

# CS<sub>2</sub> 燃烧火焰光谱辐射模型的构建与特征 污染产物浓度反演研究

彭吴迪<sup>1</sup>, 宁甲练<sup>2</sup>, 陈志莉<sup>1\*</sup>, 唐瑾<sup>1</sup>, 刘礼喜<sup>1</sup>, 陈林<sup>1</sup>

1. 桂林理工大学环境科学与工程学院, 广西 桂林 541006

2. 生态环境部华南环境科学研究院, 广东 广州 510000

**摘要** CS<sub>2</sub> 在当今化工等领域占据了重要地位, 而 CS<sub>2</sub> 火灾污染事故危害性极大。通过研究 CS<sub>2</sub> 燃烧火焰光谱辐射以探究其火灾污染特性极为必要。搭建了 CS<sub>2</sub> 燃烧火焰光谱测试平台, 采用黑体辐射源对 VSR 仪器进行了标定, 通过多用途傅里叶变换(VSR)红外光谱辐射仪测试了 5, 10 和 20 cm 三种燃烧尺度下 CS<sub>2</sub> 燃烧的火焰光谱, 并通过热电偶测试了整个燃烧时间段内不同燃烧时刻下的火焰温度, 以及在火焰上方安装了烟气分析仪对火焰中的燃烧产物浓度进行监测。测量了 CS<sub>2</sub> 整个燃烧时间段内火焰温度, 以及不同燃烧时间、不同燃烧尺度下的火焰光谱、燃烧产物组分信息。测试结果表明, CS<sub>2</sub> 火焰中主要含有高温 SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO 气体和空气中卷入的 H<sub>2</sub>O 分子, 并获取了特征污染产物 SO<sub>2</sub> 的浓度。由于现有光谱仪测量分辨率有限, 室内实验测量的火焰尺度有限, 为了能实现火灾在线监测需要建立一个火焰光谱辐射模型来反演 CS<sub>2</sub> 火灾时的污染物浓度相关信息。基于 HITRAN 数据库可知在 2.7 μm 附近为高温水蒸气的发射峰, 4.2 μm 附近特征峰为高温 CO<sub>2</sub> 气体的发射峰, 4.7 μm 附近有 CO 微弱的发射峰, 在 7.4 μm 附近特征峰为高温 SO<sub>2</sub> 气体的发射峰, 并获得了 CS<sub>2</sub> 燃烧时产生的 SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO 和 H<sub>2</sub>O 气体在火焰燃烧相同温度下的吸收系数, 通过计算得到了 CS<sub>2</sub> 燃烧时产生的 SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO 和 H<sub>2</sub>O 混合气体的透过率与发射率, 并结合气体辐射传输方程、气体吸收系数等方程, 创建了 CS<sub>2</sub> 燃烧的火焰光谱辐射模型。利用该光谱辐射模型反演了不同燃烧时间下特征污染产物 SO<sub>2</sub> 的浓度, 并与实验测得的数据进行了对比分析。结果表明, 该模型精度高, 可用于燃烧产物浓度的定量化反演, SO<sub>2</sub> 分子含量在燃烧时间 20, 40, 60 和 80 s 时的反演精度分别是 89.5%, 82.5%, 85.6% 和 86.5%。为遥感反演 CS<sub>2</sub> 型大尺度火灾中燃烧产物的浓度奠定基础。

**关键词** 二硫化碳; 火焰光谱; 光谱辐射模型; 气体浓度定量反演

**中图分类号:** O433 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)03-0672-06

## 引言

CS<sub>2</sub> 为一种无色透明剧毒的液体<sup>[1]</sup>, 其在化工等领域占据重要地位, 现广泛应用于粘胶纤维、溶剂等产品制造<sup>[2-3]</sup>。据报道, 2018 年全球 CS<sub>2</sub> 年生产量超过一百万吨<sup>[4]</sup>。因 CS<sub>2</sub> 具有极强的挥发性、易燃和易爆性等特点, 在运输、装卸、生产等过程中易发生燃烧爆炸事故。CS<sub>2</sub> 燃烧会产生大量热辐射和 SO<sub>2</sub> 污染气体等。其中 SO<sub>2</sub> 是刺激性的有毒气体, 同时在空气中遇到水分子会形成对地表环境有腐蚀危害性的酸雨。有必要深入研究 CS<sub>2</sub> 火灾产生特征污染气体 SO<sub>2</sub> 等污染

特性。

火焰光谱辐射特性是探究火灾污染的重要途径, 因为可通过分析火焰辐射光谱特性获取火灾污染气体组分、温度及不同波段的热辐射分布等重要信息。学者们对碳氢燃料火焰光谱辐射已开展了大量研究工作, 取得了一些研究成果。

