

# 低碳化学品火焰红外光谱辐射特性研究

刘礼喜, 陈林, 陈志莉\*, 唐瑾, 彭吴迪, 胡天佑, 王皓文

桂林理工大学环境科学与工程学院, 广西 桂林 541004

**摘要** 低碳化学品火灾事故风险高、危害极大, 探究低碳化学品火焰光谱特性对探测识别该类火灾危害污染意义重大, 但目前国内外对大型低碳化学品火灾事故产生有毒、有害的硫化物(SO<sub>x</sub>)和氮化物(NO<sub>x</sub>)气体等相关研究较少。通过搭建 1.2~12 μm 红外波段火焰光谱测试实验平台, 对二硫化碳、92#汽油和酒精进行 5, 14 和 20 cm 三种不同燃烧尺度火焰光谱测试, 探究火焰燃烧尺度对高温火焰分子辐射光谱的影响。随着燃烧尺度的增大, 火焰辐射强度增强和特征波段出现增宽现象。分析 5 cm 燃烧尺度下四种典型化学品中液化天然气(LNG)、丙烯腈、乙腈和 95#汽油不同的火焰光谱特征。通过用傅里叶变换红外光谱仪测量高温黑体炉的不同温度, 对火焰光谱信号进行辐射定标, 得出准确的辐射定标系数, 从而得到高温火焰分子发射的辐射亮度值。并且与 HITRAN 数据库模拟大气压 1 atm、温度 1 300 K 单一的 SO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> 和 NO<sub>2</sub> 分子辐射光谱进行对比分析。其中高温火焰分子光谱主要有 7.3~7.6, 8.7 和 4.0 μm SO<sub>2</sub> 波段、1.8~2.1 和 6.4 μm H<sub>2</sub>O 波段和 4.2~4.6 μm CO<sub>2</sub> 波段, 以及 2.5~2.9 μm H<sub>2</sub>O 和 CO<sub>2</sub> 共同波段。高温 NO<sub>2</sub> 气体未达到红外光谱仪的检测限, 通过 HITRAN 数据库模拟可知 6.0~6.4, 3.4 和 2.4 μm NO<sub>2</sub> 波段。为了进一步区分各种化学品火焰光谱, 对定标后的火焰光谱信号进行归一化处理, 用 db2 小波基函数进行 6 层分解得到高频部分近似系数和低频部分的细节系数, 通过对比不同化学品高温火焰光谱的近似和细节系数的差异。结果表明, 二硫化碳火焰光谱特征和小波分析的化学品火焰光谱特征, 可作为区分低碳化学品与油料重要依据, 并为后续遥感探测低碳化学品特征污染物、组分浓度反演以及识别评估其污染危害奠定重要基础。

**关键词** 低碳化学品; 红外光谱; 辐射特性; 辐射定标; 小波分析

**中图分类号:** O433.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)01-0062-06

## 引言

低碳化学品是指以温室气体[包括二氧化碳(CO<sub>2</sub>)、甲烷(CH<sub>4</sub>)、氧化亚氮(N<sub>2</sub>O)、氢氟化氮(HFCs)、全氟化氮(PFCs)和六氟化硫(SF<sub>6</sub>)六种气体]为原料生产的各种化学品, 以及生产过程可显著降低温室气体排放的化学品<sup>[1]</sup>。开发利用低碳化学品是国内外低碳经济发展的必然要求, 已成为企业新上化工产品项目优先考虑领域及降低低碳排放的首选措施<sup>[2]</sup>。可燃低碳化学品在生产、运输、装卸、储存和应用过程中极易发生火灾爆炸事故。近年来, 国内外频繁发生低碳化学品火灾事故, 造成重大的经济损失、人员伤亡及生态环境破坏等<sup>[3-4]</sup>。目前国内外学者对高温状态下甲烷、液化天然气(LNG)等烃类燃料及其燃烧产物的光谱特征研究较多。Jeng 等<sup>[5]</sup>对甲烷喷射火焰光谱开展实验室内研究, 指

