

SNCR 시스템 내부의 물질 반응에 관한 전산해석적 연구

구성모¹, 유경선², 장혁상^{1,*}

¹영남대학교 환경공학과
38541 경북 경산시 대학로 280
²광운대학교 환경공학과
01897 서울시 노원구 광운로 20

(2018년 11월 8일 접수; 2018년 12월 17일 수정본 접수; 2018년 12월 17일 채택)

CFD Analysis on the Internal Reaction in the SNCR System

Seongmo Koo¹, Kyung-Seun Yoo², and Hyuksang Chang^{1,*}

¹Department of Environmental Engineering, Yeungnam University
280 Daehak-ro, Gyeongsan-si, Gyeongbuk 38541, Korea

²Department of Environmental Engineering, Kwangwoon University
20 Kwangwoon-ro, Nowon-gu, Seoul 01897, Korea

(Received for review November 8, 2018; Revision received December 17, 2018; Accepted December 17, 2018)

요 약

연소공정 내에서 질소산화물 배출을 저감하는 선택적 무촉매 환원장치 내부의 화학반응 및 저감효율에 대한 수치해석이 실행되었다. 선택적 무촉매 환원장치에서 저감된 질소산화물은 질소뿐만 아니라 아산화질소로도 전환된다. 아산화질소는 온실가스로써 지구온난화에 영향을 끼치기 때문에 선택적 무촉매 환원장치 내의 질소산화물 제어와 동시에 아산화질소 생성 제어가 요구되어진다. 본 연구에서는 선행연구에서 실행된 실험과 온도조건과 가성소다의 첨가량이 동일한 선택적 무촉매 환원장치 내의 전산해석을 실시하고 비교하여 전산해석의 신뢰성을 확인하고, 가성소다 첨가량을 추가적으로 조절하여 질소산화물의 저감 효율과 아산화질소 생성량을 예측하였다. 전산해석은 후단의 측정점을 설정하여 각 물질의 질량분율을 확인하였다. 세부적으로는 측정점에서 유동방향에 수직한 면을 설정하여 온도 조건과 가성소다 첨가량에 따른 각 물질의 평균 질량분율을 비교하였다. 실험값과 전산해석에 의한 모사값은 최대 18.9%의 오차를 보이며 대체적으로 잘 예측됨을 확인하였으며 가성소다 첨가량을 증가시켰을 때 70% 이상의 제거율의 온도 범위가 넓어지는 것을 확인하였다. 따라서 반응온도의 낙차가 크고 잦은 폐기물 소각시설 등에서 효과적일 것으로 예상된다.

주제어 : 탈질, 선택적 무촉매 환원법, 전산유체역학

Abstract : Numerical analysis was done to evaluate the chemical reaction and the reduction rate inside of selective non-catalytic reduction to denitrification in combustion process. The NO_x reduction in selective non-catalytic reduction is converted to not only nitrogen but also nitrous oxide. Simultaneous NO_x reduction and nitrous oxide generation suppressing is required in selective non-catalytic reduction because nitrous oxide influences the global warming as a greenhouse gas. The current study was performed compare the computational analysis in the same temperature and amount of NaOH, and in comparison with the previous research experiments and confirmed the reliability of the computational fluid dynamics. Additionally, controlling the addition amount of NaOH to predict the NO_x reduction efficiency and nitrous oxide production. Numerical analysis was done to check the mass fraction of each material in the measurement point at the end of selective non-catalytic reduction. Experimental Value and simulation value by numerical analysis showed an error of up to 18.9% was confirmed that a generally well predicted. and it was confirmed that the widened temperature range of more than 70% NO_x removal rate is increased when the addition amount of NaOH. So, large and frequent changes of the reaction temperature waste incineration facilities are expected to be effective.

Keywords : Denitrification, SNCR (selective non-catalytic reduction), CFD (computational fluid dynamics)

* To whom correspondence should be addressed.

E-mail: hschang@yu.ac.kr; Tel: +82-53-810-2547; Fax: +82-53-813-5288

doi: 10.7464/ksct.2019.25.1.063 pISSN 1598-9712 eISSN 2288-0690

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

1. 서론

발전소, 소각시설에서 배출되는 질소산화물(NO_x)은 대표적인 대기오염물질 중 하나로서, 연소과정에서 연료 및 폐기물 중의 질소성분이 산화하거나 고온에서 과다 연소공기 주입에 의한 공기 중의 질소가 연소에 의해 산화되어 발생한다. 위의 시설들에서 질소산화물은 주로 일산화질소(NO)의 형태로 배출된다. 일산화질소는 독성이 약하며 대기 중의 농도수준에서는 뚜렷한 피해를 나타내지 않지만 대기 중에서 쉽게 이산화질소(NO_2)의 형태로 전환된다. 이산화질소는 산성비의 원인이 되어 금속을 부식시키고 건물수명을 단축시킬 뿐만 아니라 대기 중의 오존농도를 증가시키고 PAN, aldehyde 등의 2차 오염물질을 생성하여 광화학 스모그를 유발시킨다. 또한 일산화질소에 비해 독성이 5 ~ 10배 높기 때문에 고농도에서 흡입 시에는 호흡기 세포를 파괴하고 혈 중 헤모글로빈과 결합으로 호흡곤란의 원인이 되어 인간건강을 위협하는 물질이다[1]. 아산화질소(N_2O)는 병원에서 마취용도로 사용되는 물질로 인체에는 무해한 것으로 알려져 있다. 그러나 이 물질은 지구온난화지수(global warming potential, GWP)가 310으로 이산화탄소(CO_2)에 비해 310배에 달하는 지구온난화 유발기체인 것으로 최근 밝혀졌으며, 이산화탄소와 메탄(CH_4) 다음으로 많이 배출된다[2]. 따라서 지구온난화와 산성비와 같은 질소산화물에 의한 피해로 인해 저감기술 개발 및 실적용에 대한 요구가 증가되고 있다.

질소산화물 제어를 위해 사용되는 방법은 일반적으로 세 가지 방법이 있다. 첫째로 소각시설에서 사용되는 연료를 개선하는 방법, 둘째 연소단계에서 제어하는 방법, 마지막으로 배기가스 배출 전에 후처리 장치 설치이다. 연료 개선의 경우 순도가 높은 연료사용은 경제성에 문제를 가지며, 연소단계의 제어 방법은 완전연소를 위한 고온연소가 필수적이므로 일정 농도 이상의 제어가 어렵다는 단점이 있다. 후처리 장치를 설치하는 방법은 선택적 촉매 환원법(selective catalytic reduction, SCR) [3]과 선택적 무촉매 환원법(selective non catalytic reduction, SNCR) [4] 등이 있다. 먼저 선택적 촉매 환원법의 경우 질소산화물 저감에 높은 효율을 갖는 것으로 알려져 있지만 처리가스 중 재(ash)의 함량이 높거나, 적정 온도 보다 높은 온도조건에서는 촉매의 성능과 수명이 감소한다[5,6]. 선택적 무촉매 환원법의 경우 연소공정에서 발생하는 질소산화물 저감을 위해 암모니아(NH_3) 및 요소(urea)와 같은 질소계열의 환원제를 연소 직후인 900 ~ 1100 °C의 온도조건에서 분사하여 환원을 유도하는 공정으로써 환원제를 처리하고 저장 및 분사를 위한 공정만이 필요하기 때문에 설치비용이 저렴하여 경제적이며 공정구성이 단순하기 때문에 유지관리가 용이하다는 장점을 갖고 있다. 또한 소각로의 경우 소각되는 폐기물의 조성이 시시각각 변함에 따라 발열량이 일정하지 않아서 연소로 내의 온도변화 폭이 상대적으로 넓기 때문에 저온조건에서 미 반응 암모니아가 배출되고 고온에서는 질소산화물 저감 시에 저감된 질소산화물이 질소로만 전환되는 것이 아니라 아산화질소를 생성하여 배출되는

단점이 있다[7,8]. 선택적 무촉매 환원법에서 아산화질소의 생성은 이미 보고되어지고 있으며[9], 아산화질소는 성층권 내에서 질소산화물의 기원물질로서 아산화질소의 농도가 증가하면 오존층 파괴까지 영향을 끼친다[10]. 따라서 질소산화물뿐만 아니라 아산화질소 또한 처리할 수 있는 기술과 공정이 요구되어진다.