Raj 等<sup>[5]</sup>研究了液化天然气(LNG)火焰辐射光谱, 建立了 LNG 火焰光谱数据库以及热辐射模型, 并分析了热辐射对人体的危害。Yilmaz<sup>[6]</sup>搭建了火焰光谱测试平台, 开展了 30 cm 尺度下甲醇火焰光谱系列测试, 研究了甲醇火焰辐射特性, 并利用火焰光谱获取了火焰中 CH<sub>3</sub>OH, CO 和 CO<sub>2</sub> 组分含量。有研究借助燃烧诊断技术分析了火焰中燃烧组分

收稿日期: 2021-03-04, 修订日期: 2021-05-07

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: 彭吴迪, 1998 年生, 桂林理工大学环境科学与工程学院硕士研究生 e-mail: 1981552937@qq.com

\* 通讯作者 e-mail: zhilichen518@foxmail.com

及组分浓度分布, Hsu 等<sup>[7-8]</sup>开展了预混火焰中组分浓度测量, 获取了混层流火焰中燃烧中间产物(CH, OH 和 C<sub>2</sub>)的组分浓度分布。也有研究基于实验数据, 创建了火焰光谱及热辐射模型。Liu 等<sup>[9]</sup>基于系列大尺度 LNG 火焰测试实验, 建立了一个 LNG 火焰模型, 该模型可较好地预测火焰热辐射强度。刘强<sup>[10]</sup>基于 HITRAN 数据库(国际普遍公认的权威气体分子光谱数据库), 结合辐射方程、气体及炭黑吸收系数方程建立了碳氢燃料池火光谱模型, 并利用多组内外场实验数据进行验证, 结果表明模型可准确模拟 LNG、甲烷等碳氢燃料火焰光谱。

学者们对碳氢燃料火焰光谱进行了系列研究, 研究表明碳氢燃料火焰辐射光谱来自于气体分子辐射和炭黑辐射, 其中研究较多的是热辐射、共性产物 CO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O, 以及炭黑污染物等。对于含硫的化学品火焰, Zeng<sup>[11]</sup>对 CS<sub>2</sub> 的燃烧过程和燃烧产物浓度进行了详细研究, 将实际结果与反应动力学模型进行了对比。宁甲练等<sup>[12]</sup>对 CS<sub>2</sub> 燃烧的火焰光谱进行了研究, 比较了 CS<sub>2</sub> 火焰光谱与其他化学品火焰光谱的区别, Karlovets<sup>[13]</sup>对 CS<sub>2</sub> 燃烧的火焰光谱参数进行了研究, 建立了 CS<sub>2</sub> 火焰的光谱信息数据库, 目前国内外少有研究者对 CS<sub>2</sub> 燃烧火焰光谱辐射进行深入研究分析。本工作前期研究了油料火焰光谱特性, 创建了碳氢燃料火焰光谱辐射特征模型。该模型可准确模拟柴油、LNG 等碳氢燃料火焰光谱, 模型模拟精度较高, 具有实用性。但研究中未对含硫燃料火焰光谱进行研究。实验中发现, 含硫燃料火焰光谱辐射特性与碳氢燃料火焰光谱辐射特性不同, 含硫燃料 CS<sub>2</sub> 的火焰光谱辐射主要来自于高温分子辐射, 没有炭黑辐射。因此, 碳氢燃料光谱辐射模型不能直接用于 CS<sub>2</sub> 火焰光谱模拟研究。在前期构建的碳氢燃料火焰光谱辐射模型基础上, 对模型进行改进, 构建出基于 HITRAN 数据库的 CS<sub>2</sub> 火焰辐射光谱模型, 能模拟高分辨率条件下的大型池火的火焰光谱, 提取火焰污染产物光谱特征, 并进行燃烧火焰特征污染物 SO<sub>2</sub> 浓度的反演研究, 为遥感监测地面硫化物火灾定量反演污染物浓度做准备。

## 1 实验部分

### 1.1 仪器及参数

为系统研究 CS<sub>2</sub> 火焰光谱特性, 搭建了如图 1 所示的火焰光谱测试平台。该平台由挡风板、燃烧器、VSR 光谱辐射计、温度测量仪、烟气分析系统、采集数据专业笔记本电脑等组成。其中挡风板由 3 块 2 mm 厚的透明塑料板组成, 挡风板放置于燃烧器周围以防止风对实验的干扰。VSR 光谱辐射计置于燃烧器前, 可根据测量需求, 调整其与燃烧器的距离。

实验中使用的 CS<sub>2</sub> 购置于上海阿拉丁生化科技股份有限公司, 其 (ACS) 分析纯  $\geq 99.9\%$ 。红外光谱仪为加拿大 LR tech 公司生产的 Versatile SpectroRadiometer 光谱仪, 简称 VSR 红外光谱辐射仪。该仪器光谱范围为 660~10 000 cm<sup>-1</sup>; 光谱分辨率为 8 种选择, 最优为 1 cm<sup>-1</sup>, 最小为 128 cm<sup>-1</sup>; 视场镜头有三种为窄、中、宽视场镜头; 探测器制冷