出火焰光谱主要是 1.87 和 2.7 μm 的 H<sub>2</sub>O 特征波段和 2.7 和 4.3 μm 的 CO<sub>2</sub> 特征波段。近 30 年, 国内外进行了几次大尺度(直径 1.8~35 m) LNG 池火灾实验, 对 LNG 火灾的火灾特性和燃烧产生的热辐射进行分析和模拟<sup>[6-7]</sup>。Raj 等<sup>[8-10]</sup>用火焰光谱数据预测大型 LNG 池火灾热发射过程, 对 LNG 火焰光谱特性进行深入分析, 结果表明火焰光谱主要来源于燃烧产物中的炭黑辐射和 H<sub>2</sub>O、CO<sub>2</sub> 的分子辐射。目前对 CS<sub>2</sub> 等低碳化学品燃烧火焰光谱特性研究较少, 尤其鲜有学者探究燃烧产物组分、火焰辐射、燃烧尺度等综合因素与 CS<sub>2</sub> 火焰光谱特征信息的干扰机制。并且大型 LNG 爆炸含有氮化物和硫化物, 目前国内外鲜有关注大型 LNG 爆炸产生这些污染性气体, 以致对 CS<sub>2</sub> 和 LNG 等低碳化学品火灾污染危害认识不足。

工作中主要以分子中碳含量较低的 CS<sub>2</sub>、LNG、乙腈(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>N)、丙烯腈(C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>N)等低碳化学品为研究对象, 基于

收稿日期: 2020-12-25, 修订日期: 2021-03-16

基金项目: 国家自然科学基金项目(21976043), 桂林理工大学科研启动基金项目(GUTQDJJ20172017075)资助

作者简介: 刘礼喜, 1996 年生, 桂林理工大学环境科学与工程学院硕士研究生 e-mail: 1184832533@qq.com

\* 通讯作者 zhilichen518@foxmail.com

傅里叶变换红外光谱和 HFY-203D 黑体辐射源开展实验室内尺度的 CS<sub>2</sub>、LNG 等火焰光谱测试实验。搭建火焰光谱实验测试平台，测试低碳化学品(CS<sub>2</sub>、LNG、丙烯腈、乙腈)及其油料(92#汽油、95#汽油)和易燃化学品酒精的高温火焰光谱。测试 CS<sub>2</sub>、酒精、92#汽油三种不同燃烧尺度(5, 14 和 20 cm)对火焰光谱特征的影响。通过小波变换对同一燃烧尺度 LNG、95#汽油、乙腈、丙烯腈提取火焰光谱的特征信息，进行低碳化学品与其他燃料火焰特征光谱的差异性分析。为建立遥感监测低碳化学品火灾燃烧特征污染物识别模型和污染危害评估奠定重要基础。

## 1 实验部分

### 1.1 测试平台

采用美国 PerkinElmer 生产的傅里叶变换红外光谱仪 (FT-IR)，光谱范围为 350~8 300 cm<sup>-1</sup>，光谱分辨率选用 4 cm<sup>-1</sup>，扫描次数 16 次，测量视角范围 10~15 mrad，仪器检测器有 DTGS 和 MCT 两种，实验采用高精度的液氮制冷型 MCT 检测器。舍去 350~600 cm<sup>-1</sup> 范围内仪器噪声较大的光谱波段，实验选取的光谱范围为 700~8 000 cm<sup>-1</sup>。通过傅里叶红外光谱仪测量上海福源光电技术有限公司生产型号 HFY-203D 的黑体辐射源不同温度的电信号值进行辐射定标。红外高温辐射源主要技术指标如表 1 所示。根据实际情况搭建室内实验室火焰光谱测试平台如图 1 所示。

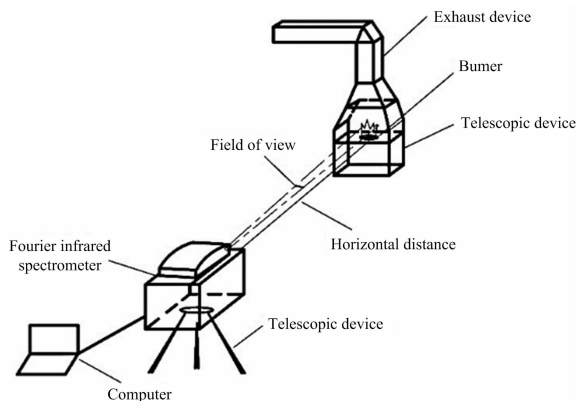


图 1 火焰光谱测试实验平台

Fig. 1 Flame spectrum test experimental platform

表 1 HFY-203D 主要技术指标

Table 1 Main technical indicators of HFY-203D

Model	HFY-203D
Temperature range	500~1 600 °C
Radiating surface	Φ 40 mm
Temperature control method	Intelligent temperature control thermometer
Temperature resolution	1 °C
Temperature accuracy	±0.25%
Temperature stability	±3 °C
Temperature Sensor	Double platinum rhodium thermocouple
Cavity type	Cylindrical cavity