전술한 내용을 토대로 선택적 무촉매 환원장치 내부에서 배기가스와 요소수가 반응되는 노즐 팁 위치의 온도에 따라 질소산화물 저감효율이 달라짐을 예상할 수 있으며, 미반응 암모니아를 배출하거나 아산화질소를 생성됨을 이해하고, 질소산화물과 요소가 반응되는 실험실 규모의 선택적 무촉매 환원장치를 모델링한다. 본 연구에서는 모델링 된 선택적 무촉매 환원장치에 대하여 반응온도에 따른 질소산화물 저감효율 파악을 목적으로 전산해석을 이용하여 기존 요소를 이용했을 때와 가성소다(NaOH)를 첨가한 개량환원제를 이용했을 때의 질소산화물 저감효율과 아산화질소 발생량을 비교하였으며, 개량환원제의 가성소다 첨가 정도를 조절하여 그에 따른 효율 변화 및 발생량 또한 확인하고 평가한다.

2. 실험방법

질소산화물을 포함한 배기가스와 요소수의 혼합 및 반응으로 인한 선택적 무촉매 환원장치 내부에서 일어나는 난류유동, 열전달, 요소수의 증발 및 환원반응과 같은 물리적 작용을 모사하기 위해서는 실제 형상을 제작하고 배기가스와 요소수를 주입하여 측정점(measurement point)에서 온도 및 조성을 측정하여 결과 값을 얻어 평가하는 방법이 있다. 그러나 선택적 무촉매 환원장치 제작을 통한 방법에는 실험비용과 공간 확보가 필요하며 실물크기의 형상을 제작하기 어려움이 따르기 때문에 형상을 축소하여 실험하는 경우가 많다. 축소 모델 실험을 통한 결과 값은 실물 크기의 모델에 대한 보정이 요구되며, 보정으로 인해 결과 값이 정확하다는 보장을 할 수 없기 때문에 실험값을 신뢰하기에는 어려움이 존재한다. 전산해석을 통한 이론적 계산은 물리적 현상을 해석하기 위해 적절한 모델과 경계조건이 만족될 경우 실제 상황과 높은 일치성을 보이는 결과를 도출할 수 있다. 그렇기 때문에 형상의 크기, 압력, 온도 및 반응 등의 조건 변화와 같은 변수에 대하여 제약 받지 않는 실험을 할 수 있다는 장점이 있다.

전산유체역학은 해석 대상에 지배방정식을 적용할 수 있도록 전체 형상을 수많은 격자로 나누어 제어체적을 생성하여 해석하는 방식이다. 하나의 제어체적은 하나의 격자점(node)을 포함하며 지배방정식을 이산화하여 수치적인 계산이 이루어진다. 즉 격자의 수(element)가 증가할수록 해의 정확성을 높일 수 있다. 그러나 너무 많은 격자의 수는 필요 이상의 계산시간을 유발하기 때문에 적절한 격자의 수가 요구된다[11].

전산해석을 실시하기 위해 상용코드인 ANSYS Fluent v15.0을 사용하였다. 이 프로그램은 난류현상해석을 위한 많은 난류모델이 존재하며, 유체의 유동뿐만 아니라 화학반응, 액적의 궤도추적 등의 다양한 기능을 보유하고 있으므로 항공, 조

선, 화학 공학 등에서 광범위하게 사용되고 있다[12].

본 연구에서는 전술한 바와 같이 실험실 규모로 제작된 선택적 무촉매 환원장치의 한계를 이해하였으나, 전산해석의 화학반응 및 액적의 증발과 같은 복잡한 현상을 해석하는 것에 대한 신뢰성을 얻기 위해, 선행연구에서 다양한 조건에서 실시된 실험실규모의 선택적 무촉매 환원장치의 결과를 인용하여 동일 조건에서 비교하고 전산해석 프로그램을 통해 더 넓은 범위에서의 실험 결과를 예측하고 또 그 효용성에 대해 평가하였다.

2.1. 기본 해석형상 및 격자

전산 유체역학의 반응해석에 대한 신뢰성 평가를 위해 해석 대상은 선행연구 된 실험 결과가 필요했으며 그 실험 당시에 사용된 해석 대상과 동일한 형상과 경계조건이 요구되었다. 본 연구에서는 Nquyen et al. [13]에 의해 이루어진 선행연구에서 사용된 실험실 규모의 선택적 무촉매 환원장치와 동일한 형상을 제작하였다. 이 장치를 나타내기 위해 ANSYS사의 DesignModeler를 사용하였다[14]. 실험실 규모의 선택적 무촉매 환원장치의 형상은 Figure 1로 나타내었다. 형상은 직경 0.2 m의 총길이 4.4 m의 원통형 구조로서 입구로부터 1.7 m 지점에서 역방향으로 노즐이 분사된다. 입구로부터 1.9 m 지점까지의 벽면에서는 상대적으로 높은 열손실이 발생하며 이후 벽면에서는 그 절반의 열손실이 발생하도록 설정되었다. 노즐은 단일 노즐로 노즐 팁은 6개가 등간격으로 구성되어있다. 분사각도는 35°로 노즐 팁의 직경은 1 μm이다. Figure 2를 통해 노즐의 각 노즐 팁의 위치와 상세 정보를 나타내었다.

Figure 1과 같이 제작된 형상에 대하여 ANSYS사의 ANSYS Meshing 프로그램을 사용하여 격자를 생성하였다. 3차원 형상에 대한 격자는 크게 육면체 격자와 사면체 격자가 있다. 이 중 육면체 격자의 경우, 동일 부피 내에서 사면체보다 적은수의 격자를 형성하여 계산시간이 적고 해석 시 나타내는 오차가 적다는 장점이 있다. 사면체 격자의 경우, 비교적 많은 수의 격자를 형성하여 계산 시간이 길다는 단점이 있으나, 본 해석과 같은 곡면이 존재하거나 노즐에 의해 복잡해지는 형상에 대한 해석 시 격자를 생성하기에 훨씬 적합하다[11,14]. 또한 본 연구에서는 노즐에서 분사되는 액적은 노즐 입구에서 증발하고 유동 변화가 심할 것으로 예측되고, 벽면에서 격

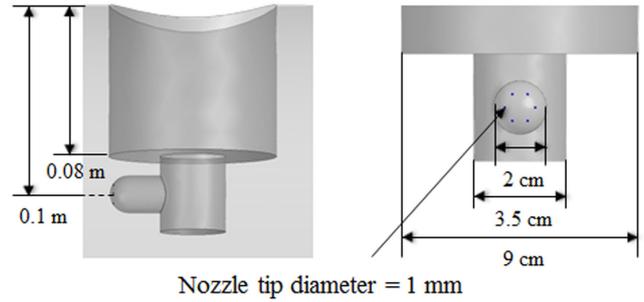


Figure 2. Location of nozzle tips.

