

# SO<sub>2</sub> 气体的辐射特性<sup>\*</sup>

(哈尔滨工业大学) 刘林华 杨有才

[摘要] 基于 HITRAN Database 给出的谱线参数, 提出了 SO<sub>2</sub> 气体光谱辐射特性的逐线积分计算方法。利用逐线计算方法计算了 SO<sub>2</sub> 气体的光谱辐射特性, 给出了总压 0.1 MPa、温度 200K~2000K、压力行程 0.000 06~1 m<sup>2</sup> MPa 参数范围内 SO<sub>2</sub> 气体的黑度计算图。

关键词: 辐射特性; SO<sub>2</sub> 气体; 逐线计算方法

中图分类号: TK123

## 1 前言

由于燃料地域分布等原因, 目前还有相当一部分设备燃烧和使用高硫燃料。高硫燃料的燃烧过程产生大量的气体污染物 SO<sub>2</sub>。若将这些气体排入大气中, 将导致严重的大气污染。为此, 目前世界各国普遍都在大力开展燃烧过程脱硫技术的研究。

SO<sub>2</sub> 气体辐射特性的研究对脱硫技术的研究以及高硫燃料燃烧设备的设计有很重要的作用。一方面, 火焰中包括气体污染物在内的组分浓度的测量是燃烧过程中脱硫技术研究的关键之一。火焰组分浓度的测量方法有多种, 各有其特点。目前光学测量法因其所具有的优越性而得到较多的研究和应用。由于火焰组分多样, 光谱辐射特性各异, 各组分气体的谱线会发生重叠干扰。因此了解和精确计算各组分气体的光谱辐射特性, 恰当地选择工作波段, 是 SO<sub>2</sub> 浓度光学测量的重要因素之一。另一方面, 大量 SO<sub>2</sub> 气体的存在, 将影响混合气体的辐射特性。在原苏联热力计算标准中, 将 SO<sub>2</sub> 当成 CO<sub>2</sub> 看待来计算混合气体的黑度<sup>[1]</sup>。由本文后面的分析可知, SO<sub>2</sub> 和 CO<sub>2</sub> 气体的辐射特性差别很大。若燃用高硫燃料时, 仍将 SO<sub>2</sub> 当成 CO<sub>2</sub> 看待来计算混合气体的黑度, 将影响燃烧室内热力计算的精度。

气体辐射特性的实验测量设备复杂昂贵。理论

计算主要有两种方法, 谱带模型法和逐线积分法。谱带模型法计算简单, 但误差较大。理论上精细的光谱特性计算方法是逐线积分法, 但它需要大量复杂的光谱线参数。美国空军菲利普斯地球物理实验室组织编辑了高分辨率大气吸收线参数数据库, 最初于 1973 年推出 (AFCL-TR0096), 并经过多次补充 (1983, 1978, 1992)<sup>[2]</sup>, 形成了包含 H<sub>2</sub>O、CO<sub>2</sub>、SO<sub>2</sub> 和 N<sub>2</sub> 在内的 37 种重要的气体分子的吸收线参数数据库 (HITRAN Database)。

本文基于该谱线参数数据库, 研究 SO<sub>2</sub> 气体光谱辐射特性的逐线积分计算方法。利用逐线计算方法计算 SO<sub>2</sub> 气体辐射特性, 为与 SO<sub>2</sub> 气体相关的工业过程设计和研究提供辐射特性基础数据, 并为进一步研究和修正 H<sub>2</sub>O + CO<sub>2</sub> + SO<sub>2</sub> + N<sub>2</sub> 等混合气体的辐射特性计算式和图表打下基础。

## 2 光谱特性的逐线积分法

按量子力学和光谱学理论<sup>[3]</sup>, 中心位于波数  $\nu_0$  的单根谱线, 其线吸收系数随波数  $\nu$  的变化为:

$$\kappa(\nu) = Sg(\nu - \nu_0)N \quad (1)$$

其中,  $g(\nu - \nu_0)$  为归一化的线型函数,  $\nu_0$  为谱线中心处的波数,  $N$  为 Loschmidts 数,  $S$  为分子线强度。根据分子谱线增宽机制的不同, 主要有以下三种线型: Lorentzian 线型、Doppler 线型、Voigt 线型。

Lorentzian 线型考虑了压力增宽效应, 其线型函数  $g_l(\nu - \nu_0)$  及半宽  $\gamma_l$  分别为:

$$g(\nu - \nu_0) = (\gamma_l/\pi) [(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_l^2]^{-1} \quad (2)$$

$$\gamma_l = g_{\text{air}}(296/T)^n P_t \quad (3)$$

其中,  $g_{\text{air}}$  为空气增宽半宽,  $P_t$  为气体总压力。

Doppler 线型考虑了 Doppler 增宽效应, 其线型函数  $g_d(\nu - \nu_0)$  及半宽  $\gamma_d$  分别为:

\* 航天工业总公司基础性研究基金资助项目

收稿日期: 1998-07-06 修改定稿: 1998-10-14

作者简介: 刘林华 (1966-), 男, 江西瑞金人, 博士, 副教授, 从事热能工程、工程热物理的教学与研究。通讯处: 150001 哈尔滨工业大学 513 信箱。

$$g_d(\nu - \nu_0) = (1/\gamma_d) (\ln 2/\pi)^{0.5} \exp[-\ln 2(\nu - \nu_0)^2/\gamma_d^2] \quad (4)$$

$$\gamma_d = (\nu_0/c) [2RT \ln 2/M]^{0.5} \quad (5)$$

其中,  $c$  为光速,  $R$  为气体常数,  $M$  为气体分子量。

Voigt 线型考虑了压力增宽和 Doppler 增宽的混合效应。精确的 Voigt 线型函数的计算涉及复杂的无穷积分运算。Whiting E E<sup>[4]</sup> 提出了以下近似的 Voigt 线型函数计算式, 其误差不超过 2%:

$$\frac{g_v(\nu - \nu_0)}{I_{gv \max}} = \left\{ 1 - \frac{W_1}{W_v} \exp \left[ -2.772 \left( \frac{\nu - \nu_0}{W_v} \right)^2 \right] \right\} + \left\{ \frac{W_1}{W_v} \left[ 1 + 4 \left( \frac{\nu - \nu_0}{W_v} \right)^2 \right]^{-1} + 0.016 \left[ 1 - \frac{W_1}{W_v} \right] \left[ \frac{W_1}{W_v} \right] \left\{ \exp \left[ -0.4 \left( \frac{\nu - \nu_0}{W_v} \right)^{2.25} \right] - 10 \left[ 10 + \left( \frac{\nu - \nu_0}{W_v} \right)^{2.25} \right]^{-1} \right\} \right\} \quad (6)$$

$$W_v = 0.5346 W_1 + (0.2166 W_1^2 + W_d^2)^{0.5} \quad (7)$$

其中,  $W_1$ ,  $W_d$ ,  $W_v$  分别为 Lorentzian、Doppler、Voigt 线型的线宽 (FWHM linewidth),  $I_{gv \max}$  为线中心处 Voigt 线型函数的值。

$$I_{gv \max} = \left\{ W_v \left[ 1.065 + 0.447 \left( \frac{W_1}{W_v} \right) + 0.058 \left( \frac{W_1}{W_v} \right)^2 \right] \right\}^{-1} \quad (8)$$

谱线与谱线之间会发生部分重叠, 气体在波数  $\nu$  处的吸收系数为各相互重叠的谱线在波数  $\nu$  处的作用之和。对于同一气体, 其在波数  $\nu$  处光谱吸收系数  $\bar{\kappa}(\nu)$  等于各相互重叠谱线在波数  $\nu$  处的线吸收系数  $\kappa(\nu)$  之和, 即:

$$\bar{\kappa}(\nu) = \sum_{\nu_0} \kappa(\nu) = \sum_{\nu_0} S g(\nu - \nu_0) N \quad (9)$$

将式(2)至式(7)代入式(9), 即可由谱线中心波数、线强度、线宽、温度系数等谱线参数计算出气体的光谱吸收系数。

气体的黑度不但与光谱吸收系数有关, 而且还和压力行程有关, 可表示为:

$$\epsilon = \frac{\int_0^{\infty} [1 - \exp(-\bar{\kappa}(\nu) P_g L)] E_b(\nu) d\nu}{\sigma T^4} \quad (10)$$

其中,  $P_g$  为气体的分压,  $L$  为几何行程,  $\sigma$  为 stefan-Boltzmann 常数,  $E_b(\nu)$  为黑体单色辐射力。由于气

体只有若干个辐射带, 上式在实际计算时无需在整个区  $[0, \infty]$  间内积分, 只需对有辐射的波带进行积分。

### 3 计算结果

HITRAN Database 包括了大气光谱传输中最重要的 37 种气体分子及其同位素从  $10^{-6} \sim 22\,656\text{ cm}^{-1}$  波数 (波长  $0.44 \sim 10^{10}\ \mu\text{m}$ ) 范围共 999 363 根谱线的线参数。这些线参数包括波长、线强度、跃迁几率、空气增宽半宽、自增宽半宽、下态能量、温度系数、上态总量子序数、下态总量子序数、上下态量子数等所有逐线计算所需的谱线参数。