### 1.2 方法

以 CS<sub>2</sub> 和 LNG 为主要研究对象，另外还选取丙烯腈、酒精、乙腈、油料进行火焰光谱测试实验来进行对比分析。测量三种不同燃烧尺度 5 cm(易拉罐 Φ60 mm)、14 cm(油碗 Φ140 mm)、20 cm(不锈钢盆 Φ200 mm)下的火焰光谱，每种燃烧尺度分别加入 30, 80 和 120 mL 液体燃料。

测试平台由 FTIR 光谱仪、伸缩装置、燃烧器、尾气装置、台式电脑构成。实验前，先将 FTIR 仪器置于燃烧器伸缩架前 30 cm，加入液氮，同时将化学品注入容器中，然后记录注射器通入燃烧器中的体积。上下调整伸缩装置，使 FT-IR 光谱仪的检测口对准金属伸缩装置燃烧器火焰中心区域。左右摆动 FTIR 光谱仪下的支架，同时观察仪器能量监控的数值，直到火焰在仪器视域(10~15 mrad)中出现最大值。开启上部的尾气装置，减少风的脉动对实验结果的影响，火焰进入稳定状态，选择 16 次连续光谱扫描，最终得到的光谱数据是对 16 次测量结果的平均值。为了获得准确的火焰光谱，避免地物反射太阳光传入的光谱，实验在晚间开展，气压 1 atm，实验室内温度为(26±2)°C。

### 1.3 辐射定标

理想的光谱辐射计是一种线性响应仪器，光谱通道的测量信号与探测器接收到的辐射光谱功率成正比，实际上探测器接收到的辐射功率由被测地物和光谱仪本身的热发射两部分组成<sup>[11]</sup>。利用高温黑体炉的温度和普朗克定律计算出不同温度下黑体的辐射亮度  $L$ ，结合光谱仪的测量值  $M$ <sup>[12]</sup>。FTIR 光谱仪的响应呈线性，见式(1)

$$M = GL + O \quad (1)$$

式(1)中， $G$  是增益系数， $O$  是补偿系数。式(1)中至少需要两个标准测量值才能求解这两个辐射定标系数。实验中将黑体炉加热到多组不同的温度来进行线性多点辐射定标的计算。

$$L_1 = \frac{M_1 - O}{G} \quad (2)$$

$$L_2 = \frac{M_2 - O}{G} \quad (3)$$

$$L_n = \frac{M_n - O}{G} \quad (4)$$

根据式(2)~式(4)构成系统的线性方程，利用最小二乘法拟合的方式得到更加精确的定标系数  $G$  和  $O$ ，见式(5)~式(7)。

$$G = \frac{\sum_{i=1}^n (L_i - \bar{L})(M_i - \bar{M})}{\sum_{i=1}^n (L_i - \bar{L})^2} \quad (5)$$

$$O = \bar{M} - G\bar{L} \quad (6)$$

式(5)和式(6)中，平均值  $\bar{L}$  和  $\bar{M}$  如式(7)和式(8)

$$\bar{L} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n L_i \quad (7)$$

$$\bar{M} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n M_i \quad (8)$$

FTIR 光谱仪确定辐射定标的系数时，选取黑体的多组温度要包含实际火焰发射源的温度，计算出来的辐射定标系数才准确。根据确定好的辐射系数，仪器就能产生校准过的

测量值,从而得到目标真实的辐射亮度值( $L'$ )。计算过程如式(9)

$$L' = \frac{M-O}{G} \quad (9)$$

#### 1.4 小波分析

小波分析可以快速、高效地识别光谱特征信息,是光谱研究领域的重要分析工具。小波分解可以把信号分解成两部分,一部分包含信号基本特征的低频组分,另一部分包含细节特征的高频组分<sup>[13]</sup>。

