

<https://doi.org/10.31891/2307-5732-2025-351-19>

УДК 621.5.382

ДУДАТІЄВ ІГОР

Вінницький національний технічний університет

<https://orcid.org/0000-0002-8810-4706>e-mail: dudatiev.igor@gmail.com**МАЛЬЦЕВ СЕРГІЙ**

Вінницький національний технічний університет

<https://orcid.org/0009-0009-2773-6767>e-mail: s.maltsev1999@gmail.com**ПРИТУЛА МАКСИМ**

Вінницький національний технічний університет

<https://orcid.org/0000-0003-1577-5215>e-mail: pritulamo@ukr.net

ДОСЛІДЖЕННЯ КОЕФІЦІЄНТА ПОГЛИНАННЯ CO₂ У АГРЕСИВНИХ ГАЗОВИХ СЕРЕДОВИЩАХ

У роботі проведено дослідження коефіцієнта поглинання CO₂ у агресивних газових середовищах (зокрема у середовищі димових газів котельних установок). Основна увага приділена аналізу спектрів поглинання газів, що є продуктами згоряння, з метою визначення оптимальних довжин хвиль налаштування фотоприймачів у засобах контролю концентрації вуглекислого газу.

Ключові слова: коефіцієнт поглинання CO₂, димові гази котельних установок, спектри поглинання, фотоприймач, математичне моделювання поглинання газів.

DUDATIEV IHOR**MALTSEV SERHII****PRYTULA MAKSYM**

Vinnytsia National Technical University

INVESTIGATION OF THE CO₂ ABSORPTION COEFFICIENT IN AGGRESSIVE GAS ENVIRONMENTS

This study investigates the absorption coefficient of CO₂ in the flue gas environment of boiler installations, focusing on the analysis of absorption spectra of combustion products to determine the optimal wavelengths for setting photodetectors in devices designed to monitor carbon dioxide concentration. The research includes an assessment of the average expected concentration of flue gases in boiler installations, which exceeds 0.1% by volume, within the infrared range of 0.75–15 μm (13330–667 cm⁻¹).

The absorption spectra of key flue gas components, including CO₂, H₂O, N₂O, CO, and CH₄, are presented and analyzed in a unified coordinate system within the spectral range of 1–10 μm (1000–10000 cm⁻¹). Based on the obtained data, it has been established that the most intense absorption region lies within 2200–2500 cm⁻¹. A detailed graphical modeling of absorption in this spectral range was performed, allowing for an accurate determination of spectral band overlap characteristics and their influence on the absorption behavior of CO₂.

Special attention is given to the spectral range of 4.1–4.3 μm (2300–2400 cm⁻¹), where a significant absorption band of CO₂ is observed. To improve the accuracy of CO₂ concentration monitoring in flue gases, a novel method for calculating the CO₂ absorption coefficient within this range is proposed. This method is based on the summation of Lorentz distributions for individual spectral lines, enabling a more precise evaluation of absorption intensity and providing a foundation for optimizing sensor calibration in industrial emission monitoring systems.

Additionally, the study examines the influence of temperature and pressure variations on the absorption characteristics of CO₂ within the specified spectral range. A comparative analysis of experimental and theoretical absorption spectra is conducted to validate the accuracy of the proposed method. The findings highlight the importance of accounting for environmental factors in real-world applications and suggest potential improvements in sensor technology for continuous CO₂ monitoring in industrial and energy production facilities. This research contributes to the development of advanced gas analysis techniques and enhances the effectiveness of CO₂ detection in flue gas monitoring applications, ultimately supporting environmental and energy efficiency initiatives in industrial and boiler system operations.

Keywords: CO₂ absorption coefficient, flue gases of boiler installations, absorption spectra, photodetector, mathematical modeling of gas absorption.

Стаття надійшла до редакції / Received 11.04.2025

Прийнята до друку / Accepted 26.04.2025

Постановка проблеми у загальному вигляді

та її зв'язок із важливими науковими чи практичними завданнями

У сучасних методах контролю та моніторингу викидів промислових котелень коефіцієнт поглинання CO₂ зазвичай використовується у вигляді табличних значень. Проте такі значення є усередненими та не завжди точно відображають реальні умови експлуатації. Фактичне значення коефіцієнта поглинання може значно змінюватися під впливом різних факторів, зокрема температури, тиску, складу газової суміші та інших особливостей об'єкта дослідження.