基于这些谱线参数, 本文利用逐线计算方法对  $\text{SO}_2$  气体的辐射特性进行了计算分析。考虑到在所计算的参数范围内兼有压力增宽和 Doppler 增宽效应, 本文在计算中选用 Voigt 线型。

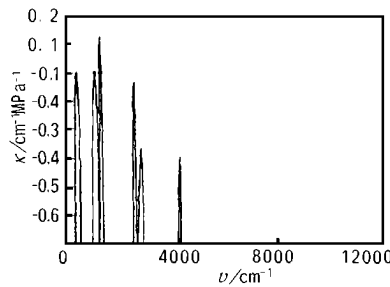


图 1  $\text{SO}_2$  气体的单色吸收系数

图 1 所示为总压为 0.1MPa、温度为 296K 时  $\text{SO}_2$  气体的光谱吸收系数随波数的变化。由图可以看出,  $\text{SO}_2$  的吸收带主要集中于波数  $500 \sim 4000\text{ cm}^{-1}$  (波长  $2.5 \sim 20\ \mu\text{m}$ ) 红外区段, 并在波数  $1361\text{ cm}^{-1}$ 、 $1152\text{ cm}^{-1}$  和  $519\text{ cm}^{-1}$  (波长  $7.4\ \mu\text{m}$ 、 $8.7\ \mu\text{m}$  和  $19.3\ \mu\text{m}$ )

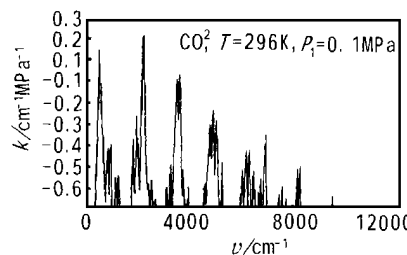


图 2  $\text{CO}_2$  气体的单色吸收系数

附近处有强吸收峰。

作为比较, 图 2 给出了总压力 0.1MPa、温度为 296K 时  $\text{CO}_2$  气体的光谱吸收系数随波数变化的逐线计算结果。

由图可以看出,  $\text{SO}_2$  气体的光谱吸收特性与  $\text{CO}_2$  差别很大。这一方面有利于  $\text{SO}_2$  气体浓度光学测量工作波段的选择, 减小  $\text{CO}_2$  气体的存在对测量的影响。表 1 给出了  $\text{CO}_2$  气体和  $\text{SO}_2$  气体主要吸收波带的分布。4.3  $\mu\text{m}$  波带重叠严重, 因而不宜选择 4.3  $\mu\text{m}$  作为燃烧产物中  $\text{SO}_2$  浓度测量的工作波段。另

一方面, 由于主要吸收波带分布上的差异, SO<sub>2</sub> 气体和 CO<sub>2</sub> 气体的黑度随温度和压力行程的变化规律差别很大。图 3 给出了总压  $P_1 = 0.1 \text{ MPa}$ 、温度  $T = 1000 \text{ K}$  时, SO<sub>2</sub> 和 CO<sub>2</sub> 的黑度随压力行程  $P_g L$  的变化情况。从图中可以看出, SO<sub>2</sub> 和 CO<sub>2</sub> 的黑度差别非常大, 比值  $\epsilon_{\text{CO}_2} / \epsilon_{\text{SO}_2}$  最大处高达 300%。因此, 当燃烧高硫燃料或混合气体中的 SO<sub>2</sub> 含量较高时, 不宜象原苏联热力计算标准<sup>[1]</sup> 那样, 将 SO<sub>2</sub> 当成 CO<sub>2</sub> 看待来计算混合气体的黑度。

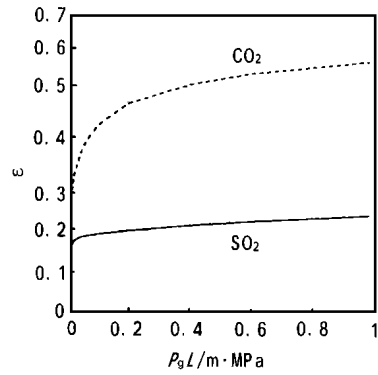


图 3 CO<sub>2</sub> 和 SO<sub>2</sub> 气体的黑度的比较  $P_1=0.1 \text{ MPa}$ ,  $T=1000 \text{ K}$

混合气体中的 SO<sub>2</sub> 含量较高时, 不宜象原苏联热力计算标准<sup>[1]</sup> 那样, 将 SO<sub>2</sub> 当成 CO<sub>2</sub> 看待来计算混合气体的黑度。