在较短的一段区间内,波函数的振幅非零且振荡,满足这两个条件的波函数称为小波,小波函数式见式(10)

$$\Psi_{a,b}(x) = |a|^{-\frac{1}{2}} \Psi\left(\frac{x-b}{a}\right) \quad (10)$$

式(10)中, $a$ 为缩放因子, $b$ 为平移因子。 $f(x)$ 为原始信号。

对  $f(x)$  进行小波变换式见式(11)

$$W_{a,b,f} = W_f(a,b) = \langle f, \Psi_{a,b} \rangle \\ = |a|^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\Psi\left(\frac{x-b}{a}\right)} f(x) dx \quad (11)$$

实验采用离散小波变换对低碳化学品和油料定标后的火焰光谱进行处理,以 db2 作为小波基函数,使用 matlab2017 和 python 软件进行数据处理,对各化学品和油料进行离散小波变换<sup>[14]</sup>。把原始光谱数据经 6 层小波分解后得到高频分量的近似系数和低频分量的细节系数。

## 2 结果与讨论

### 2.1 不同燃烧尺度低碳化学品和油料火焰光谱特征分析

图 2(a, b, c) 所示,通过对比分析  $\text{CS}_2$ 、酒精、92# 汽油在不同燃烧尺度下的火焰光谱, $\text{CS}_2$ 、酒精等不发烟,火焰燃烧的部分特征波段基本一致,其中 4.0, 8.7 和 7.3~7.6  $\mu\text{m}$  为  $\text{SO}_2$  分子波段、1.8~2.1 和 6.4  $\mu\text{m}$  为  $\text{H}_2\text{O}$  分子波段、2.5~2.9  $\mu\text{m}$  为  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$  分子共同波段、4.2~4.6  $\mu\text{m}$  为  $\text{CO}_2$  分子波段。 $\text{CS}_2$  分子式燃烧产物没有  $\text{H}_2\text{O}$ ,但存在  $\text{H}_2\text{O}$  的发射峰。这是由于  $\text{CS}_2$  燃烧时,在卷吸空气的同时将水蒸气也卷吸进入火焰中,并且  $\text{H}_2\text{O}$  的特征峰发射特别强,所以即使没有水蒸气生成也会发出  $\text{H}_2\text{O}$  的特征辐射。

对于发烟火焰燃烧的 92# 汽油,随着燃烧尺度的增加,产生的炭黑的比例也越高,火焰光谱中大部分分子辐射特征(1.8~2.1  $\mu\text{m}$  波段  $\text{H}_2\text{O}$  分子、2.5~2.9  $\mu\text{m}$   $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$  分子共同波段)被炭黑辐射遮盖,但 4.2~4.6  $\mu\text{m}$  波段的  $\text{CO}_2$  分子辐射仍然较为明显。因此,对于外场实验燃烧尺度更大、发烟量更大的火灾,很难检测到火焰中气态燃烧产物的光谱特征。