Димові гази котельних установок є складною сумішшю газів, яка містить CO₂, H₂O, CO, N₂O, CH₄ та інші компоненти. Спектральні характеристики цих газів можуть накладатися, що ускладнює точний аналіз концентрації окремих складових. З огляду на це, важливо проводити комплексні дослідження, які враховують реальні умови експлуатації котелень та їх вплив на характеристики поглинання [1-2].

У цій роботі виконано аналіз спектрів поглинання основних газів, що є продуктами згоряння, та оцінено вплив параметрів середовища на коефіцієнт поглинання CO_2 . Основна увага приділена вибору оптимальних довжин хвиль налаштування фотоприймачів для точного визначення концентрації CO_2 у димових газах.

Аналіз досліджень та публікацій

В аналітичних роботах по даній темі коефіцієнт поглинання CO_2 представлений у вигляді табличного значення основного спектрального показника поглинання газу, але це значення приведено до нормальних фізичних умов, що є неприйнятним для обраного об'єкта контролю, оскільки [2-3] спектральний показник поглинання залежить як від тиску так і від температури, а отже, від них залежить півширина спектральної лінії.

Формулювання цілей статті

Метою роботи є: підвищення точності визначення концентрації CO_2 шляхом аналізу спектрів поглинання основних компонентів газових сумішей, що, в свою чергу, дозволяє оптимізувати налаштування фотоприймачів та розробити методику математичного моделювання процесів поглинання.

Виклад основного матеріалу

Як було зазначено у вступі, ми розглядаємо димові гази котельні як агресивне газове середовище. Щоб визначити налаштування довжини хвилі фотодетектора, який контролює концентрацію вуглекислого газу в димових газах котельні, ми проаналізуємо спектри поглинання [3] газів, які є продуктами згоряння котельні, у повному інфрачервоному діапазоні 0,75-15 мкм (13330-667 cm^{-1}), із середніми очікуваними концентраціями вище 0,1% за об'ємом, як показано на рисунку 1-5.