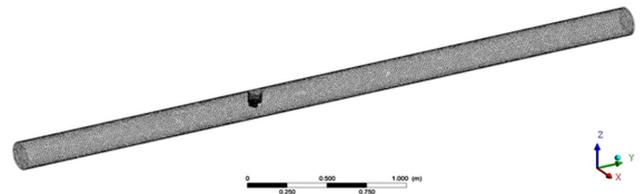


Figure 3. Mesh of the SNCR reactor.

자가 클 경우 한 격자에서 속도를 0 m s^{-1} 로 나타내기 때문에 매우 큰 오차가 발생한다. 따라서 형상의 벽면에 얇은 프리즘 격자를 생성하여 벽면에서의 점착조건에 의한 속도변화에 대한 해석을 시도했다. 실험실 규모의 장치의 격자점(node)은 62,928개이며, 격자의 수(element)는 334,578개로 구성된다. 이때 격자의 품질(quality)은 격자의 비대칭도(skewness)로 나타낼 수 있는데 비대칭도는 격자 크기 분포가 좌우로 치우친 정도를 나타낸다. 비대칭도는 0 ~ 1 사이의 값으로 0에 가까울수록 격자의 품질이 좋다고 할 수 있다[14]. 해석에 사용된 격자 비대칭도는 0.213으로 품질이 우수하다고 판단된다. 전산해석에 활용된 격자는 Figure 3에 나타내었다.

2.2. 경계조건

연구에서 활용된 실험실 규모의 선택적 무촉매 환원장치의 입구로 유입되는 가스는 연소 후 가스의 조성이 필요하지만 전술한 바와 같이 선행연구에서 실험 시에 사용하였던 가스 유량과 그 조성을 활용하였다. 입구에서의 경계조건과 노즐 입구에서의 분사 공기와 분사되는 용소 용액에 대한 경계조

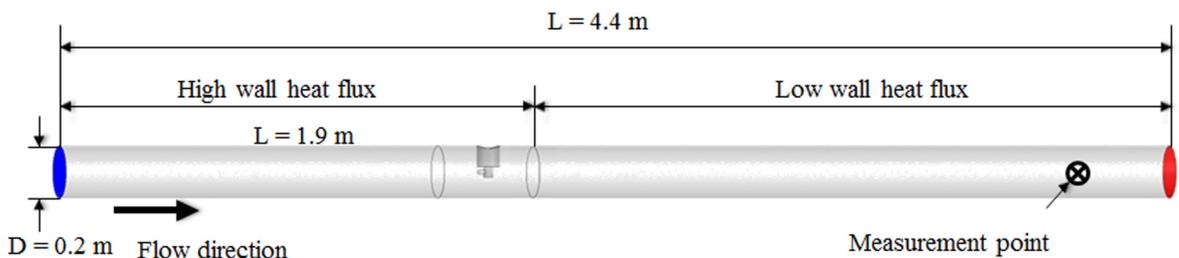


Figure 1. Schematic of the SNCR reactor.

Table 1. Boundary condition at main inlet

Species	L min ⁻¹	Mass fraction	g s ⁻¹	Temperature
CO ₂		0.097100	3.371312	1346 K
O ₂		0.105500	3.662960	
N ₂		0.746015	25.901641	
NO		0.000385	0.013367	
Total	1,633.1	1	34.72	

Table 2. Boundary condition of atomizing air at nozzle tip

Species	L min ⁻¹	Mole fraction	Mass fraction	g s ⁻¹	Temperature
O ₂	8.4	0.21	0.23	0.197	300 K
N ₂	31.6	0.79	0.77	0.661	
Total	40	1	1	0.858	

Table 3. Boundary condition of 40% urea solution at nozzle tip

Species	mL min ⁻¹	mass fraction	g s ⁻¹	Temperature
H ₂ O	38.80	0.9700	0.647	300 K
HNCO	0.86	0.0215	0.014	
NH ₃	0.34	0.0085	0.006	
Total	40	1	0.667	

건은 각각 Table 1, 2 및 3에 나타내었다. 이 표의 질량 유량 (g s⁻¹)은 Fluent에서 입력하는 경계조건으로 사용된다.

본 논문에서는 선택적 무촉매 환원장치 내부에서 유입된 유체가 노즐 팁에서 분사되는 요소수와 혼합하고 반응되며 반응의 진행은 요소수 팁의 위치 5 cm 전단에서 측정되는 반응온도(reaction temperature)가 반응에 높은 영향을 기여하고 있음을 예측하고, 이 온도를 조절하기 위해 벽면에서 열손실량을 조절한다. 온도 조절에 사용된 열손실 조건은 Table 4에 각각 나타내었다.

출구 쪽에 선행연구에서 사용된 전단으로부터 4.2 m 위치에 측정점을 설정하여 그 면에서의 평균 농도분포를 파악하여 가스처리효율을 파악한다.

Table 4. Boundary condition of heat loss at each wall

Location of heat loss		Estimated reaction temperature [°C]
High heat loss wall (0 ~ 1.9 m) [W m ⁻²]	Low heat loss wall (1.9 ~ 4.4 m) [W m ⁻²]	
280	140	1,010
2,800	1,400	1,000
5,600	2,800	980
11,200	5,600	940
16,800	8,400	850
28,000	14,000	700

Table 5. Boundary condition of 40% urea solution and NaOH 1% at Nozzle tip

Species	mL min ⁻¹	Mass fraction	g s ⁻¹	Temperature
H ₂ O	38.76	0.9600	0.640	300 K
HNCO	0.86	0.0215	0.014	
NH ₃	0.34	0.0085	0.006	
NaOH	0.04	0.0100	0.007	
Total	40	1	0.667	

또한 요소수에 가성소다를 첨가에 대해 Table 3의 암모니아와 이소시아산(HNCO)의 조성을 그대로 이용하되 가성소다를 1, 2, 3, 4 그리고 5%로 첨가하고 물을 동일 질량을 제어하여 총질량을 유지한다. 1%일 때 조성을 Table 5에 나타내었으며 동일한 방법으로 다른 첨가량에 대해 적용된다.

2.3. 모델

선택적 무촉매 환원장치 내부에서 유체와 액적의 다상 유동을 나타내기 위해 오일러리안-라그랑지안(Eulerian-Lagrangian) 해석 기법을 사용하였다[14]. 이 기법에서 유체는 연속체로 간주하여 유동장에 대해 오일러리안(Eulerian)해석 기법으로 해석되며, 비연속적으로 주입되는 액적에 대해서는 라그랑지안(Lagrangian) 해석기법으로 각 액적을 추적하여 액적의 유동을 예측했다. 본 전산해석에 사용된 지배방정식은 연속방정식, 운동량방정식, 에너지방정식, 난류운동에너지방정식 및 화학종 보존방정식으로 Patankar [11]에서 서술된 일반 지배방정식을 따른다. 본 연구에서는 이 지배방정식들을 각자 적용하는 Fluent 내부에 설정되어진 해석 모델을 사용하였으며 각 모델로는 난류현상을 해석하기 위한 standard *k-ε* 모델, 유체와 액적의 다상 유동에 대한 이산유동모델과 장치 내부의 환원반응을 모사하기위한 EDC모델을 사용하였다 따라서 다음 하위 절에서 각 지배방정식에 따르는 Fluent 내 설정된 해석모델에 대해 설명하도록 하겠다.

