

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА ИНГИБИТОРОВ  
ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ ПО ИХ ИНФРАКРАСНЫМ СПЕКТРАМ**

Ворожцова Ю.С. (ИТМО)

Научный руководитель – кандидат технических наук, доцент Носенко Т.Н.  
(ИТМО)

**Введение.** Некоторые природные газы, входящие в состав углеводородсодержащего сырья в соединении с водой способны образовывать снегоподобные скопления, способные закупоривать трубопроводы и промышленное оборудование – газовые гидраты. Наиболее популярным и простым в применении методом в части образования гидратов является применение термодинамических ингибиторов гидратообразования, которые смещают условия устойчивого существования гидратов в сторону более низких температур и более высоких давлений. Для определения эффективности ингибирующего действия реагентов, предотвращающих гидратообразование, рассчитывают величину снижения температуры начала гидратообразования или степень переохлаждения [1]. Возрастание данной величины говорит об увеличении эффективности ингибитора гидратообразования. При условии равенства давлений в исходной системе и в системе с ингибитором величина снижения равновесной температуры гидратообразования зависит только от концентрации реагента или концентрации активных веществ в составе ингибирующего реагента [2]. В промышленных масштабах концентрации активных веществ в коммерческих составах ингибиторов гидратообразования определяются диапазонами, зачастую широкими, а не точными значениями. Вследствие этого только по паспортным значениям концентрации затруднительно оценить ингибирующий эффект реагента. Для его оценки проводятся длительные лабораторные испытания, требующие привлечения высококвалифицированного персонала и дорогостоящего оборудования. Соответственно, актуально привлечение экспрессных методик определения концентрации действующих веществ в ингибиторах гидратообразования для возможности проведения оценки их ингибирующей способности.

**Основная часть.** Наиболее быстродействующим методом для определения концентрации веществ в растворах является метод нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) инфракрасной (ИК) спектроскопии. Для многокомпонентных растворов традиционные подходы определения концентраций веществ по инфракрасным спектрам не применимы по причине их неэффективности при перекрытии спектральных линий. Для решения подобных задач подходят более сложные методы математической обработки, например, регрессионные методы анализа. Известно применение хемометрических алгоритмов в анализе лекарственных и поливитаминных препаратов до 6-ти компонентов [3]. Цель настоящей работы – разработка модели определения количественного состава многокомпонентных водно-спиртовых растворов с применением обработки их ИК спектров хемометрическими методами без пробоподготовки образца. В рамках данной работы были записаны ИК спектры чистых метанола, этанола, этиленгликоля и воды, а также двух- и трехкомпонентных и водных растворов указанных веществ с концентрацией 20-80% по объёму. Всего было записано 35 спектров. Запись спектров проводилась в среднем ИК диапазоне 4000–600 см<sup>-1</sup> в режиме НПВО на Фурье-спектрометре BRUKER Tenzor 37 на кристалле KBr с алмазным напылением. Количество сканирований – 16, спектральное разрешение 2 см<sup>-1</sup>. Обработанные спектральные данные были проанализированы в программном пакете The Unscrambler 9.7 регрессионным методом проекций на латентные структуры (ПЛС). для каждого из определяемых компонентов была построена регрессионная модель, где в качестве независимых переменных использовался набор волновых чисел спектров всех образцов, а в качестве зависимых (прогнозируемых) величин – значение концентрации данного компонента в образце. По результатам анализа работы моделей был определён набор обучающей выборки, при котором их предсказательная способность

наиболее точна. В такую обучающую выборку включены спектры чистых веществ: воды, метанола, этанола и этиленгликоля; двухкомпонентные растворы: водные растворы указанных спиртов с концентрацией 20-90%; трёхкомпонентные растворы: водные растворы указанных спиртов с содержанием воды от 20 до 60% и содержанием каждого из компонентов в количестве 40% или 20% от объёма раствора соответственно. Далее была проведена проверка корректности работы построенных моделей для определения концентраций компонентов в четырехкомпонентном растворе. Был приготовлен тестовый образец составом: вода – 40%, этанол – 20%, этиленгликоль – 20%, этанол – 20% и снят его ИК спектр. По ИК спектру с использованием построенных моделей на обучающей выборке, содержащей 1-2-3-х компонентные растворы, были определены концентрации тестового 4-х компонентного раствора. Максимальная относительная погрешность определения концентрации компонентов составила не более 9%.

**Выводы.** Методом проекций на латентные структуры построены модели для определения концентраций метанола, этанола, этиленгликоля и воды в растворах. Подтверждена работа разработанных моделей с относительной погрешностью результата не более 9%.

#### **Список использованных источников:**

1. Semenov, A. P.; Medvedev, V. I.; Gushchin, P. A.; Vinokurov, V. A. (2016). Kinetic Inhibition of Hydrate Formation by Polymeric Reagents: Effect of Pressure and Structure of Gas Hydrates. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, 51(6), 679–687.
2. Запорожец Е.П. Расчет эффективности одно- и многокомпонентных антигидратных реагентов / Е.П.Запорожец, Н.А.Шостак // Записки Горного института. 2019. Т. 238. С. 423-429.
3. Силаев Д.В. Спектрофотометрический анализ многокомпонентных систем с использованием хемометрических алгоритмов: дис. ... канд. хим. наук. – Омск, 2010. – 162 с.