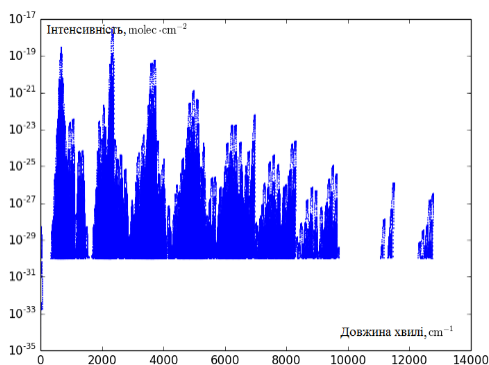


Рис. 1. Діапазон спектрального поглинання CO_2

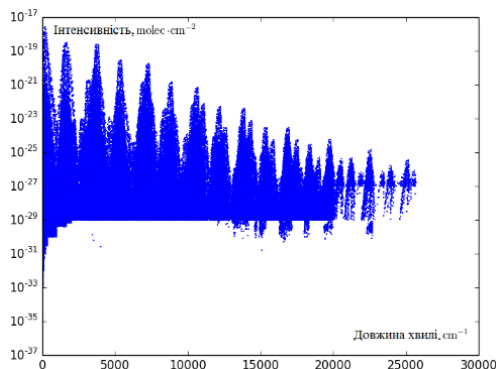


Рис. 2. Діапазон спектрального поглинання H_2O

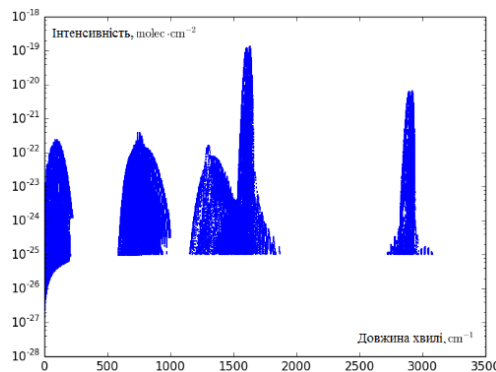


Рис. 3. Діапазон спектрального поглинання N_2O

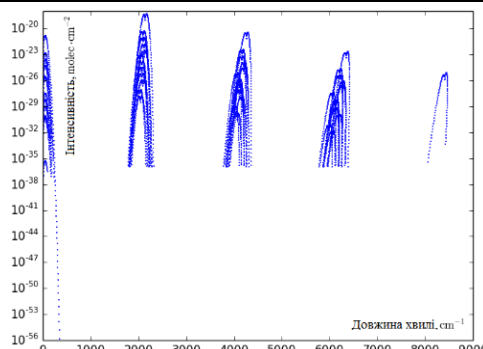
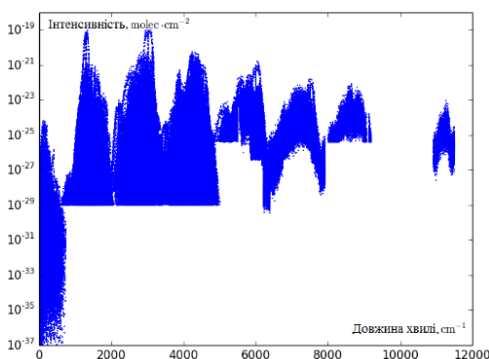


Рис. 4. Діапазон спектрального поглинання CO

Рис. 5. Діапазон спектрального поглинання CH₄

Зі спектрального аналізу видно, що найбільш активна область знаходиться в діапазоні 2200-2500 cm^{-1} , і майже всі смуги поглинання близькі одна до одної (і в деяких випадках перекриваються). Крім того, водяна пара, присутня в газі, займає широкий діапазон довжин смуг поглинання. Тому необхідно не тільки вибирати довжини поглинання газів так, щоб вони не перекривали один одного, але й використовувати високоточні джерела і приймачі випромінювання (спектри яких не допускають проникнення «сусідніх» газів). Аналіз спектрів поглинання газів які зображені на рисунках 1-5 представимо в таблиці 1.

Таблиця 1

Смуги поглинання основних димових газів

Газ \ довжина смуги поглинання	Пари води H ₂ O	CO ₂	N ₂ O	CH ₄
Сильні смуги, мкм	2,66; 2,73; 6,27; 8,8	2,688; 2,765; 4,267; 14,98; 9,13–11,67	4,5; 7,78	3,31
Середні смуги, мкм	2–4,3	2,7; 7,44; 13,9	2,87; 3,87; 4,06; 4,39; 7,69	
Слабкі смуги, мкм		4,82; 5,18; 9,425; 10,41	2,97; 3,57; 5,36; 8,57	2,15; 5,8; 6,45; 7,54

Після аналізу довжини поглинання представлених газів необхідно вибрати інфрачервоний передавач і приймач на основі відомих вхідних даних. Тому параметри фотодіода і фотоприймача можна визначити з урахуванням перетину ліній поглинання. Контрольна точка для кожного газу вибирається так, щоб поблизу не було ліній поглинання інших газів, оскільки вони можуть вплинути на точність вимірювання. Представимо математичну модель ослаблення випромінювання в середовищі димових газів котельні у вигляді закону Бугура-Ламберта-Бере, який зв'язує інтенсивність випромінювання, що проходить через газ (у нашому випадку димові гази), з концентрацією газу який досліджується, довжиною шляху проходження лазерного випромінювання та коефіцієнтом поглинання у наступному вигляді [4]:

$$I_l = I_0 \cdot e^{-\varepsilon Cl}, \quad (1)$$

де C – концентрацією досліджуваного газу, l – довжиною шляху поглинання, ε – показник послаблення.

Показник послаблення ε являє собою суму двох компонентів

$$\varepsilon = k_n + k_p, \quad (2)$$

де k_n та k_p – показники поглинання і розсіювання відповідно.