火焰辐射强度和特征波段宽度随着燃烧尺度的增加而增大,还会出现一些小尺度不太明显的光谱特征,并且燃烧尺度对火焰光谱的辐射亮度值影响也较大,可能存在相关指数关系。

### 2.2 同一燃烧尺度火焰特征光谱与 HITRAN 数据库模拟单一分子光谱对比

LNG、油料的主要成分为碳氢化合物。LNG、酒精和乙腈、丙烯腈燃烧非常充分,没有烟气生成。 $\text{CS}_2$  的燃烧发出苍

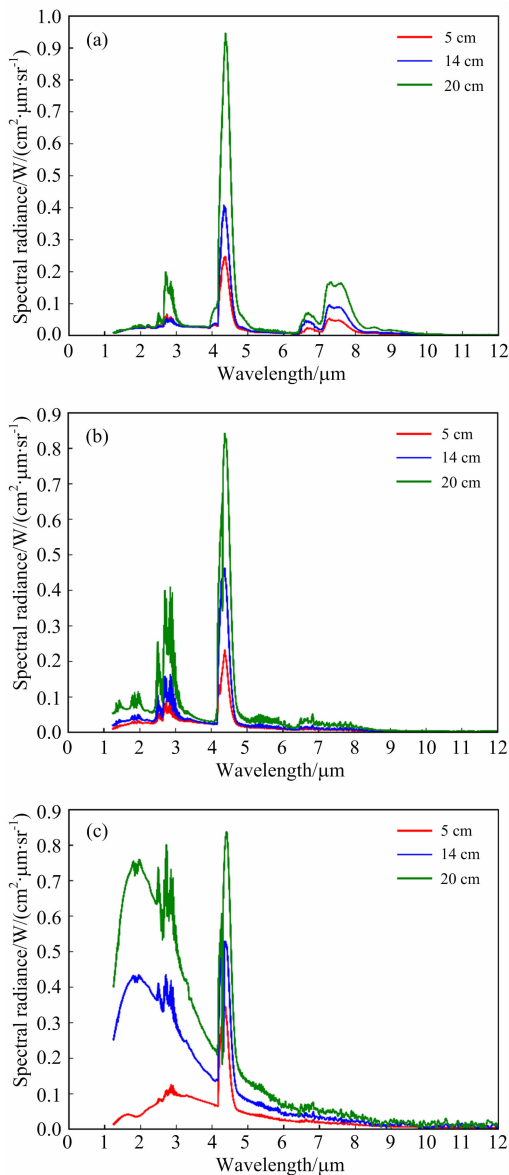


图 2 三种燃烧尺度二硫化碳(a)、酒精(b)、92# 汽油(c)火焰光谱图

Fig. 2 Flame spectra of carbon disulfide (a), alcohol (b), 92# gasoline (c) in three combustion standards

白色的火焰,不发烟,并伴随着强烈刺激性气味。95# 汽油燃烧比较稳定,产生橙黄色明亮的火焰,同时伴随着大量黑烟的产生。图 3(a)和图 2(b)所示,LNG 和酒精火焰光谱基本类似。因为其火焰光谱主要是高温  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  分子生成,并且其燃烧生成  $\text{CO}_2$  和  $\text{H}_2\text{O}$  的比例相似,所以产物的分子辐射接近。

乙腈和丙烯腈的火焰光谱如图 3(a)所示,其光谱特征和酒精类似,根据  $\text{NO}_x$  气体检测器可知,燃烧过程中产生少量的  $\text{NO}_x$  气体。从图 3(b)中基于 HITRAN 数据库<sup>[16]</sup>模拟大气压 1 atm、温度 1 300 K 的  $\text{NO}_2$  分子辐射光谱, $\text{NO}_2$  的特征波段有 6.0~6.4, 3.4 和 2.4  $\mu\text{m}$ 。图 3(a)中并没有出现,推测可能是由于生成的  $\text{NO}_x$  气体太少,没有达到傅里叶红

外光谱仪的检测限。

95# 汽油燃烧火焰光谱图中可看出, 油料燃烧产物主要有高温  $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CO}_2$  分子, 还有较多的  $\text{C}-\text{H}^*$  自由基, 特征波段在  $3.11\sim 3.68\ \mu\text{m}$ 。并且在  $2.7$  和  $4.3\ \mu\text{m}$  波段还有一定的大气吸收, 表明石油烃类物质燃烧生成大量  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$ , 一方面发出大量热辐射, 但随后会扩散到火焰之外的区域, 与周边空气混合冷却后会对火焰光谱存在很强大的吸收作用。 $1.7\sim 2.5\ \mu\text{m}$  波段中占主导地位的炭黑辐射强度很大, 基本掩盖了高温分子辐射。根据维恩位移定律结合炭黑辐射的峰值波段  $2.2\ \mu\text{m}$ , 估算出其温度为  $1\ 317.2\ \text{K}$ , 与实验过程中与热电偶测量的温度基本一致。