方式采用电制冷。本研究目的是为了空天遥感监测突发 CS<sub>2</sub> 火灾污染奠定基础, 由于目前卫星探测器的光谱分辨率较低, 本次实验选用较低的光谱分辨率 8 cm<sup>-1</sup>, 选用中视场镜头(25 mrad)。使用德国 testoT350 烟气分析仪, 可同时测量 SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> 和 CO 等气体。

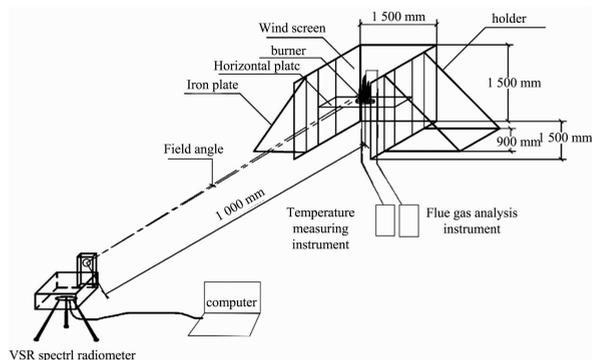


图 1 火焰光谱测试平台

Fig. 1 Flame spectrum test platform

### 1.2 方法

实验时将 VSR 红外光谱仪置于燃烧器前 1 m 处, 调整仪器高度将仪器视场镜头与燃烧器水平对齐。测量前先将仪器预热 30 min, 待仪器稳定后, 将 CS<sub>2</sub> 倒入燃烧器中, 用火钳夹住引燃物点火。将温度传感器同时放入火焰外焰的不同位置处, 待火焰进入稳定阶段后, 进行实验测量。

#### 1.2.1 火焰辐射光谱测量

待火焰稳定后, 将 VSR 红外光谱仪镜头中心对准火焰中心进行测量。为了保证测量数据的准确性, 每次采集 30 次, 然后取平均值。在测量不同燃烧时间火焰光谱数据时, 每次测量间隔时间 10 s。为了准确获得火焰光谱, 实验均在晚间进行, 气压为标准大气压, 环境温度约为 305 K。同时, 利用黑体源对实验光谱数据定标。

#### 1.2.2 火焰燃烧温度测量

火焰结构分为焰心、内焰和外焰。火焰温度由焰心向外焰逐渐升高, 而外焰温度要远远高于焰心、内焰温度。在研究火焰对周围散发的热量时, 可认为热量来自于火焰外焰。由于火焰脉动的存在, 火焰外焰处各点的温度差异较大, 因此难以准确测量火焰温度。本实验同时测量了不同位置处外焰温度, 并连续测量 10 次, 取平均值。

#### 1.2.3 火焰中燃烧产物组分测量

将烟气导管口置于火焰中心收集燃烧后气体产物。燃烧后气体产物进入导管中, 经过冷却模块冷却后, 由空气泵输送到烟气分析仪。烟气分析仪对燃烧气体组分含量进行测量, 主要测量了 5 cm 尺度下不同燃烧时间的 CS<sub>2</sub> 火焰燃烧产物组分, 每次测量间隔为 10 s。

### 1.3 CS<sub>2</sub> 火焰光谱特性

图 2 为定标后 5 cm 尺度下燃烧 20 s 时的 CS<sub>2</sub> 火焰光谱。查阅 HITRAN 数据库可知<sup>[15]</sup>, 2.5 和 2.7 μm 处特征峰为 H<sub>2</sub>O 分子发射峰; 2.7 和 4.3 μm 处特征峰为 CO<sub>2</sub> 分子发射峰; 4.05, 7.4 和 8.51 μm 处特征峰为 SO<sub>2</sub> 的发射峰。在 5~14 μm 有一定的灰体辐射, 中心波长大约为 9.5 μm, 由维恩

位移定律可知灰体辐射温度为 305 K。又由于  $5\ \mu\text{m}$  之前未有灰体辐射, 燃烧过程中也未见炭黑产生, 因此可推测为燃烧器发出的热辐射。需要注意的是,  $\text{CS}_2$  分子中无 H 元素, 因此燃烧不会产生  $\text{H}_2\text{O}$  分子。而由  $\text{CS}_2$  燃烧火焰光谱图可知, 火焰中有  $\text{H}_2\text{O}$  分子, 且其辐射还较大, 可推测为在  $\text{CS}_2$  燃烧时, 其火焰能够卷吸空气中的水分子<sup>[12]</sup>。虽然在烟气分析中检测到火焰中含有 CO 气体, 而在火焰光谱中却没有检测到 CO 的特征。分析认为燃烧产物中 CO 含量较少, 与产物中  $\text{CO}_2$  相比微乎其微, 会被其遮盖, 导致探测不到 CO 的光谱。