2.3.1. 난류모델

점성 유체의 흐름은 무차원수인 레이놀즈수를 기준으로 하여 흐름이 층류 또는 난류로 나타낸다. 레이놀즈수는 다음과 같다.

$$Re = \frac{\rho u D}{\mu} \tag{1}$$

여기서 μ 는 유체의 점성, ρ 는 유체의 밀도, U 는 유체의 속도, D 는 유체가 흐르는 관의 직경이다. 또한 내부유동인 경우, 레이놀즈수가 4,400 이상일 경우 흐름이 난류유동이 된다[15]. 본 논문에서는 냉각기에서 평균 입구속도는 0.866 m s⁻¹이며 입구직경이 0.2 m이다. 내부유체를 공기로 가정하여 계산 할 때 레이놀즈수는 약 12,437을 가짐으로 해석대상의 흐름은 난류유동이 된다.

본 논문에서 장치 내부의 난류는 $k-\epsilon$ 모델을 통해 해석된다. $k-\epsilon$ 모델은 가장 널리 적용되는 난류 모델 중 하나로 관내 유동 해석에서 적합한 것으로 알려져 있으며 복잡한 흐름에 대해서 정확한 예측이 가능한 모델이다[12,14]. 여기서, k 는 난류운동에너지로 속도 변동의 차이로 정의되며 차원은 $L^2 T^{-2}$ 이다. ϵ 은 난류에디소실로 정의되고 차원은 $L^2 T^{-3}$ 이다. $k-\epsilon$ 모델은 방정식에 두 개의 새로운 변수를 나타낸다. 먼저 연속 방정식과 운동량 방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_i U_j) = -\frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_M \quad (3)$$

여기서 S_M 은 체적력의 합이며, μ_{eff} 는 난류에 대한 유효 점성도, p' 는 변형된 압력으로 다음과 같이 정의된다.

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho k + \frac{2}{3} \mu_{eff} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \quad (4)$$

Equation (4)에서 사용된 난류에 대한 유효점성도 μ_{eff} 는 다음과 같이 정의된다.

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (5)$$

여기서 μ_t 는 난류점성으로 $k-\epsilon$ 모델에서 난류점성이 난류운동에너지 및 난류에디소실과 다음과 같은 관계를 가진다고 가정하였다.

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon} \quad (6)$$

C_μ 는 상수이다. k 와 ϵ 값은 각각에 대한 미분 수송방정식으로 직접 나타내었다.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho \epsilon + P_{kb} \quad (7)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j \epsilon) =$$

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \rho \epsilon + C_{\epsilon 1} P_{\epsilon b}) \quad (8)$$

여기서 $C_{\epsilon 1}$, $C_{\epsilon 2}$, σ_k 와 σ_ϵ 는 상수이다. P_{kb} 와 $P_{\epsilon b}$ 는 부력의 영

향을 나타낸다. P_k 는 점성력에 의한 난류 증가로 다음과 같이 나타낸다.

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_k}{\partial x_j} \left(3 \mu_t \frac{\partial U_k}{\partial x_k} + \rho k \right) \quad (9)$$

모델상수는 실험적인 값으로 가장 널리 사용되는 아래의 값을 적용하여 해석하였다.

$$C_\mu = 0.09, C_{\epsilon 1} = 1.44, C_{\epsilon 2} = 1.92, \sigma_k = 1.0, \sigma_\epsilon = 1.3$$

2.3.2. 이산유동모델

선택형 무촉매 환원장치에서 입구로 유입되는 유체와 노즐로 분사되는 액적 및 분사공기의 유량, 직경 및 속도와 같은 초기 조건을 결정하기 위해 이산유동모델(Discrete Phase Model)을 사용하였다. 전술한 바와 같이 비연속상인 액적을 라그랑지안 해석기법으로 Navier-Stokes 방정식에 따라 계산된 유동장을 통해 궤적을 추적하였다. 이 모델에서 액적은 높은 질량 부하를 가질지라도 낮은 부피분율을 가진다는 가정 하에 해석된다.

2.3.2.1. 입자운동이론

라그랑지안 해석기법을 이용한 해석으로 액적에 대한 힘의 평형을 적분하여 비연속상인 액적의 궤적을 예측한다. 이 힘의 평형은 액적에 적용되는 힘이 액적의 관성과 동일하다고 가정하고 다음과 같이 나타낸다.

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(u - u_p) + \frac{g_x(\rho_p + \rho)}{\rho_p} + F_x \quad (10)$$

여기서, F_x 는 추가적인 가속도(force/unit droplet mass)향으로 액적 주변의 유체 가속을 위해 필요한 가상 질량의 힘으로써 본 해석에서는 고려되지 않는다. g_x 는 중력가속도, ρ_p 와 ρ 는 각각 액적과 유체의 밀도이며, u_p 와 u 는 각각 액적과 유체의 속도이다[16]. $F_D(u - u_p)$ 는 액적의 단위 질량당 항력으로 다음과 같이 계산된다.

$$F_D = \frac{18 \mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24} \quad (11)$$

d_p 는 액적의 직경, μ 는 유체의 점성, C_D 는 항력계수, Re 는 레이놀즈수이다.

2.3.2.2 항력계수이론

오일러리안-라그랑지안 해석기법에 사용되는 항력계수 C_D 는 액적의 형태에 따라 그 값이 달라지며 구형 액적의 항력계수는 다음과 같다.

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (12)$$

여기서, a_1 , a_2 그리고 a_3 는 레이놀즈수에 따라 결정되는 상수항이다. 비구형 액적의 경우 항력계수는 다음과 같다.

$$C_D = \frac{24}{Re_{sph}}(1 + b_1 Re_{sph}^{1/2}) + \frac{b_3 Re_{sph}}{b_4 + Re_{sph}} \quad (13)$$

여기서,

$$\begin{aligned} b_1 &= \exp(2.3288 - 6.4581 \phi + 2.4486 \phi^2) \\ b_2 &= 0.0964 + 0.5565 \phi \\ b_3 &= \exp(4.905 - 13.8944 \phi + 18.4222 \phi^2 - 10.2599 \phi^3) \\ b_4 &= \exp(1.4681 + 12.2584 \phi - 20.7322 \phi^2 + 15.8855 \phi^3) \end{aligned}$$

여기서 형상계수인 ϕ 는 다음으로 정의된다.

$$\phi = \frac{s_p}{S_p} \quad (14)$$

여기서 s_p 는 비구형액적과 동일한 부피를 갖는 구체의 표면적이며, S_p 는 액적의 실제 표면적이다. Re_{sph} 는 동일한 부피를 갖는 구체의 직경을 이용해 계산된다. 하지만 본 연구에서는 구형 액적으로 가정하여 계산하므로 Equation (12)가 이용되었다.

2.3.3. 난류유동 내의 반응에 대한 EDC 모델

난류유동에 대한 모델인자는 화학반응 진행도에 따라 영향을 받기 때문에, 난류혼합과 반응의 상호작용에 관한 모델식은 전산해석에 있어 많은 어려움이 있다[17]. 선택적 무촉매 환원장치에서 화학식에 관련된 반응속도는 난류혼합속도와 비슷한 범위를 갖는데 난류유동의 혼합은 화학반응속도에 상당한 영향을 줄 수 있다[18]. 요소에 의한 탈질효과와 같은 다중 화학 반응식을 포함하는 전산해석모델 구축을 위해, EDC (eddy-dissipation concept) 모델이 선택적 무촉매 환원장치의 전산해석 모델링에서 가장 많이 사용되어왔다[12,17,19]. EDC 모델의 핵심은 난류반응유동을 반응미세구조(fine structure)와 주변유체(surrounding fluid) 두 부분으로 나누어 해석한다[20]. 모든 반응은 교환식반응기에서 이루어지는 것으로 가정된 반응미세구조 내부에서 일어난다고 가정하고, 반응미세구조로부터 주변유체로 질량 및 에너지가 전달된다.