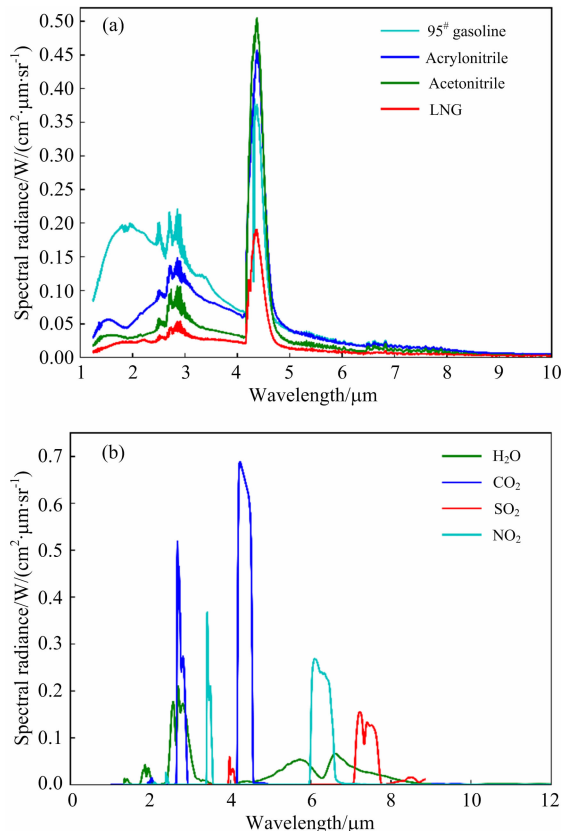


图 3 化学品火焰光谱与 HITRAN 数据库模拟单一分子光谱对比

(a): 化学品和油料火焰光谱图;

(b): HITRAN 数据库模拟单一分子光谱

Fig. 3 Comparison of chemical flame spectrum and HITRAN database simulation single molecule spectrum

(a): Flame spectra of chemicals and oils;

(b): HITRAN database simulates single molecular spectra

### 2.3 低碳化学品和油料火焰光谱小波变换特征分析

图 2(a) 所示,  $\text{CS}_2$  在  $7.35\ \mu\text{m}$  具有明显的光谱信号特征, 因此不用通过小波变换分析, 乙腈、丙烯腈、LNG、95# 汽油火焰光谱在  $8\ \mu\text{m}$  后无明显特征, 所以在  $1.25\sim 8.0\ \mu\text{m}$  波段范围内对火焰光谱进行小波变换分析, 得到图 4(a) 和 (b) 的近似系数和细节系数。

图 4(a) 所示, LNG、乙腈、丙烯腈、油料火焰光谱近似

系数特征波段大部分相似, 在  $2.7$  和  $4.3\ \mu\text{m}$  存在  $\text{CO}_2$  发射峰,  $2.78\ \mu\text{m}$  存在  $\text{CO}_2$  和  $\text{H}_2\text{O}$  共同发射峰,  $3.58\ \mu\text{m}$  存在  $\text{C}-\text{H}^*$  自由基发射峰,  $3.8\sim 4.1\ \mu\text{m}$  波段存在部分  $\text{CO}_2$  吸收峰。95# 汽油火焰光谱在  $1.7\sim 2.3\ \mu\text{m}$  波段与其他化学品有明显区别, 因为油料火焰燃烧产生大量炭黑主要集中在此波段, 其他化学品基本是一条直线, 并且随着油料火焰尺度的增大, 基本掩盖其他分子在此波段的光谱特征。图 4(b) 所示, 除了 95# 汽油, 乙腈、丙烯腈与 LNG、火焰光谱细节系数基本没有明显区别。

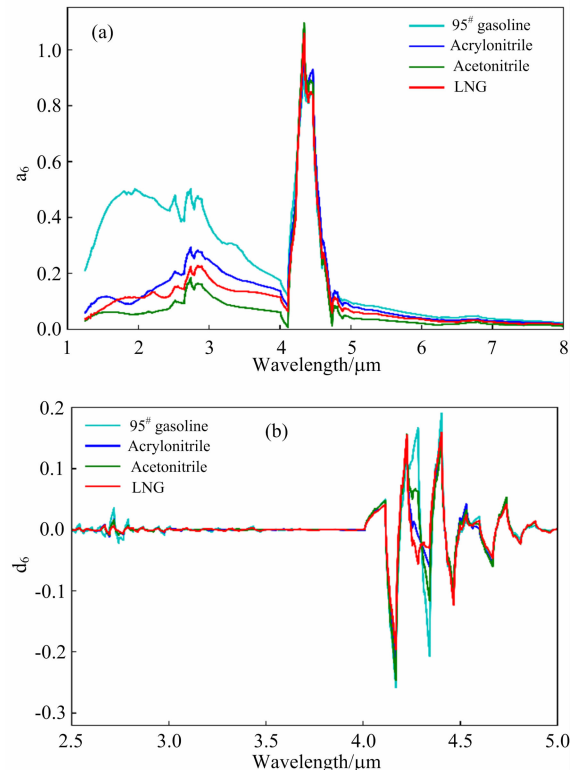


图 4 同一燃烧尺度化学品、油料 db2 小波 6 层近似系数 (a)、细节系数 (b)