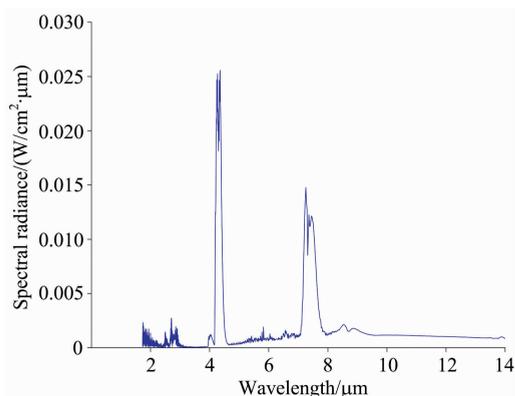


图 2  $\text{CS}_2$  燃烧 20 s 后的火焰光谱

Fig. 2  $\text{CS}_2$  flame spectrum after burning for 20 s

#### 1.4 火焰的燃烧信息

##### 1.4.1 火焰温度测量结果

火焰温度测量可为后续模拟研究提供温度参数。实验测量了 5 cm 尺度下  $\text{CS}_2$  火焰的温度。在火焰温度测量中发现, 由于火焰处于脉动状态, 火焰外焰各点的温度不断变化难以获取准确数值, 因此只能测出温度区间为 800~1 300 K, 如图 3 所示。从图 3 可知, 火焰温度整体趋势是先上升后下降, 这与火焰燃烧阶段有关。火焰燃烧阶段分为起火发展阶段、稳定燃烧阶段及衰减熄灭阶段。起初燃料燃烧量少, 释放热量也较少, 因此火焰温度较低。随后燃料燃烧逐渐增大, 火焰温度也随之升高。最后燃料不足, 燃料燃烧量减少, 温度也随之降低。

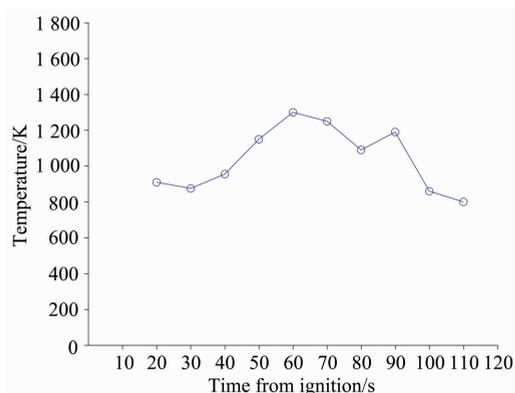


图 3  $\text{CS}_2$  火焰温度在 5 cm 尺度下的变化

Fig. 3 Variation of  $\text{CS}_2$  flame temperature at 5 cm scale

##### 1.4.2 火焰中燃烧产物组分测量结果

利用烟气分析仪对燃烧产物组分进行了测量, 表明火焰中有  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CO}_2$  和 CO 气体分子。图 4 为  $\text{SO}_2$  分子的浓度分布图, 可知  $\text{SO}_2$  分子含量随着燃烧时间整体变化趋势为先增加后减少, 与火焰燃烧阶段有关, 在起火发展阶段, 燃料燃烧量少, 燃烧产物含量也较少。随后在稳定燃烧阶段中, 燃料燃烧量逐渐增大, 燃烧产物含量也随之增大。最后在衰减熄灭阶段中, 燃料不足, 燃料燃烧量减少, 燃烧产物含量也随之降低。另外, 由图 4 可知, 在燃烧时间 40 和 100 s 时存在两个异常点。推测为在获取燃烧气体时, 存在较大的火焰脉动, 导致收集的燃烧气体量存在误差。

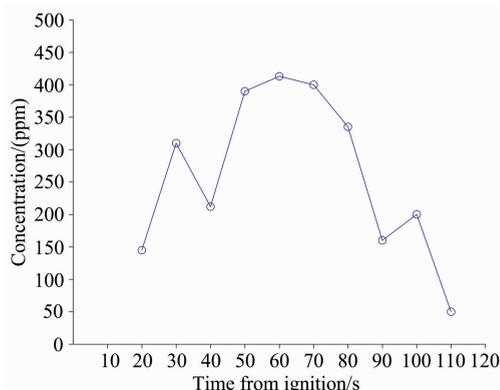


图 4 在 5 cm 尺度下  $\text{SO}_2$  浓度变化

Fig. 4 The  $\text{SO}_2$  molecular concentration at 5 cm scale

##### 1.4.3 不同燃烧时间下的火焰光谱

图 5 为  $\text{CS}_2$  火焰中  $\text{SO}_2$  分子在  $7.4\ \mu\text{m}$  处辐射强度随着燃烧时间的变化情况。从图 5 中可看出, 随着燃烧时间的延长,  $\text{SO}_2$  分子辐射强度先增强后减弱, 在 60 s 时达到最强。由于火焰脉动比较大, 实验测量值波动较大, 但总体辐射强度与时间呈二次函数关系。