반응미세구조의 길이비율(ξ^*)은 다음 식으로 구한다[20].

$$\xi^* = C_\xi \left(\frac{\nu \epsilon}{k_i^2} \right)^{1/4} \quad (15)$$

여기서 ξ^* 는 반응미세구조에서의 양을 표현하는 것이며, C_ξ (= 2.14)는 부피분율상수, ν 는 동점성계수(dynamic viscosity)

이다. 반응미세구조의 부피분율은 ξ^{*3} 를 이용하여 구한다. 반응미세구조 내의 평균체류시간은 다음 식으로 정의된다.

$$\tau^* = C_{tua} \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (16)$$

여기서 C_τ (= 0.41)는 시간상수이다. Arrhenius 식으로 정의된 반응은 상기 식에서 정의된 시간 동안 일어난다. 본 연구에서 사용한 반응들은 Arrhenius 속도 식은 다음과 같이 정의된다[21].

$$k = AT^b e^{-E_a/RT} \quad (17)$$

여기서 A 는 전 지수인자(pre-exponent factor), b 는 온도의존지수(temperature exponential), E_a 는 활성화 에너지(activation energy)이며, R 은 기체상수($R = 8.3144 \text{ kJ kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)이다. 각 반응에 사용된 Equation (17)에서의 상수 값은 Table 6에 나타내었다.

Table 6의 1 ~ 7번 반응식은 요소만 사용하여 SNCR을 가동했을 때 발생하는 화학 반응식이며, 이에 가성소다를 첨가할 경우, 1 ~ 30번 반응식 모두 사용된다[21,22]. 요소수만을 첨가한 SNCR 내 반응 메커니즘은 Brouwer et al. [21], 가성소다를 첨가함에 따른 SNCR 내 반응 메커니즘은 Zamansky et al. [22]을 통해 설명되었다. Table 6의 암모니아와 일산화질소에 대한 반응속도 식은 다음과 같이 사용된다.

$$r_1 \equiv \frac{d[NH_3]}{dt} = -k_1[NH_3][NO] - k_2[NH_3] \quad (18)$$

여기서 OH 라디칼 농도는 평형에 도달하였다고 가정하여 OH 농도의 영향은 무시되었으며[21], 산소는 과잉으로 유입되므로 Table 6의 두 번째 반응식을 1차 기초반응으로 간주하였다.

3. 결과 및 고찰

본 논문에서는 전산해석을 통해 선행연구에서 진행된 실험실규모의 선택적 무촉매 환원장치의 실험을 재현했다. 전산해석에 사용한 경계조건은 Table 1 ~ 5에서 보여주고 있으며 내부의 반응은 Table 6에서 보여주고 있다. 전산해석은 첫 번째로 요소만을 사용한 탈질 저감효과에 대해 반응온도를 달리하여 해석 결과를 얻었다. 두 번째로 요소가 포함된 요소수에 대해 가성소다를 1%에서 5%까지 달리 첨가하여 반응온도에 따른 해석결과를 얻었다. 각 해석 결과는 입구로부터 4.2 m 지점에 면(plane)을 형성하여 그 면에서 각 물질의 평균 농도를 얻었다. 모든 경우에 대하여 내부에서 흐르는 유체들의 질량 유량이 같으므로 형상 전체에 걸쳐 속도 분포의 형태는 거의 일치한다고 볼 수 있다. 그러나 벽면에서 열손실 때문에 유체가 열팽창으로 인해 낮은 쪽으로 달라질 수 있음을 감안해야 하며, 대표적으로 요소만을 사용한 반응온도 940 °C

Table 6. Reaction list

No	Reaction	Pre-exponent (A) $\left[\frac{m^2}{m^2 S^{-1} K^{-1} kmol^{-1}} \right]$	Temperature (b)	Activation energy (Ea) [J kmol ⁻¹]
1	$NH_3 + NO \rightarrow N_2 + H_2O + H$	4.24×10^5	5.3	3.5×10^8
2	$NH_3 + O_2 \rightarrow NO + H_2O + H$	350	7.65	5.24×10^8
3	$HNCO + M \rightarrow H + NCO + M$	2.4×10^{11}	0.85	2.85×10^8
4	$NCO + NO \rightarrow N_2O + CO$	1.0×10^{10}	0	-1.63×10^6
5	$NCO + OH \rightarrow NO + CO + H$	1.0×10^{10}	0	0
6	$N_2O + OH \rightarrow N_2 + O_2 + H$	2.0×10^9	0	4.19×10^7
7	$N_2O + M \rightarrow N_2 + O + M$	6.9×10^{20}	-2.5	2.71×10^8
8	$NaOH + H \rightarrow Na + H_2O$	1.0×10^{10}	0	8.24×10^6
9	$NaO_2 + CO \rightarrow NaO + CO_2$	1.0×10^{11}	0	0
10	$NaO + OH \rightarrow Na + HO_2$	3.0×10^{10}	0	0
11	$NaO + H_2O \rightarrow NaOH + OH$	1.3×10^{10}	0	0
12	$NaO + NO \rightarrow Na + NO_2$	9.0×10^{10}	0	0
13	$NaO + CO \rightarrow Na + CO_2$	1.0×10^{11}	0	0
14	$Na + O_2 + M \rightarrow NaO_2 + M$	1.7×10^{18}	-1.3	0
15	$Na + N_2O \rightarrow NaO + N_2$	1.7×10^{11}	0	1.32×10^7
16	$NaO_2 + H \rightarrow NaOH + O$	1.0×10^{11}	0	0
17	$NaO_2 + H \rightarrow NaO + OH$	5.0×10^{11}	0	0
18	$NaO_2 + H \rightarrow HO_2 + Na$	2.0×10^{11}	0	0
19	$NaO_2 + O \rightarrow NaO + O_2$	1.0×10^{11}	0	0
20	$NaO_2 + OH \rightarrow NaOH + O_2$	2.0×10^{11}	0	0
21	$NaO + H \rightarrow Na + OH$	2.0×10^{11}	0	0
22	$NaO + O \rightarrow Na + O_2$	2.2×10^{11}	0	0
23	$NaO + OH \rightarrow NaOH + O$	2.0×10^{10}	0	0
24	$NaO + HO_2 \rightarrow NaOH + O_2$	5.0×10^{10}	0	0
25	$NaO + HO_2 \rightarrow NaO_2 + OH$	5.0×10^{10}	0	0
26	$NaO + H_2 \rightarrow NaOH + H$	1.6×10^{10}	0	0
27	$NaO + H_2 \rightarrow Na + H_2O$	3.1×10^9	0	0
28	$NaO + NH_3 \rightarrow NaOH + NH_2$	5.0×10^{10}	0	0
29	$Na + OH + M \rightarrow NaOH + M$	1.8×10^{18}	-1.0	0
30	$Na + HO_2 \rightarrow NaOH + O$	1.0×10^{11}	0	0

인 경우 노즐 주변의 속도 분포를 Figure 4에서 보여주고 있으며, 동일 조건에서의 온도 분포를 Figure 5에서 나타내고, Figure 6에 일산화질소의 농도 분포를 나타내었다.

선행연구에서 실험은 비교적 넓은 온도 범위($825 \text{ }^\circ\text{C} \leq T_R \leq 1025 \text{ }^\circ\text{C}$)에서 수행되었으나 본 연구에서 전산해석을 이용한 모사는 6가지 다른 가성소다 조성과 5가지 다른 온도에 대하여 총 30가지 실험조건에서만 진행되었다. 전산해석 모사에서 반응기의 벽면에서의 열손실 조건(Table 4)과 노즐 입구에

서 액적 분사 조건(Table 3, 5)을 다르게 설정하면서 30가지 실험조건에서 모델링된다. 그러나 이 실험조건들에는 똑같은 반응속도식(Table 6), 입구에서의 경계조건, 그리고 난류모델을 사용하였다.