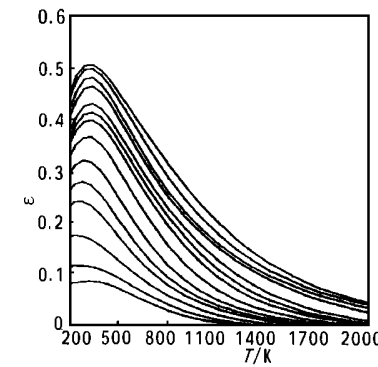


图 4 SO<sub>2</sub> 气体的黑度 ( $P_1=0.1 \text{ MPa}$ )

图 4 给出了总压  $0.1 \text{ MPa}$ 、温度  $200 \text{ K} \sim 2000 \text{ K}$ 、压力行程 ( $P_g L$ )  $0.00006 \sim 1 \text{ m} \cdot \text{MPa}$  参数范围内 SO<sub>2</sub> 气体的黑度计算图, 并按 Hottel 图表的方式绘制。图中从下至上 14 条曲线依此表示压力行程  $P_g L = 0.00006$ 、 $0.0001$ 、 $0.0002$ 、 $0.0004$ 、 $0.0006$ 、 $0.001$ 、 $0.002$ 、 $0.004$ 、 $0.006$ 、 $0.01$ 、 $0.04$ 、 $0.1$ 、 $0.4$  及  $1 \text{ m} \cdot \text{MPa}$  时 SO<sub>2</sub> 气体的黑度随温度的变化规律。如图所示,

黑度随温度的变化在  $200 \text{ K} \sim 400 \text{ K}$  附近有个峰值, 这是由于强吸收峰处于波长  $7.4 \mu\text{m}$ 、 $8.7 \mu\text{m}$  和  $19.3 \mu\text{m}$  附近, 并受 Wien 位移定律作用的结果。

表 1 CO<sub>2</sub> 和 SO<sub>2</sub> 的主要吸收带

	CO <sub>2</sub>				SO <sub>2</sub>				
波长 $\mu\text{m}$	1.9	2.7	4.3	15	4.0	4.3	7.4	8.7	19.3
波数 $\text{cm}^{-1}$	5263	3715	2350	667	2500	2300	1361	1152	519

#### 4 结论

本文基于 HITRAN Database 给出的谱线参数, 利用逐线计算方法计算了 SO<sub>2</sub> 气体的辐射特性。SO<sub>2</sub> 气体的吸收带主要集中于波长  $2.5 \sim 20 \mu\text{m}$  红外区段, 并在波长  $7.4 \mu\text{m}$ 、 $8.7 \mu\text{m}$  和  $19.3 \mu\text{m}$  附近有强吸收峰。SO<sub>2</sub> 气体的光谱吸收特性与 CO<sub>2</sub> 差别很大。SO<sub>2</sub> 气体的  $4.3 \mu\text{m}$  波带与 CO<sub>2</sub> 重叠严重, 因而不宜选择  $4.3 \mu\text{m}$  作为燃烧产物中 SO<sub>2</sub> 浓度测量的工作波带。当燃烧高硫燃料或混合气体中的 SO<sub>2</sub> 含量较高时, 不宜象原苏联热力计算标准那样, 将 SO<sub>2</sub> 当成 CO<sub>2</sub> 看待来计算混合气体的黑度。图 4 给出了总压  $0.1 \text{ MPa}$ 、温度  $200 \text{ K} \sim 2000 \text{ K}$ 、压力行程  $0.00006 \sim 1 \text{ m} \cdot \text{MPa}$  参数范围内 SO<sub>2</sub> 气体的黑度曲线图, 该图可用于 SO<sub>2</sub> 气体黑度的计算。

#### 参考文献

[1] Blokh A G. Heat transfer in steam boiler furnaces. Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1988:23~45.  
 [2] Rothman S. The HITRAN Molecular Database; Editions of 1991 and 1992. J Quant Spectrosc Radiat Transfer, 1992, 48:469~507.  
 [3] Bernath P F. Spectra of atoms and molecules. Oxford University Press, 1995:3~35.  
 [4] Whiting E E. An empirical approximation to the voigt profile J Quant Spectrosc Radiat Transfer, 1968, 8:1379~1384.