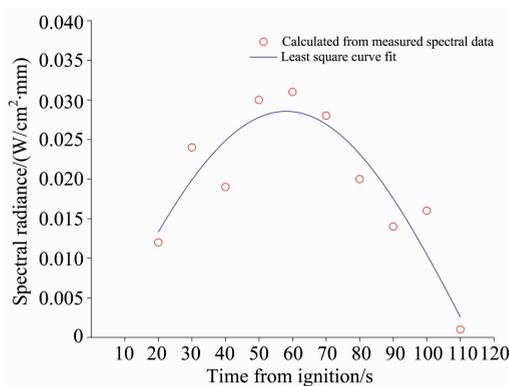


图 5 在 5 cm 尺度下  $7.4\ \mu\text{m}$  处  $\text{SO}_2$  辐射强度随时间的变化

Fig. 5 The variation of  $\text{SO}_2$  radiation intensity at  $7.4\ \mu\text{m}$  with burning time at 5 cm scale

##### 1.4.4 不同尺度下的 $\text{CS}_2$ 火焰光谱

实验测量 5, 10 和 20 cm 三种不同尺度下的  $\text{CS}_2$  火焰光谱, 选取 60 s 左右燃烧稳定时的光谱。并通过 A, B 两通道系数进行了定标, 结果如图 6 所示。从图 6 中可以看出, 不

同燃烧尺度下, CS<sub>2</sub> 火焰光谱曲线特征基本一致; 随着燃烧尺度的增加, 火焰光谱辐射强度也随之增加。在 4.3 和 7.35 μm 两处光谱辐射强度增大最为明显, 选择 3 个燃烧尺度在 4.3 μm 处的 CO<sub>2</sub> 特征峰和 7.35 μm 处的 SO<sub>2</sub> 特征峰的辐射强度进行比较, 从图 6 插图可以看出随燃烧尺度变化辐射强度增加幅度近似于线性。根据 7.35 μm 波段的光谱辐射强度, 来对 SO<sub>2</sub> 浓度进行反演研究。

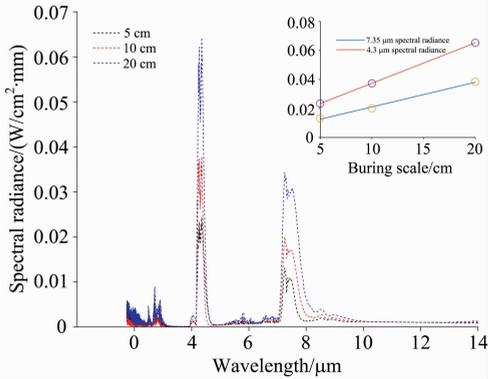


图 6 不同尺度的 CS<sub>2</sub> 火焰光谱

Fig. 6 CS<sub>2</sub> flame spectrum at different scales

## 2 结果与讨论

### 2.1 火焰辐射光谱模型构建

CS<sub>2</sub> 火焰的光谱辐射主要来自气体分子辐射, 没有炭黑辐射。这与碳氢燃料光谱辐射不同, 碳氢燃料光谱辐射通常为气体分子辐射与炭黑辐射共存。Liu 等建立了碳氢火焰光谱辐射模型并进行了验证<sup>[10]</sup>, 该模型可较好地模拟碳氢燃料火焰光谱。虽然 CS<sub>2</sub> 火焰辐射光谱组成与碳氢燃料辐射光谱不同, 但它们的光谱辐射原理一致。因此, 基于碳氢燃料火焰光谱模型<sup>[10]</sup>, 只考虑气体分子辐射光谱, 并调整相关参数, 包括辐射气体组分、各组分浓度、辐射路径、谱线强度等, 即可构建出 CS<sub>2</sub> 火焰光谱辐射模型。建模主要过程如下。

火焰辐射光谱计算公式如式(1)所示

$$Rad = I_b(\nu, T)\alpha(\nu) \quad (1)$$

式(1)中,  $I_b$  为在波数  $\nu$ 、温度  $T$  处普朗克黑体的辐射强度,  $\alpha$  为气体分子的发射率。

由朗伯-比尔定律可知物体的透过率为

$$\eta = \exp[-d_s P \sum k_i(\nu) \chi_i] \quad (2)$$

式(2)中,  $d_s$  为气体穿透路径的微元长度,  $P$  为压强,  $k_i(\nu)$  为组分  $i$  在波数  $\nu$  处的吸收系数,  $\chi_i$  为组分  $i$  的浓度。

