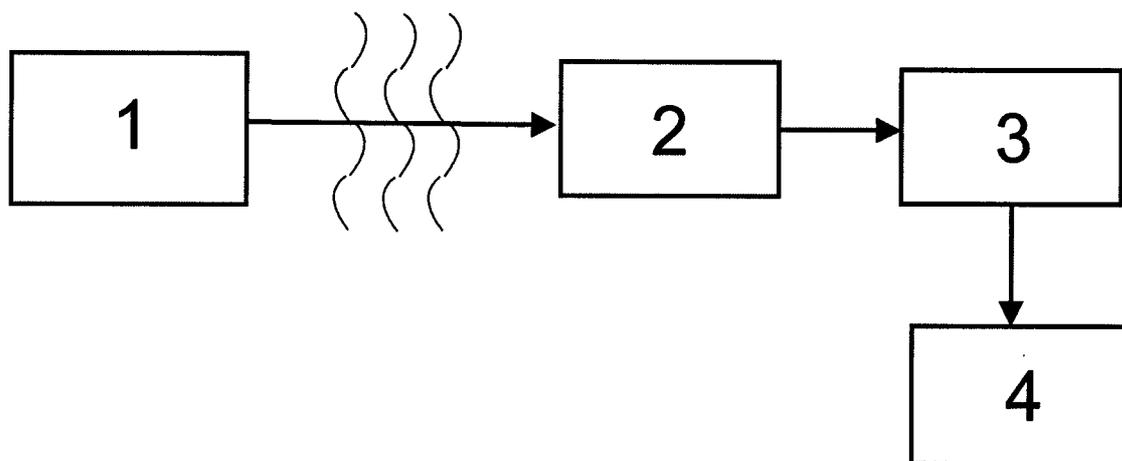
1. Способ определения концентраций компонентного состава газа путем циклического во времени или одновременного измерения поглощения излучения компонентами газа в инфракрасном спектральном диапазоне, отличающийся тем, что в заданном спектральном диапазоне ($\lambda_j - \lambda_k$) видимого и (или) инфракрасного излучения, включающем линии поглощения определяемых компонент, измеряют величины спектрального поглощения $I(\lambda_i)$ для $i=1,2,3,\dots,n$ длин волн, разнесенных на $\Delta\lambda$ – ширину спектрального разрешения спектрометра или задаваемую, где $n=(\lambda_j - \lambda_k)/\Delta\lambda$, измеряют температуру T^0K и давление P среды, а численные значения концентрации M_{k,P,T^0K} газовых компонент k для установленных давления и температуры окружающей среды определяют с использованием уравнений множественной регрессии

$$M_{k,P,T^0K} = a + \sum_{m=1}^N b_m C_m$$

где N – количество главных компонент C_m , численное значение которых выделяются из спектральных значений $I(\lambda_i)$, a и b_m – численные коэффициенты, найденные заранее с использованием метода наименьших квадратов при аппроксимации указанным выше уравнением статических данных о множестве связей величин главных компонент для $I(\lambda_i)$ с концентрацией определяемых газовых компонент при множестве различных значений концентрации состава газовой смеси и учете уширения спектральных линий поглощения за счет температуры и давления.

2. Способ по пункту 1, отличающийся тем, что в уравнении множественной регрессии численные значения a , b_m и C_m определяют для задаваемого диапазона значений P и T^0K .

Способ определения концентрации компонентного состава газа



Фиг. 1

Способ определения концентрации компонентного состава газа



Фиг. 2

Способ определения концентрации компонентного состава газа



Фиг. 3

ОТЧЕТ О ПАТЕНТНОМ ПОИСКЕ
(статья 15(3) ЕАПК и правило 42 Патентной инструкции к ЕАПК)

Номер евразийской заявки:

202000113

А. КЛАССИФИКАЦИЯ ПРЕДМЕТА ИЗОБРЕТЕНИЯ:

G01N 21/31 (2006.01)

G16C 20/20 (2019.01)

G01J 3/30 (2006.01)

Согласно Международной патентной классификации (МПК)

Б. ОБЛАСТЬ ПОИСКА:

Просмотренная документация (система классификации и индексы МПК)

G01N 21/00- G01N 21/958, G16C 20/00- G16C 20/90, G01J 3/00- G01J 3/52

Электронная база данных, использовавшаяся при поиске (название базы и, если, возможно, используемые поисковые термины)
Google Patents, WIPO Patentscope, Espacenet (Worldwide collection), ЕАПАТИС, Яндекс патент

В. ДОКУМЕНТЫ, СЧИТАЮЩИЕСЯ РЕЛЕВАНТНЫМИ

Категория*	Ссылки на документы с указанием, где это возможно, релевантных частей	Относится к пункту №
X	US 2012/0065948 A1 (TAN HUWEI, и др.), 15.03.2012, пар. 0006, 0007, 0046, 0050-0060, 0069-0094, фиг. 2,3	1-2
X	US 2014/00361172 A1 (JP3 MEASUREMENT LLC), 11.12.2014, весь документ	1-2
X	CA 2732978 A1 (PASON SYSTEMS CORP), 04.02.2010, пар.0012, 0013, 0133-0146	1-2
X	US 2015/0103354 A1 (PRECISIVE LLC), 16.04.2015, весь документ	1-2

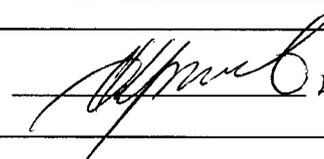
последующие документы указаны в продолжении

* Особые категории ссылочных документов:
«А» - документ, определяющий общий уровень техники
«D» - документ, приведенный в евразийской заявке
«Е» - более ранний документ, но опубликованный на дату подачи евразийской заявки или после нее
«О» - документ, относящийся к устному раскрытию, экспонированию и т.д.
"Р" - документ, опубликованный до даты подачи евразийской заявки, но после даты испрашиваемого приоритета"

«Т» - более поздний документ, опубликованный после даты приоритета и приведенный для понимания изобретения
«Х» - документ, имеющий наиболее близкое отношение к предмету поиска, порочащий новизну или изобретательский уровень, взятый в отдельности
«У» - документ, имеющий наиболее близкое отношение к предмету поиска, порочащий изобретательский уровень в сочетании с другими документами той же категории
«&» - документ, являющийся патентом-аналогом
«L» - документ, приведенный в других целях

Дата проведения патентного поиска: **14/07/2020**

Уполномоченное лицо:
Начальник Управления экспертизы

 Д.Ф. Крылов