Завдяки фокусуючій конденсорній лінзі показник розсіювання у формулі (2) зникає [3,5]. Отже, (2) можна переписати у вигляді

$$I_l = I_0 \cdot e^{-k_n C l} \quad (3)$$

Поглиняльна здатність молекул газу в інфрачервоному діапазоні визначається вібраційно-обертальним механізмом молекулярних коливань. З аналізу спектру поглинання CO_2 має найсильнішу смугу поглинання з центральною довжиною 4,264 мкм (це значення приймаємо як робоче). Ця смуга описується функцією Лоренца (яку ми позначимо довжиною λ), а Бреслер П.І. запропонував розглядати смугу поглинання як нескінченну послідовність рівновіддалених ліній λ_i однакової інтенсивності та ширини [3].

$$k_i(\lambda) = \frac{S(\lambda_i)}{\pi} \cdot \frac{\sigma}{\sigma^2 + \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_i}\right)^2} \quad (4)$$

де S – інтенсивність смуги поглинання, λ та λ_0 – довжина смуги та відповідно центр поглинання, σ – ширина смуги поглинання.

В свою чергу

$$S(\lambda_s) = \int_0^{\infty} k_s(\lambda) d\lambda \quad (5)$$

Для отримання необхідної інформації про гази, зокрема їхні спектральні характеристики, такі як інтенсивність і спектральна напівширина ліній, дослідники можуть звернутися до бази даних HITRAN [6,7]. Ця база даних є однією з найавторитетніших у сфері молекулярної спектроскопії та використовується для моделювання взаємодії випромінювання з атмосферними та техногенними газами.

HITRAN (High-Resolution Transmission Molecular Absorption Database) містить високоточні спектроскопічні параметри різних молекул, що застосовуються для аналізу та моделювання оптичних процесів. Інформація в базі зберігається у вигляді текстового файлу, що має табличну структуру, де кожен рядок представляє окрему спектральну лінію, а стовпці містять ключові характеристики цієї лінії.

Завдяки такому структурованому формату користувач може легко отримати необхідну інформацію для подальших досліджень або практичного застосування у спектроскопії. Наприклад, дані HITRAN широко використовуються в розрахунках радіаційного переносу, створенні моделей атмосфери, розробці систем оптичного моніторингу, а також у промислових і наукових дослідженнях газового аналізу.

Окрім того, база HITRAN регулярно оновлюється, доповнюючись новими експериментальними та теоретичними даними, що дозволяє отримувати ще більш точні результати в аналізі спектральних характеристик молекул. Сучасні інструменти для роботи з цією базою включають програмне забезпечення та веб-інтерфейси, що спрощують доступ до даних і їх обробку в наукових і технічних дослідженнях.

Порядковий номер	Хвильове число (ν)	Інтенсивність ліній газу (S)	Спектральна напівширина ліній (σ)
23	2373.455087	2.058E-30	1.936E-04.06800.081
63	2373.470292	1.330E-28	8.434E-04.06440.083
23	2373.473365	1.213E-25	2.141E+02.06010.064
21	2373.477165	7.860E-28	2.583E-05.07730.104
21	2373.484763	5.652E-27	2.066E+02.05860.063
24	2373.507231	2.038E-30	2.030E+02.05680.062
21	2373.524463	2.052E-29	2.062E+02.05610.061
23	2373.529430	1.972E-29	4.759E-04.07280.100
24	2373.556092	1.370E-30	2.030E+02.05660.061
11	2373.572984	9.372E-28	8.353E-01.01980.221
21	2373.576440	5.582E-28	1.921E-05.07940.106
61	2373.587840	1.521E-29	1.938E-07.04700.063
24	2373.629919	1.621E-23	2.068E+02.06580.070
61	2373.630875	6.218E-29	2.105E-05.04500.058
24	2373.636738	1.411E-30	2.030E+02.05660.061
21	2373.661105	3.602E-28	1.352E-05.08150.109
21	2373.665624	1.034E-18	2.132E+02.06810.084
61	2373.671538	3.617E-29	1.225E-05.04500.058
63	2373.681517	2.192E-28	4.449E-02.02240.027

Рис. 6. Фізичні характеристики смуг поглинання компонентів газів

На рис. 7 представлено графічне моделювання фрагмента бази даних HITRAN, що відображає спектральні характеристики поглинання газів та їх взаємодію в заданому діапазоні довжин хвиль.