由基尔霍夫定律可知, 在热平衡条件下, 气体的吸收率等于其发射率, 而气体的吸收率与发射率之和等于 1, 因此气体的发射率如式(3)所示

$$\alpha(\nu) = 1 - \eta = 1 - \exp[-LP \sum k_i(\nu) \chi_i] \quad (3)$$

气体的吸收系数可根据 HITRAN 数据库来计算, 该数据库提供了气体分子在各个波段上谱线的所有参数。计算过程如式(4)所示

$$k_i(\nu) = \int_{line} S_{ij} f_{L,i}(\nu) \quad (4)$$

式(4)中,  $S_{ij}$  为单个分子在温度  $T$  时的谱线强度;  $f_{L,i}$  为谱线线型, 这里指洛伦茨线。

### 2.2 模型验证

由于遥感技术中所用的光谱传感器普遍精度不高, 因此借助于高分辨率光谱数据得出的结论不能应用于遥感领域。研究火焰光谱的宏观特征更能有效的应用当前的遥感探测。火焰处于湍流状态, 脉动较大, 致使火焰中各处的温度各不相同。而在火灾遥感探测中关注的是火灾火焰整体的温度情况, 火焰中各处不同的温度对研究影响极小, 因此本文主要考虑火焰的整体特性, 即将火焰内部划分为几部分区域, 每一部分区域内视为热力学平衡, 以便研究火焰区域的平均特性。因此, 模型中的温度等参数是火焰区域的平均参数。利用 HAPI 获取 HITRAN 数据库数据<sup>[14-16]</sup>, 并基于 python 软件编写光谱计算程序, 然后利用实验数据对构建的火焰光谱辐射模型进行验证。

图 7 为构建模型的模拟数据与实验测量值的对比。由图 7 可知, 该模型在 SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O 分子特征波段处的模拟值与实验测量值可很好地拟合。在 5~10 μm 波段时模拟值与实验测量值有差别。由上述分析可知, 5~10 μm 波段中实验测量值包含被加热的燃烧器发出的热辐射, 而模型中只考虑了 CS<sub>2</sub> 火焰中气体分子辐射光谱, 因此导致在该波段范围内模拟值与实测值存在误差。综上所述, 该模型可很好地模拟出 CS<sub>2</sub> 的火焰光谱辐射。

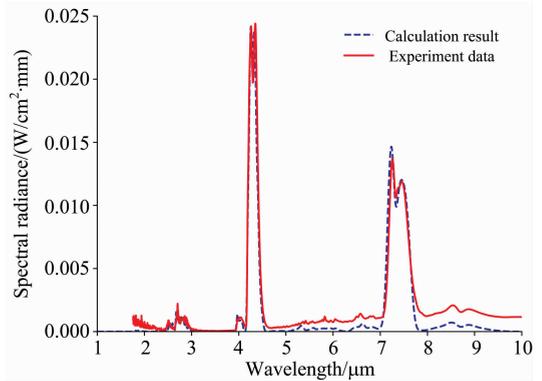


图 7 模型计算值与实验实测值的比较

Fig. 7 Comparison of calculated values of the model with experimental measured value

### 2.3 燃烧特征产物 SO<sub>2</sub> 的浓度反演

由式(3)可知, 组分浓度是构建光谱模型的重要参数, 不同组分浓度对应的光谱辐射强度不同。因此, 可基于光谱辐射强度模拟值与组分浓度之间的响应关系, 对燃烧特征产物 SO<sub>2</sub> 的浓度进行反演研究。由 CS<sub>2</sub> 火焰光谱实验测量值可看出, CS<sub>2</sub> 在 7.4 μm 处的发射峰特别明显。因此, 本反演研究是基于 SO<sub>2</sub> 分子在 5cm 燃烧尺度下在 7.4 μm 波段处的辐射光谱, 以 20, 40, 60 和 80 s 时辐射光谱实验测量值为基准, 利用自行构建的 CS<sub>2</sub> 辐射光谱模型进行反演研究。本反演研究中未考虑大气吸收, 温度为火焰平均温度, 气压为标

准大气压。图 8 为 5 cm 尺度下燃烧特征产物  $\text{SO}_2$  浓度反演值与实验测量值的对比情况。由图 8(a—d)可知, 在 20, 40, 60 和 80 s 时,  $\text{SO}_2$  反演浓度值分别为 0.15%, 0.23%, 0.42% 和 0.32%。与实验测量值相比, 20, 40, 60 和 80 s 时  $\text{SO}_2$  反演浓度的精度分别达到 89.5%, 82.5%, 85.6% 和 86.5%。从  $\text{CS}_2$  火焰光谱曲线图 2 可看出,  $\text{CO}_2$  分子在 2.7

和 4.3  $\mu\text{m}$  波段特征峰明显,  $\text{H}_2\text{O}$  分子在 2.5 和 2.7  $\mu\text{m}$  波段特征峰也明显, 理论上是可以进行  $\text{CO}_2$  含量、 $\text{H}_2\text{O}$  含量的反演分析。但大气中也存在  $\text{CO}_2$  和  $\text{H}_2\text{O}$ , 且在该波段上会存在极强的光谱吸收, 会对测量结果造成一定的干扰, 即在实际火灾中需要进行大气校正后再进一步研究。