Fig. 4 The db2 wavelet 6-layer approximation coefficients (a) and detail coefficients (b) of the same combustion scale chemicals and oil

## 3 结 论

通过搭建傅里叶红外光谱火焰光谱测试平台, 在  $1.2\sim 12\ \mu\text{m}$  红外波段范围内进行低碳化学品以及油料和其他可燃化学品火焰光谱实验测试分析, 对各化学品和油料的火焰光谱的信号利用高温黑体炉进行辐射定标, 得到各化学品和油料真实的辐射亮度值, 并且对比分析低碳化学品和油料三种不同燃烧尺度的火焰光谱特征。对同一燃烧尺度下低碳化学品及其油料和其他可燃化学品的火焰光谱信号进行小波变换特征提取分析, 可以明显区分低碳化学品与油料火焰光谱。为外场空间条件下探测低碳化学品火焰辐射光谱特征来判别燃烧产物的组分结构和后续低碳化学品特征污染物识别、组分浓度反演以其污染危害评估奠定基础。

(1) 低碳化学品及其油料和其他可燃化学品的火焰光谱主要来源于高温燃烧产物( $H_2O$ ,  $CO_2$ ,  $SO_2$  和  $NO_x$ ) 的分子辐射以及烟气中的炭黑辐射。燃烧产物的分子辐射仅在分子的特征波段发出不连续的辐射光谱, 高温炭黑在全光谱波段发出近似黑体辐射的光谱。

(2) 对  $CS_2$ 、酒精、92# 汽油分别进行 5, 14 和 20 cm 三种燃烧尺度的火焰光谱测试, 研究得出分子辐射特征波段的

强度和宽度随着燃烧尺度的增加而不断增大, 并且辐射亮度与燃烧尺度之间存在相关指数关系。

(3) 低碳化学品、油料和其他可燃化学品的火焰光谱信号通过 db2 小波基分解, 得到 4 种不同的近似系数和细节系数, 研究发现 6 层分解后的近似系数和细节系数可以找到化学品和油料的特征波段, 并且可以区分小尺度低碳化学品与油料的火焰光谱。

## References

- [ 1 ] ZHENG Ling-ling(郑凌玲). Henan Science and Technology(河南科技), 2015, 569(15): 139.
- [ 2 ] CHEN Jun, GU Juan-hong, XUE Liang, et al(陈 军, 顾娟红, 薛 良, 等). Economic Research Guide(经济研究导刊), 2010, 12: 178.
- [ 3 ] YANG Ke, WANG Zhuang, HE Lei, et al(杨 克, 王 壮, 贺 雷, 等). Industrial Safety and Environmental Protection(工业安全与环保), 2019, 45(11): 31.
- [ 4 ] HUANG Sha, HE Qiong(黄 莎, 何 琼). Hunan Safety and Disaster Prevention(湖南安全与防灾), 2017, (7): 44.
- [ 5 ] Jeng S M, Lai M C, Faeth G M. Combustion Science & Technology, 1984, 40(1-4): 41.
- [ 6 ] Til B, Rouzbeh A, Vikram G, et al. Fire Safety Journal, 2017, 92(9): 42.
- [ 7 ] DANG Wen-yi(党文义). Fire Science & Technology(消防科学与技术), 2017, 36(5): 606.
- [ 8 ] Raj P K. Journal of Hazardous Materials, 2007, 140(1): 280.
- [ 9 ] Raj P K. Journal of Hazardous Materials, 2017, 142(3): 720.
- [10] Raj P K, Lemoff T. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2009, 22(6): 820.
- [11] NING Jia-lian, TANG Jin, HU Tian-you, et al(宁甲练, 唐 瑾, 胡天佑, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2020, 40(5): 1377.
- [12] FENG Ming-chun, XU Liang, GAO Min-guang, et al(冯明春, 徐 亮, 高闽光, 等). Infrared Technology(红外技术), 2012, 36(2): 366.
- [13] LI Qing-zhong, LIU Qing(李庆忠, 刘 清). Chinese Journal of Laser(中国激光), 2015, 42(2): 272.
- [14] LIU Hong-tao, CHEN Zhi-li, LIU Qiang, et al(刘洪涛, 陈志莉, 刘 强, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2016, 36(1): 312.
- [15] Gordon I E, Rothman L S, Hill C, et al. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 2017, 130(11): 4.