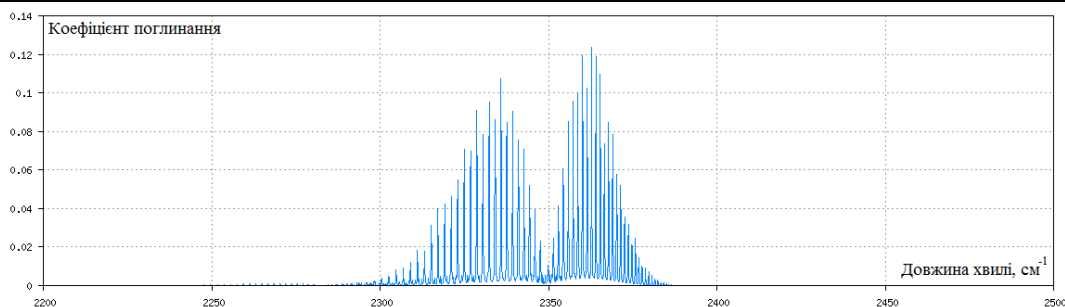


Рис. 7. Моделювання графічного фрагмента бази даних HITRAN

Як показано на рис. 7, спектр поглинання компонентів димового газу в заданому діапазоні має складну структуру через накладання спектрів газів, що в ньому містяться. Тому коефіцієнт поглинання $k(\lambda)k(\lambda)k(\lambda)$ смуги доцільно подати у вигляді суми коефіцієнтів поглинання окремих ліній [4].

$$k(\lambda) = \sum_i \frac{S(\lambda_i)}{\pi} \cdot \frac{\sigma}{\sigma^2 + \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_i}\right)^2}. \quad (6)$$

Кожна спектральна лінія поглинання характеризується такими важливими параметрами: λ_0 – центр смуги поглинання; Інтенсивність S , яка не змінюється з тиском, але залежить від температури; Ширина лінії σ_L , що має певну температурну залежність.

Модель 6 враховує різні значення λ_{0i} та $S(\lambda_i)$ для кожної окремої лінії поглинання, однак встановлюється припущення, що всі значення σ_L є рівними. Спектри коефіцієнтів поглинання для всіх газів задані в спектральному діапазоні $(2,6 \text{ мкм} \pm)$, що дозволяє моделі 6 враховувати вплив домішкових газів.

Для визначення поглинання CO_2 у димових газах використовується наступний алгоритм: Величина поглинання в спектральному інтервалі 4,1–4,3 мкм ($2300\text{--}2400 \text{ см}^{-1}$) розраховується за допомогою аналітичної моделі спектрального розподілу коефіцієнтів поглинання газу [1]. Ця модель базується на таблицях інтенсивності ліній $S(\lambda_0)$ випромінювання газів у зазначеному спектральному діапазоні [3,5] та враховує такі наближення: Спектр коефіцієнта поглинання газу описується сумою розподілів Лоренца з різними значеннями λ_0 та $S(\lambda_0)$, але з однаковими σ_L ; Спектральні коефіцієнти поглинання всіх газів подані в діапазоні $2300\text{--}2400 \text{ см}^{-1}$ (довжини хвиль 4,1–4,3 мкм) з кроком $0,01 \text{ см}^{-1}$. Це забезпечує зручність аналізу газових сумішей і врахування впливу домішкових газів; У розрахунках враховуються лише ті лінії, інтенсивність яких задовольняє умову $S \geq 0,1 [\text{см} \cdot \text{атм}]$ за нормальних умов вимірювання.

Висновки з даного дослідження

і перспективи подальших розвідок у даному напрямі

В ході дослідження визначено, що спектри поглинання основних димових газів мають перекриваючі області, що потребує використання високоточних джерел випромінювання та вузькосмугових фотоприймачів. Проведено вибір інфрачервоних випромінювачів та приймачів на основі аналізу довжин хвиль поглинання, з урахуванням взаємоперетину ліній спектрів.

Розглянуто математичну модель ослаблення випромінювання у середовищі димових газів на основі закону Бугера-Ламберта-Бера. Виведено рівняння, що зв'язує інтенсивність опромінення, що пройшла через газове середовище, з його концентрацією, довжиною шляху поглинання та коефіцієнтом поглинання. Додатково розглянуто вплив тиску та температури на спектральний показник поглинання, зокрема, на ширину спектральної лінії. Досліджено фізичні властивості спектрів поглинання димового газу, використовуючи дані бази HITRAN. Проведено графічне моделювання поглинання в заданому спектральному діапазоні, що дозволило визначити особливості перекривання спектральних смуг. Запропоновано методику розрахунку коефіцієнта поглинання CO_2 у димових газах котельних установок у діапазоні 4,1–4,3 мкм ($2300\text{--}2400 \text{ см}^{-1}$), що базується на сумі розподілів Лоренца для окремих ліній спектру.