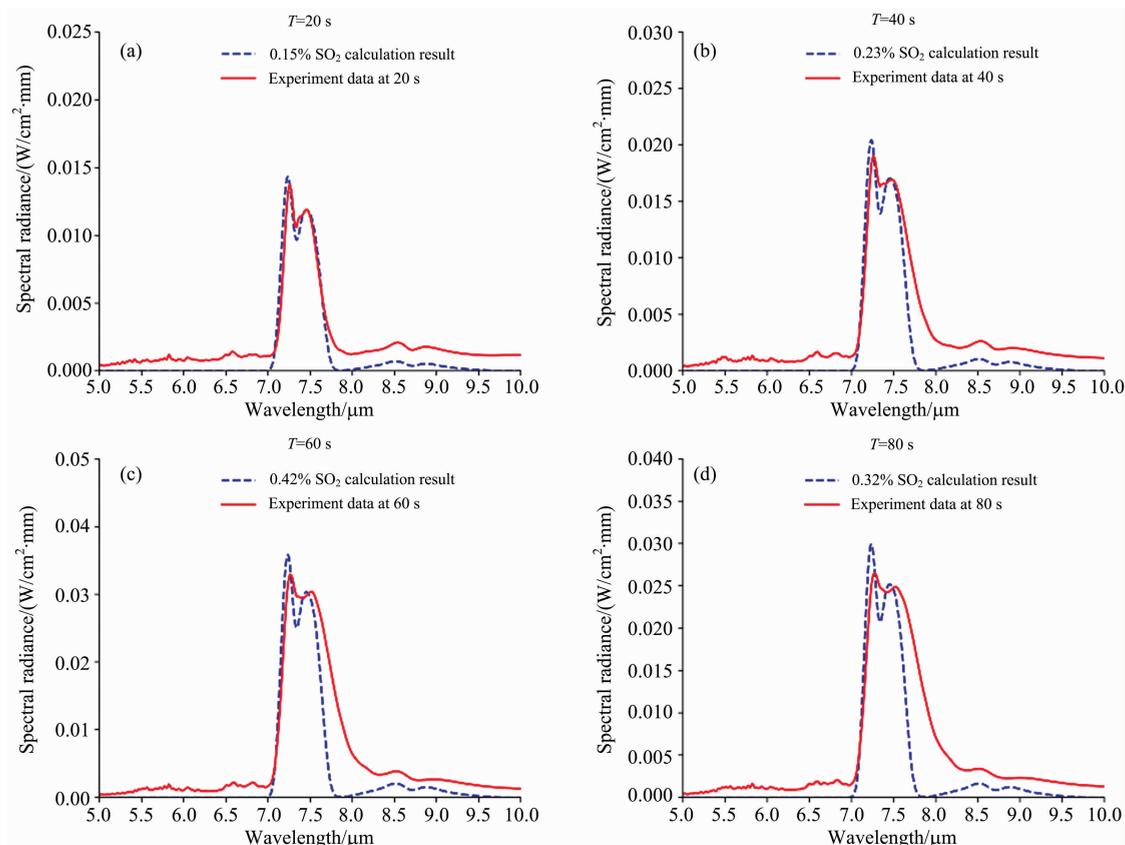


图 8 5 cm 尺度下  $\text{SO}_2$  浓度反演值与实验值的比较

(a): 20 s; (b): 40 s; (c): 60 s; (d): 80 s

Fig. 8 Comparison of  $\text{SO}_2$  concentration inversion values and experimental values at 5 cm scale

(a): 20 s; (b): 40 s; (c): 60 s; (d): 80 s

### 3 结 论

在 5 cm 的燃烧尺度下测量了  $\text{CS}_2$  的燃烧信息, 火焰燃烧温度, 燃烧组分浓度以及火焰辐射光谱。建立了  $\text{CS}_2$  火焰光谱辐射模型, 并将火焰中的  $\text{SO}_2$  分子含量倒置。实验测试结果表明,  $\text{CS}_2$  燃烧火焰中含有  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}$  气体分子, 燃烧产物  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CO}_2$  和  $\text{H}_2\text{O}$  具有明显的光谱辐射特性, 火焰温度为 800~1 300 K,  $\text{CS}_2$  燃烧火焰的特征产物  $\text{SO}_2$  分子的特征带分别为 4.05, 7.4 和 8.51  $\mu\text{m}$ , 其中 7.4

$\mu\text{m}$  波段的辐射谱特征最为显著。

(1)通过构建的  $\text{CS}_2$  火焰辐射谱模型并利用仪器测试了 5 cm 尺度下的火焰光谱进行了验证, 能够较好地模拟  $\text{CS}_2$  火焰光谱, 分析火焰污染产物光谱特征信息。

(2)从遥感学科的角度利用自行构建的  $\text{CS}_2$  火焰光谱辐射模型依据火焰的光谱特征实现  $\text{SO}_2$  含量的反演。燃烧时间为 20, 40, 60 和 80 s 时, 5 cm 尺度下  $\text{SO}_2$  浓度反演精度分别为 89.5%, 82.5%, 85.6% 和 86.5%, 反演的结果准确性较高, 能为实际遥感监测地面硫化物火灾以及定量反演污染物组分含量奠定基础。

### References

- [1] Abdollahi M, Hosseini A. Encyclopedia of Toxicology, 2014, 108(3): 678.
- [2] Rosner D. Bulletin of the History of Medicine, 2018, 92 (2): 387.
- [3] Gu S, Wen Z Y, Qian R, et al. ACS Applied Materials & Interfaces, 2016, 8(50): 34379.