다음은 전술한 30가지 실험조건에 대하여 질소산화물 저감효율과 미반응 암모니아 발생량을 실험값과 전산해석을 통한 모사값을 비교한다. 그러나 선행연구에서는 넓은 온도범위에 비해 요소만 사용한 경우와 가성소다가 1% 첨가된 개량

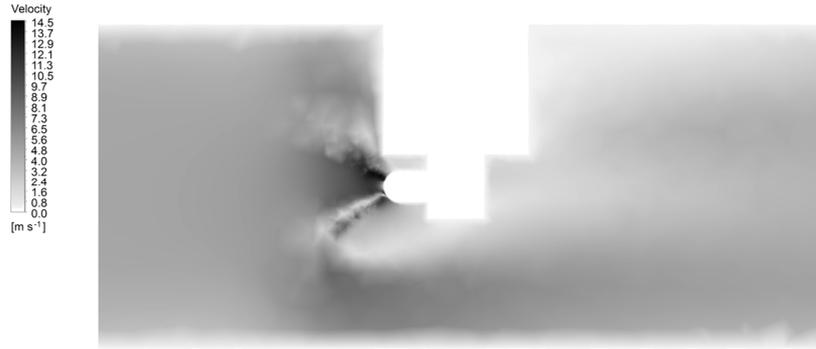


Figure 4. Velocity distribution near the nozzle.

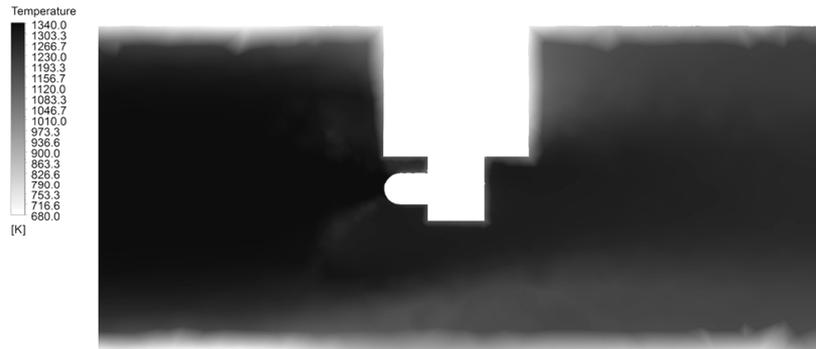


Figure 5. Temperature distribution near the nozzle.

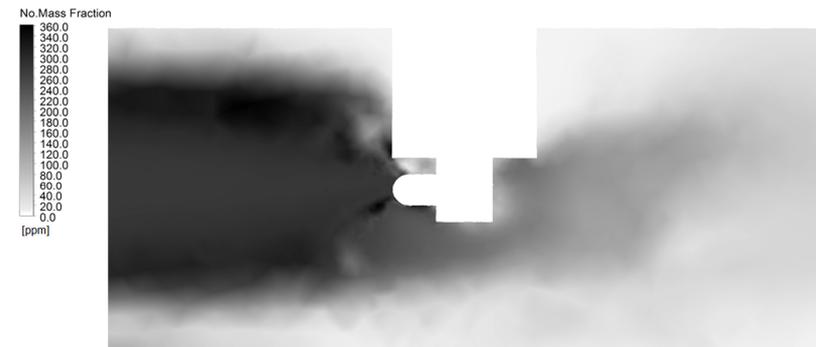


Figure 6. NO concentration distribution near the nozzle.

환원제에 대한 실험만이 진행되었으므로 본 연구에서는 이 두 경우에 대한 비교를 통해 신뢰성을 얻고 가성소다가 첨가된 양을 늘렸을 때의 결과를 예측하도록 하겠다.

3.1. 질소산화물 저감효율

실제 공정에서 선택적 무촉매 환원장치는 약 30 ~ 60%의 질소산화물 저감효과를 달성할 수 있으며, 보다 작은 실험실 규모에서는 이보다 조금 높은 질소산화물 저감효율을 보인다 [23]. Figure 7은 요소용액만을 사용할 때 반응온도와 질소산화물 농도에 대한 실험값과 전산해석 모사값을 보여주며, Figure 8에서는 가성소다 1%를 첨가한 개량환원제를 사용할

때 반응온도와 질소산화물 농도에 대한 실험값과 전산해석 모사값을 비교하고 있다.

Figure 7과 8을 통해 실험실 규모의 선택적 무촉매 환원장치에서 최적 온도는 약 940 °C로 보이며, 이는 노즐을 통한 분사 용액이 보다 더 높은 온도 영역 까지 침투할 수 있으므로 실제 최적온도는 940 °C보다 약간 높은 온도일 것으로 예측할 수 있다. 실험 결과 약 80%의 최대 질소산화물 저감효율을 보인다. 이는 전산해석을 통한 모사 값에서도 잘 예측되고 있다. Table 7을 통해 각 조건에서 실험 값, 모사 값, 그리고 실험값과 모사 값의 차이를 보여주고 있다.

Table 7에서 실험값과 모사 값의 차이는 최대 18.9% 정도

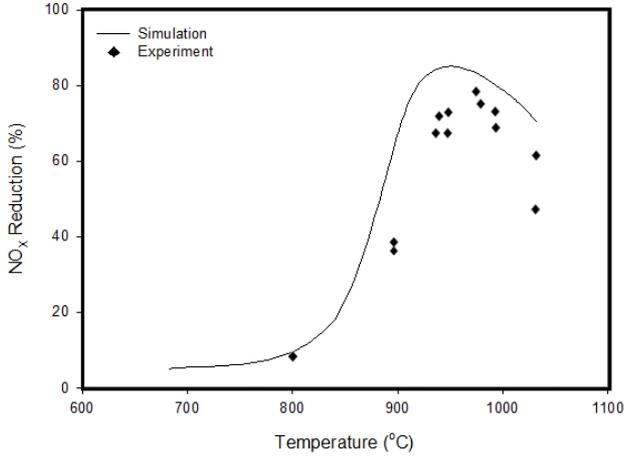


Figure 7. Reduction of NO_x with respect to temperature at urea only.

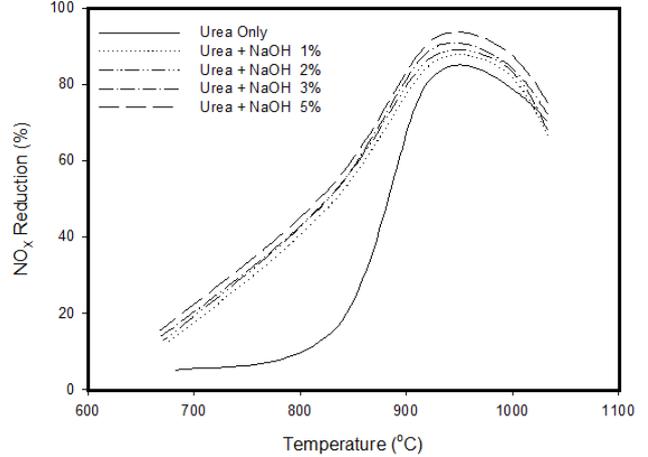


Figure 9. Reduction of NO_x with respect to temperature and NaOH percentage.