Отримані результати можуть бути використані для оптимізації сенсорних систем моніторингу димових газів та вдосконалення методів контролю викидів CO_2 у промислових котельних установках.

Література

1. Дудатєв І. А., Кучерук В. Ю., Кулаков П. І. Засіб контролю концентрації двоокису вуглецю у димових газах котельних установок на основі оптико-абсорбційного методу : монографія. Дніпро : Середняк Т. К., 2021. 120 с.
2. Козубовський В. Р. Оптичні прилади газового аналізу для контролю забруднення атмосферного повітря // Метрологія та прилади. 2010. Вип. 2. С. 62–70.
3. Іщенко В. А., Петрук В. Г. Високочутливі засоби контролю малих концентрацій газів : монографія. Вінниця : ВНТУ, 2010. 138 с.

4. Vasilevskiy O., Dudatiev I., Ovchynnykov K. Tool control the concentration of carbon dioxide in the flue gas boilers based on the optical absorption method // *Informatyka, Automatyka, Pomiary w Gospodarce i Ochronie Środowiska*. 2019. Vol. 9. P. 30–34.
5. Петрук В. Г. Спектрофотометрія світлорозсіювальних середовищ. Вінниця : УНІВЕРСУМ-Вінниця, 2000. 207 с.
6. Безуглий М. О., Синявський І. І., Безугла Н. В., Козловський А. Г. Особливості виготовлення еліпсоїдальних рефlectorів фотометрів // *Вісник НТУУ «КПІ». Серія Приладобудування*. 2016. Вип. 2 (52). С. 76–81.
7. Binding J., Arous J., Liger J., Gigan S., Boccara C., Bourdieu L. Brain refractive index measured in vivo with high-NA-defocus-corrected full-field OCT and consequences for two-photon microscopy // *Optics Express*. 2011. Vol. 6 (19). P. 4833–4847.

References

1. Dudatiev I. A., Kucheruk V. Yu., Kulakov P. I. Zasib kontroliu kontsentratsii dvoookysu vuhletsu u dymovykh hazakh kotelnykh ustanovok na osnovi optyko-absorbtsiynoho metodu : monohrafiia. Dnipro : Seredniak T. K., 2021. 120 s.
2. Kozubovskiy V. R. Optychni prylady hazovoho analizu dlia kontroliu zabrudnennia atmosferoho povitria // *Metrolohiia ta prylady*. 2010. Vyp. 2. S. 62–70.
3. Ishchenko V. A., Petruk V. H. Vysokochutlyvi zasoby kontroliu malykh kontsentratsii haziv : monohrafiia. Vinnytsia : VNTU, 2010. 138 s.
4. Vasilevskiy O., Dudatiev I., Ovchynnykov K. Tool control the concentration of carbon dioxide in the flue gas boilers based on the optical absorption method // *Informatyka, Automatyka, Pomiary w Gospodarce i Ochronie Środowiska*. 2019. Vol. 9. P. 30–34.
5. Petruk V. H. Spektrofotometriia svitlorozsiuvalnykh seredovysch. Vinnytsia : UNIVERSUM-Vinnytsia, 2000. 207 s.
6. Bezuhlyi M. O., Syniavskiy I. I., Bezuhla N. V., Kozlovskiy A. H. Osoblyvosti vyhotovlennia elipsoidalnykh reflektoriv fotometriv // *Visnyk NTUU «KPI». Seriiia Pryladobuduvannia*. 2016. Vyp. 2 (52). S. 76–81.
7. Binding J., Arous J., Liger J., Gigan S., Boccara C., Bourdieu L. Brain refractive index measured in vivo with high-NA-defocus-corrected full-field OCT and consequences for two-photon microscopy // *Optics Express*. 2011. Vol. 6 (19). P. 4833–4847.