- [ 4 ] McGuirk C M, Rebecca L S, Drisdell W S, et al. *Nature Communications*, 2018, 9(1): 5133.
- [ 5 ] Raj P K. *Journal of Hazardous Materials*, 2008, 159(1): 61.
- [ 6 ] Yilmaz A. *Dissertations & Theses-Gradworks*. 2009, 9: 922.
- [ 7 ] Hsu P S, Daniel L, Naibo J, et al. *Applied Optics*, 2017, 56(21): 6029.
- [ 8 ] Salvagni R G, Felipe R C, Maria L S, et al. *Journal of Hazardous Materials*, 2019, 368: 560.
- [ 9 ] Johnson A D. *Institution of Chemical Engineers Symposium Series*, 1992, 130: 507.
- [10] Liu Q, Chen Z L, Liu H T, et al. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2017, 49: 427.
- [11] Zeng Z. *Combustion and Flame*, 2019, 210: 413.
- [12] 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.
- [13] Karlovets E V, Gordon I E, Hashemi R, et al. *Journal of Quantitative Spectroscopy Radiative Transfer*, 2021, 258: 107275.
- [14] Chalansonnet M, Maria C P, Thomas V, et al. *Neuro Toxicology*, 2018, 67: 270.
- [15] Gordon I E, Rothman L S, Hill C, et al. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2017, 203: 3.
- [16] Kochanov R V, Gordon I E, Rothman L S, et al. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2016, 177: 15.

## Construction of CS<sub>2</sub> Combustion Flame Spectral Radiation Model and Inversion of Characteristic Pollution Product Concentration

PENG Wu-di<sup>1</sup>, NING Jia-lian<sup>2</sup>, CHEN Zhi-li<sup>1\*</sup>, TANG Jin<sup>1</sup>, LIU Li-xi<sup>1</sup>, CHEN Lin<sup>1</sup>

1. College of Environmental Science and Engineering, Guilin University of Technology, Guilin 541006, China

2. South China Institute of Environmental Sciences, Ministry of Ecology and Environment, Guangzhou 510000, China

**Abstract** CS<sub>2</sub> plays an important role in today's chemical industry and other fields, while CS<sub>2</sub> fire pollution accidents are extremely harmful. It is necessary to study the fire pollution characteristics of CS<sub>2</sub> by studying the spectral radiation of CS<sub>2</sub> combustion flame. Has set up a platform CS<sub>2</sub> combustion flame spectrum test, this paper adopts from a complete set of VSR instrument calibration blackbody radiation sources, through infrared spectrum radiometer VSR test 5 cm, to 10 cm, 20 cm three scales CS<sub>2</sub> combustion flame spectrum, and through the thermocouple tested the whole combustion flame temperature under different combustion period, and installed over the flame to monitor the quality of flame in the combustion product concentration of flue gas analyzer. The flame temperature during the whole combustion period of CS<sub>2</sub>, the flame spectrum and the composition information of combustion products at different combustion times and scales were measured. The test results show that the CS<sub>2</sub> flame mainly contains high temperature gases such as SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO and H<sub>2</sub>O, and the concentration of characteristic pollution product SO<sub>2</sub> is obtained. Due to the limited measurement resolution of existing spectrometers and the limited flame scale measured in laboratory experiments, to achieve online fire monitoring, it is necessary to establish a flame spectral radiation model to retrieve the pollutant concentration-related information in CS<sub>2</sub> fire. Based on the HITRAN database is near 2.7 μm for high temperature and water vapor emission peak, 4.2 μm for CO<sub>2</sub> emission peak, around 4.7 μm is CO faint emission peak, near 7.4 μm for SO<sub>2</sub> emission peak. We have gained CS<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CO and H<sub>2</sub>O gas in the absorption coefficient of the same temperature and calculate mixed gas transmittance and the emissivity, Combined with the gas radiation transfer equation and gas absorption coefficient equation, the flame spectral radiation model of CS<sub>2</sub> combustion is established. The spectral radiation model was used to invert the characteristic pollutant SO<sub>2</sub> under different combustion times and compared with the experimental data. The results show that this model has high accuracy and can to invert the concentration of combustion products quantitatively. The accuracy of inversion of SO<sub>2</sub> concentration at the time of 20, 40, 60 and 80 s is 89.5%, 82.5%, 85.6% and 86.5%, respectively. It lays a foundation for remote sensing monitoring and inversion of the concentration of combustion products in CS<sub>2</sub> large-scale fire.

**Keywords** CS<sub>2</sub> flame; Flame spectrum; Spectral radiation model; Quantitative inversion of gas concentration

(Received Mar. 4, 2021; accepted May 7, 2021)

\* Corresponding author