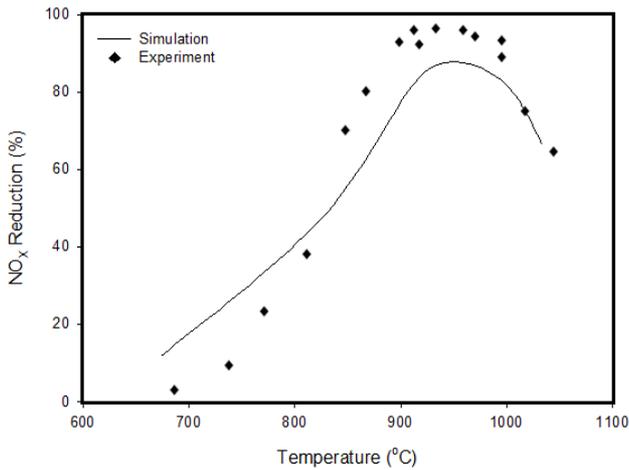


Figure 8. Reduction of NO_x with respect to temperature at urea and NaOH 1%.

Table 7. Comparison of NO_x reduction percentage between experimental and CFD at two different NaOH concentration and five different heat loss

High heat loss	Reductant	Experiment (%)	CFD (%)	Difference (%)
2800	urea only	62.3	70.5	8.2
	urea + NaOH	68.4	66.7	1.7
5600	urea only	71.5	79.8	8.3
	urea + NaOH	87.3	82.9	4.4
11200	urea only	59.4	78.3	18.9
	urea + NaOH	90	85.3	4.7
16800	urea only	17.3	18.1	0.8
	urea + NaOH	57.1	50.9	6.2
28000	urea only	3.5	5.1	1.6
	urea + NaOH	4.2	11.9	7.7

의 차이를 보이며, 대체적으로 10% 내의 차이가 나타나는 것을 알 수 있으며 대체적으로 모사 값은 실험값을 대체적으로 잘 예측하고 있음을 알 수 있다. 따라서 가성소다의 유량을 늘렸을 때 실제 실험 시 비슷한 값을 얻을 수 있음을 예측할 수 있다. 가성소다의 유량에 따른 질소산화물 저감효과는 Figure 9를 통해 확인할 수 있다.

Figure 9에서 가성소다를 첨가했을 때 높은 질소산화물 저감효율을 갖는 것을 알 수 있으며, 가성소다의 양을 늘림에 따라서는 적지만 질소산화물 저감 효율의 상승효과를 갖는 것을 확인할 수 있다. 또한 질소산화물 저감효율 70%를 기준으로 했을 때 활용 가능한 온도범위가 요소수만 사용했을 때 약 910 ~ 1030 °C의 범위에서 가성소다를 사용했을 때 최대 약 870 ~ 1050 °C의 범위로 넓어지고 있음을 알 수 있다.

3.2. 미반응 암모니아 방출량

연소로의 규격과 환경적인 측면에서 선택적 무촉매 환원장치 미반응 암모니아 방출량은 최소화 되어야 한다[17]. Figure 10은 요소용액만을 사용할 때 반응온도와 암모니아 농

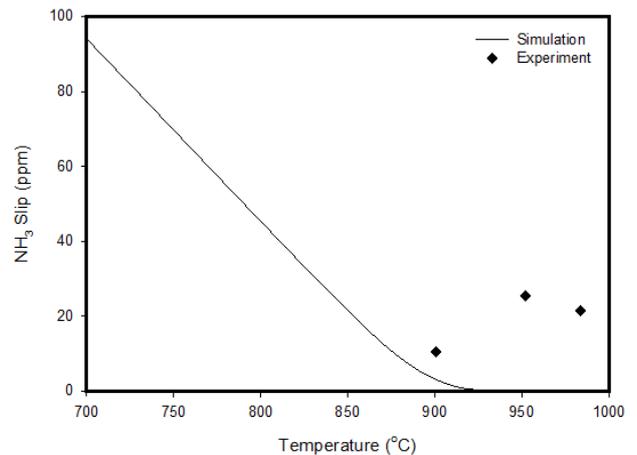


Figure 10. NH₃ slip with respect to temperature at urea only.

도에 대한 실험값과 전산해석 모사 값을 보여주고 있다.

미반응 암모니아의 경우 형상에 주입된 암모니아 양이 모든 모사 조건에 대해 같으므로 저온영역에서는 주입된 양보다 많아지지 않는 한도에서 유사한 결과를 보인다. 이 결과는 가성소다를 첨가했을 때에도 유사한 결과를 갖는다.

3.3. 아산화질소 발생량

선택적 무촉매 환원장치에서 고온 영역에서 질소산화물을 질소로만 환원하는 것이 아니라 일부 질소산화물은 반응에 의해 아산화질소를 발생시킨다. 전술한 바와 같이 아산화질소는 지구온난화 유발 물질로서 배출 저감이 요구되어지고 있다. Figure 11은 요소용액만을 사용할 때 반응온도와 아산화질소 농도에 대한 실험값과 전산해석 모사 값을 보여주며, Figure 12에서는 가성소다 1%를 첨가한 개량환원제를 사용할 때 반응온도와 아산화질소 농도에 대한 실험 값과 전산해석 모사 값을 비교하고 있다.

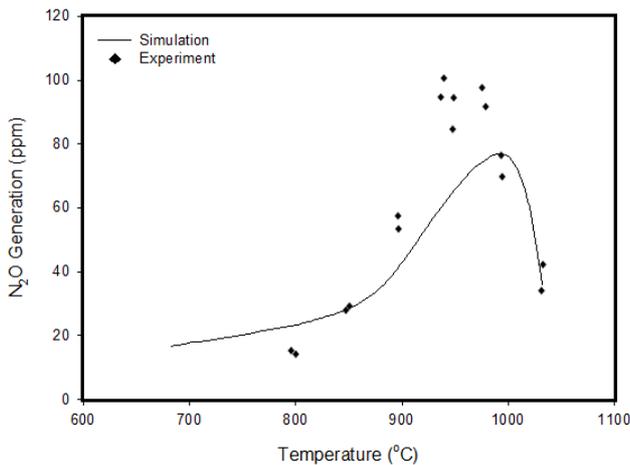


Figure 11. Generation of N₂O with respect to temperature at urea only.

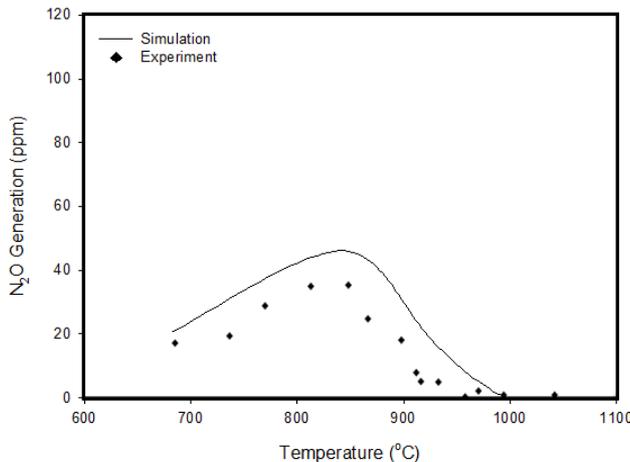


Figure 12. Generation of N₂O with respect to temperature at urea and NaOH 1%.

Figure 11을 통해 실험 결과 질소산화물 저감효과가 좋았던 영역에서 아산화질소의 발생량이 가장 높아지는 것을 확인할 수 있었다. 이는 질소산화물 저감에는 좋은 조건이지만 아산화질소를 고려할 때 비효율적인 것으로 판단되어진다. 그러나 Figure 12를 통해 가성소다를 첨가할 시에 질소산화물 저감효과가 좋은 고온 영역에서 아산화질소 발생량이 눈에 띄게 낮아진 것을 확인할 수 있으며 이는 전술한 관점에서 매우 효율적이며 가성소다를 포함한 개량환원제가 높은 질소산화물 저감효과와 동시에 낮은 아산화질소 발생량을 얻을 수 있는 환원제로서 매우 적절함을 보여준다. 이는 전산해석을 통한 모사 값에서도 잘 예측되고 있다.

