

# بررسی تأثیر سینتیک شیمیایی در پیش بینی کاهش آلاینده NO<sub>x</sub> با

## روش کاهش انتخابی غیر کاتالیستی

مسعود شفا<sup>۱\*</sup>، کیومرث مظاهری<sup>۲\*\*</sup> و علیرضا علی پور<sup>۳\*\*\*</sup>

۱- دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده مهندسی مکانیک

۲- دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده مهندسی مکانیک

۳- دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده مهندسی مکانیک

کوره‌های صنعتی و نیروگاه‌ها با مصرف قابل توجه سوخت‌های فسیلی، نقش عمده‌ای در تولید آلاینده‌های هوا دارند. اکسیدهای نیتروژن از جمله این آلاینده‌ها هستند. در تحقیق حاضر، اثر سینتیک‌های شیمیایی مختلف در کاهش اکسیدهای نیتروژن (NO<sub>x</sub>) با روش کاهش انتخابی کاتالیستی در دودکش کوره‌های صنعتی و نیروگاه‌ها، به صورت عددی بررسی گردیده است. در این روش، آمونیاک در محدوده دمای بین ۱۱۵۰ تا ۱۳۵۰ کلوین به درون دودکش تزریق شده و با واکنش با NO، گاز نیتروژن تشکیل می‌دهد. هندسه مورد استفاده برای مقایسه با کار تجربی، یک دودکش استوانه‌ای به طول پنج متر و قطر پنج سانتی‌متر مطابق کار آزمایشگاهی استبرگ و همکاران است. در کار حاضر چهار سینتیک شیمیایی میلر، دوو، گلاربرگ و بروور مورد بررسی قرار گرفته است. با بررسی میزان کاهش آلاینده‌های NO، مشاهده گردید که سینتیک‌های شیمیایی گلاربرگ و بروور نسبت به دو سینتیک دیگر خطای کمتری دارند. سپس توانایی سینتیک‌ها در پیش‌بینی اثر مواد افزودنی (نیتروژن و هیدروژن) مورد بررسی قرار گرفت. همچنین در ادامه پدیده لغزش آمونیاک، با استفاده از سینتیک شیمیایی گلاربرگ بررسی گردیده است. نتایج نشان داد، پدیده لغزش آمونیاک با افزایش دمای ورودی به دماهای بالاتر از ۱۲۵۰ کلوین، کاهش می‌یابد.

کلیدواژه: آلودگی، اکسیدهای نیتروژن، روش کاهش انتخابی غیر کاتالیستی، سینتیک شیمیایی.

### مقدمه

محصولات ناشی از احتراق سوخت‌های هیدروکربنی شامل ترکیبات N<sub>2</sub>، CO، H<sub>2</sub>O، O<sub>2</sub>، SO<sub>2</sub> و NO هستند، که در میان آنها ترکیبات CO، SO<sub>2</sub>، NO و NO<sub>2</sub> به عنوان آلاینده محیط زیست شناخته می‌شوند. کوره‌های صنعتی و نیروگاه‌ها نیز به عنوان یکی از مصرف‌کنندگان قابل توجه سوخت ناشی عمده در ایجاد این آلودگی دارند، به طوری که طبق اعلام شورای شهر تهران حدود ۳۰ درصد آلودگی این شهر مربوط به منابع ساکن شامل نیروگاه‌های حرارتی، صنایع، پمپ بنزین‌ها و ... است [۱]. در این پژوهش از میان آلاینده‌های تولید شده توسط سوخت‌های هیدروکربنی، کاهش NO و NO<sub>2</sub> مورد بررسی قرار گرفته است. در اصطلاح به NO و NO<sub>2</sub>، NO<sub>x</sub> گفته می‌شود. چون بیش از ۸۵ درصد NO<sub>x</sub> مربوط به NO است، در مطالعات معمولاً تغییر غلظت NO مورد بررسی قرار گرفته، و از اثرات NO<sub>2</sub> صرف‌نظر می‌گردد [۲]. با توجه به لزوم کاهش آلاینده‌ها، روش‌های مختلفی برای کاهش آلاینده‌های NO<sub>x</sub> ارائه شده است.