(复 编)

### 新技术

## 改进的工业汽轮机

据“Diesel & Gas Turbine Worldwide”1998 年 11 月号报道 德国 GHH BORSIG 涡轮机公司已推出基于先进的排气级研制的新一代汽轮机。这些新型的汽轮机已在 CHP(热电联产)装置中得到应用, 生产电力并供应过程蒸汽。

借助于使用现代化的流体设计程序, 研制出在给定转速下允许 100% 增加蒸汽流量的跨音速末级, 可使单汽缸内的排汽流量增加到  $1500 \text{ m}^3 / \text{s}$ 。新的排气级叶片设计可使单流式汽轮机的通流能力最大并增加汽轮机的效率。

针对低抽汽压力的应用 GHH BORSIG 公司已在低压抽汽口下游引入可调整的导叶片, 以便控制流到汽轮机冷凝部分的蒸汽流量。使用可调整导叶的抽汽控制系统可优化汽轮机的抽汽控制。(思娟 供稿)

化学水处理计算机监控系统=A Computer-based Monitoring System for a Chemical Water Treatment System [刊, 中] /Shi Jianping, Yun Ruitian (Harbin No. 703 Research Institute) //Journal of Engineering for Thermal Energy &Power. -1999, 14 (4). -

A brief description is given of a chemical water treatment system. The concrete implementation of a control system for the chemical water treatment is expounded in detail with some difficulties identified and their methods of resolution presented. **Key words:** chemical water treatment, computer-based control system

加热法测量湿度探针取样过程的数值模拟分析=Numerical Simulation and Analysis of the Sampling Process of Wetness Measurement Probe through the Use of a Heating Method [刊, 中] /Li Yanfeng, Wang Xinjun, Xu Tingxiang (Xi'an Jiaotong University) //Journal of Engineering for Thermal Energy &Power. -1999, 14 (4). -

A mathematical model has been set up for a region near the inlet of a heating method-based wetness measurement probe. By way of a numerical simulation an analysis was conducted of the measurement error due to a non-isokinetic sampling and an axial deviation in the steam flow direction. The results of such an analysis provide useful data for the design and engineering application of the heating method-based wetness measurement probes. **Key words:** isokinetic sampling, flow field simulation, porosity

SO<sub>2</sub> 气体的辐射特性=Radioactive Properties of SO<sub>2</sub> Gas [刊, 中] /Liu Linhua, Yan Youcai (Harbin Institute of Technology) //Journal of Engineering for Thermal Energy &Power. -1999, 14 (4). -

On the basis of the spectrum data given in HITRAN database proposed is a line-by-line integral method for the calculation of SO<sub>2</sub> gas spectrum radioactive properties. Relevant charts are given for calculating SO<sub>2</sub> emissivity within the range of the following parameters: total pressure 0. 1 MPa, temperature 200 ~2000 K, pressure range 0. 00006 ~ 1 MPa. **Key words:** radioactive property, SO<sub>2</sub> gas, line-by-line calculation method

燃用宽筛分煤循环流化床锅炉燃烧模拟计算=Numerical Simulation of the Combustion in a Large Mesh Size Coal-Fired Circulating Fluidized Bed Boiler [刊, 中] /Liu Wentie Li Bingxi, Zhao Guangbo, et al (Harbin Institute of Technology) //Journal of Engineering for Thermal Energy &Power. -1999, 14 (4). -

Described in this paper is a mathematical model of large mesh-size coal particle combustion and desulfurization reaction in a circulating fluidized bed boiler furnace. The model has taken into account such specific features as a dense-phase zone involving high particle size concentration at the furnace lower portion and a dilute-phase zone at the furnace upper portion dominated by low particle size concentration. As a result of simulation computations obtained are the flue gas temperature, heat flux and the axial distribution of various gas components (O<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>O, CO, H<sub>2</sub>O and S<sub>2</sub>O). The trend as indicated by the results of the simulation calculation is found to be rational. **Key words:** circulating fluidized bed boiler, numerical simulation calculation, combustion

论 DZF 循环是又一个第二类永动机=DZF Cycle as a yet Another Perpetual Motion Machine of the Second Category [刊, 中] /Chou Qiaoli, Xu Guang, Li Xinqiu (Nuclear Science Research Institute Under the Qinghua University) //Journal of Engineering for Thermal Energy &Power. -1999, 14 (4). -

The thermodynamic analysis of an invention patent to be examined and evaluated for official publication ([刊, 中 21] application No. 96111171. 2 and entitled "Refrigeration-based electrical power generation by utilizing a low boiling point working medium and a refrigeration power station") has shown that this pertains to yet another doomed-to-fail perpetual motion machine of the second category due to its infraction of the second law of thermodynamics and an impossibility of its independent existence. **Key words:** second law of thermodynamics, perpetual motion machine of the second category, refrigeration cycle, thermodynamic cycle

燃煤电站锅炉塌灰落渣引发灭火的爆燃机理分析=An Analysis of the Mechanism of Flame Failure Triggered