4. 결론

본 연구에서는 선행연구에서 진행된 실험실 규모의 선택적 무촉매 환원장치에서 온도와 가성소다 첨가량에 따른 질소산화물 저감효율을 얻어지는 실험에 대해 전산유체역학을 통해 동일 조건에서 실험하였다. 난류모델 및 액적모델 등이 활용된 3차원 난류반응유동 전산해석 모델을 구축하였으며 이러한 전산해석 모델에서 30개의 난류반응속도 식은 질소산화물 저감효율, 미반응 암모니아 배출량과 아산화질소 발생량을 예측하기 위해 사용되었다. 해석결과, 기존의 요소수만 사용하는 선택적 무촉매 환원장치에 비해 가성소다가 첨가된 개량환원제를 사용할 경우, 높은 질소산화물 저감효과와 동시에 낮은 아산화질소 발생량을 얻을 수 있었다. 또한 질소산화물 저감효율, 미반응 암모니아 배출량, 그리고 아산화질소 발생량의 측면에서 반응온도와 가성소다 첨가에 따른 실험결과와 전산해석 모사결과를 비교하였을 때 만족할 만한 수준에서 일치함을 확인할 수 있었다. 따라서 실험에서 진행되지 않은 가성소다 첨가량을 증가시켜 가성소다 첨가량에 따른 질소산화물의 저감효과를 확인할 수 있었으며, 낮은 폭이지만 가성소다의 양을 증가시키에 따라 질소산화물 저감효과가 높아지는 것을 확인할 수 있었다.

References

1. WHO (World Health Organization) "Air Quality Guidelines for Particulate Matter, Ozone, Nitrogen Dioxide and Sulfur Dioxide," World Health Organization, 2006.
2. Pérez-Ramírez, J., Kapteijn, F., Schöffel, K., and Moulijn, J. A., "Formation and Control of N₂O in Nitric Acid Production: Where Do we Stand Today?," *Appl. Catal. B Environ.*, **44**(2), 117-151 (2003).
3. Topsoe, N. Y., Topsoe, H., and Dumesic, J. A., "Vanadia/Titania Catalysts for Selective Catalytic Reduction (SCR) of Nitric-Oxide by Ammonia: I. Combined Temperature-Programmed in situ FTIR and On-line Mass-Spectroscopy Studies," *J. Catal.*, **151**(1), 226-240 (1995).
4. Leckner, B., Karisson, M., Dam-Johansen, K., Weinell, C. E., Kilpinen, P., and Hupa, M., "Influence of Additives on

- Selective Non-catalytic Reduction of NO with NH₃ in Circulating Fluidized Bed Boilers,” *Ind. & Eng. Chem. Res.*, **30**(11), 2396-2404 (1991).
5. Busca, G., Lietti, L., Ramis, G., and Berti, F., “Chemical and Mechanistic Aspects of Selective Catalytic Reduction of NO_x by Ammonia over Catalysts,” *A Rev. Appl. Catal. B Environ.*, **18**(1), 1-36 (1988).
 6. Long, R. Q., Yang, R. T., and Chang, R., “Low Temperature Selective Catalytic Reduction of NO and NH₃ over Fe-, Mn based catalysts,” *Chem. Commun.*, **7**(5), 452-453 (2002).
 7. Jødal, M., Nielsen, C., Hulgaard, T., and Dam-Johansen, K. “Pilot-Scale Experiments with Ammonia and Urea as Reductants in Selective Non-Catalytic Reduction of Nitric Oxide,” *Symposium (International) on Combustion*, **23**(1), 237-243 (1991).
 8. Mahmoudi, S., Baeyens, J., and Seville, J. P., “NO_x Formation and Selective Non-Catalytic Reduction (SNCR) in a Fluidized Bed Combustor of Biomass,” *Biomass and Bioenergy*, **34**(9), 1393-1409 (2010).
 9. Jacob, M., Bjarne, M., Kim, C., and Thomas, H. C., “Life Cycle Assessment of Selective Non-Catalytic Reduction (SNCR) of Nitrous Oxides in a Full-Scale Municipal Solid Waste Incinerator,” *Waste Manage.*, **31**(6), 1184-1193 (2011).
 10. Lu, Z. M., and Lu, J. D., “Influences of O₂ Concentration on NO Reduction and N₂O Formation in Thermal DeNO_x Process,” *Combustion and Flame*, **156**(6), 1303-1315 (2009).
 11. Patankar, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, 1st ed., McGraw-Hill, New York, Chap3. 1980.
 12. ANSYS, ANSYS Fluent User's Guide, ANSYS Inc. 2013.
 13. Nguyen, T. D., Lim, Y. I., Kim, S. J., Eom, W. H., and Yoo, K. S., “Experiment and Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulation of Urea-Based Selective Noncatalytic Reduction (SNCR) in a Pilot-Scale Flow Reactor,” *Energy and Fuels*, **22**(6), 3864-3876 (2008).
 14. ANSYS, ANSYS Fluent Theory Guide, ANSYS Inc. 2013.
 15. Wark, K., Warner, C. F., and Davis, W. T., Air Pollution: Its Origin and Control, 3rd ed., Prentice Hall, New York, Chap 5. 1998.
 16. Crowe, C. T., Schwarzkopf, J. D., Sommerfeld, M., and Tsuji, Y., Multiphase Flow with Droplets and Particles, 2nd ed., CRC Press, Boca Ration, USA, Chap 8. pp 235-258 (2011).
 17. Tayyeb Javed, M., Irfana, N., and Gibbs, B. M., “Control of Combustion-generated Nitrogen Oxides by Selective Non-catalytic Reduction,” *J. Environ. Manage.*, **83**(3), 251-289 (2007).
 18. Cremer, M. A., Montgomery, C. J., Wang, D. H., Heap, M. P., and Chen J. Y., “Development and Implementation of Reduced Chemistry for Computational Fluid Dynamics Modeling of Selective Non-Catalytic Reduction,” *Proc. Combust. Inst.*, **28**, 2427-2434(2000).
 19. Han, X., Wei, X., Schnell, U., and Hein, K. R. G., “Detailed Modeling of Hybrid Reburn/SNCR Processes for NO_x Reduction in Coal-fired Furnaces,” *Combust. and Flame*, **132** (3), 374-386 (2003).
 20. Gran, I. R., and Magnussen, B. F., “A Numerical Study of a Bluff-Body Stabilized Diffusion Flame. Part 1. Influence of Turbulence Modeling and Boundary Conditions,” *Combust. Sci. and Technol.*, **119**, 191-201(1996).
 21. Brouwer, J., Heap, M. P., Pershing, D. W., and Smith, P. J., “A Model for Prediction of Selective Non-catalytic Reduction of Nitrogen Oxides by Ammonia, Urea, and Cyanuric Acid with Mixing Limitations in the Presence of CO,” Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Italy, 2117-2124 (1996).
 22. Zamansky, V. M., Lissianski, V. V., Maly, P. M., Ho, L., Rusli, D., and Gardiner, W. C., “Reactions of Sodium Species in the Promoted SNCR Process,” *Combust. and Flame*, **117**(4), 821-831 (1999).
 23. Wendt, J. O. L., Linak, W. P., Groff, P. W., and Srivastava, R. K., “Hybrid SNCR-SCR Technologies for NO_x Control: Modeling and Experiment,” *AIChE J.*, **47**(11), 2603-2617 (2001).