# Research on the Radiation Characteristics of Low-Carbon Chemical Flame Infrared Spectrum

LIU Li-xi, CHEN Lin, CHEN Zhi-li\*, TANG Jin, PENG Wu-di, HU Tian-you, WANG Hao-wen

Environmental Science and Engineering, College of Guilin University of Technology, Guilin 541004, China

**Abstract** Low-carbon chemical fire accidents have a high risk and great harm. Exploring the flame spectrum characteristics of low-carbon chemicals is of great significance in detecting and identifying such fire hazards and pollution. However, domestic and foreign large-scale low-carbon chemical fire accidents produce toxic and harmful sulfur Research on  $\text{SO}_x$  and  $\text{NO}_x$  gases is rare. In this paper, by building an experimental platform for flame spectrum testing in the  $1.2\sim 12\ \mu\text{m}$  infrared band, the flame spectrum test of carbon disulfide, 92# gasoline and alcohol at three different combustion scales of 5, 14 and 20 cm is carried out to explore the effect of flame combustion scale on high-temperature flame molecular radiation The influence of the spectrum. As the combustion scale increases, the flame radiation intensity increases, and the characteristic waveband appears to broaden. Analyze the different flame spectrum characteristics of liquefied natural gas (LNG), acrylonitrile, acetonitrile and 95# gasoline in the four typical chemicals at the 5 cm combustion scale. Using Fourier transform infrared spectrometer to measure the different temperatures of the high-temperature blackbody furnace, the flame spectrum signal is radiated calibration, and the accurate radiant calibration coefficient is obtained, thereby obtaining the radiance value emitted by the high-temperature flame molecules. Moreover, compared with the HITRAN database simulated atmospheric pressure 1 atm, temperature 1 300 K single  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NO}_2$  molecular radiation spectrum for comparative analysis. Among them, the high temperature flame molecular spectrum mainly has  $7.3\sim 7.6$ ,  $8.7$  and  $4.0\ \mu\text{m}$   $\text{SO}_2$  bands,  $1.8\sim 2.1$  and  $6.4\ \mu\text{m}$   $\text{H}_2\text{O}$  bands,  $4.2\sim 4.6\ \mu\text{m}$   $\text{CO}_2$  bands, and  $2.5\sim 2.9\ \mu\text{m}$   $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{CO}_2$  common bands. The high temperature  $\text{NO}_2$  gas did not reach the detection limit of the infrared spectrometer, and the  $6.0\sim 6.4$ ,  $3.4$  and  $2.4\ \mu\text{m}$   $\text{NO}_2$  bands can be known through the HITRAN database simulation. In order to further distinguish the flame spectra of various chemicals, the calibrated flame spectrum signal is normalized, and the db2 wavelet basis function is used for 6-layer decomposition to obtain the approximate coefficients of the high frequency part and the detail coefficients of the low-frequency part, by comparing different chemistry, the approximation and detail coefficient difference of the high-temperature flame spectrum. The results show that the flame spectrum characteristics of carbon disulfide and the chemical flame spectrum characteristics of wavelet analysis can be used as an important basis for distinguishing low-carbon chemicals from oils and for subsequent remote sensing detection of low-carbon chemical characteristic pollutants, component concentration inversion and identification evaluation Its pollution hazards lay an important foundation.

**Keywords** Low-carbon chemicals; Infrared spectrum; Radiation characteristics; Radiometric calibration; Wavelet analysis

(Received Dec. 25, 2020; accepted Mar. 16, 2021)

\* Corresponding author