\* دانشجوی کارشناسی ارشد (ایمیل: masoud.shafa@modares.ac.ir)

\*\* استاد- نویسنده مخاطب (ایمیل: kiumars@modares.ac.ir)

\*\*\* دانشجوی دکتری (ایمیل: alipoor.alireza@gmail.com)

یکی از روش‌های پرکاربرد، روش کاهش انتخابی غیرکاتالیستی (SNCR) است. این روش اولین بار در سال ۱۹۷۵ توسط اکسون [۲] به کار گرفته شد. در این روش، در محدوده دمایی بین ۱۱۵۰ تا ۱۳۵۰ کلوین، آمونیاک به درون دودکش تزریق می‌شود و با محصولات خروجی از محفظه احتراق مخلوط می‌گردد. محصولات گازی درون دودکش در دمای بالا با آمونیاک واکنش داده و مقدار قابل توجهی از  $\text{NO}_x$ ، به آب و نیتروژن تبدیل می‌شود.

بازده، نسبت مولی  $\text{NH}_3$  به  $\text{NO}_x$  و دمای بهینه سه پارامتر مهم در SNCR هستند. بازده به صورت نسبت  $\text{NO}_{\text{out}}/\text{NO}_{\text{in}}$  تعریف می‌گردد.  $\text{NO}_{\text{in}}$  و  $\text{NO}_{\text{out}}$  بترتیب مربوط به آلاینده  $\text{NO}_x$ ، در ورودی و خروجی دودکش می‌باشند. بازده SNCR معمولاً در محدوده ۶۰ تا ۷۰ درصد قرار دارد. نسبت مولی  $\text{NH}_3$  به  $\text{NO}_x$  با R نشان داده می‌شود. این نسبت بسته به نوع کاربرد، عددی بین ۱ تا ۲ می‌باشد. افزایش مقدار R به مقادیر بزرگتر از ۲ تأثیر قابل توجهی بر روی بازده نخواهد داشت بلکه باعث خروج بخشی از آمونیاک تزریقی از دودکش می‌شود که به این پدیده لغزش آمونیاک گفته می‌شود. از آنجایی که آمونیاک ماده‌ای سمی است، باید از لغزش آمونیاک جلوگیری گردد.

به غیر از خروج نامطلوب آمونیاک، تشکیل آلاینده CO نیز هنگام استفاده از SNCR باید مورد توجه قرار گیرد. وجود  $\text{CO}_2$  در محصولات دودکش باعث تولید آلاینده CO هنگام پاشش آمونیاک می‌گردد. اگر CO تولید شده از مقدار مجاز بیشتر گردد، باعث نامطلوب شدن فرآیند می‌گردد، یعنی از طرفی آلاینده  $\text{NO}_x$  کم می‌شود ولی در عوض آلاینده CO وارد جو می‌گردد [۲].

به دمایی که در آن بیشترین بازده SNCR ایجاد می‌گردد، دمای بهینه گفته می‌شود. در دمای کمتر از ۱۱۵۰ کلوین، شدت واکنش‌ها کم می‌باشند [۲]، و نه تنها کاهش  $\text{NO}_x$  ایجاد نمی‌گردد بلکه بیشتر  $\text{NH}_3$  تزریقی بدون واکنش باقی می‌ماند، بازده SNCR در این دماها کمتر از ۲۰ درصد است. در دماهای بیشتر از ۱۳۵۰ کلوین،  $\text{NH}_3$  تمایل به اکسید شدن به شکل NO دارد، که این نیز در کاهش  $\text{NO}_x$  مطلوب نمی‌باشد.

کارهای تجربی و عددی گوناگونی برای بررسی SNCR انجام شده است. موزیو و همکاران [۳] با استفاده از روش‌های آزمایشگاهی بر روی احتراق غیر پیش آمیخته متان-هوا نشان دادند که مقدار بهینه کاهش  $\text{NO}_x$  در  $R=1.6$  رخ می‌دهد. در  $R=1$  مقدار آلاینده  $\text{NO}_x$  تا ۶۵ درصد کاهش، می‌یابد و افزایش R تا ۳، کاهش  $\text{NO}_x$  را تا بیش از ۹۰ درصد بهبود می‌بخشد. با افزایش مقدار R، هم‌زمان پدیده لغزش نیز تشدید می‌گردد [۲].

لیون و همکاران [۴] با استفاده از تجهیزات آزمایشگاهی اثر مقدار غلظت اکسیژن موجود در گاز دودکش را مورد بررسی قرار دادند. ایشان دریافتند که حضور اکسیژن یکی از پارامترهای تأثیرگذار برای شروع روند SNCR است و عملاً بدون وجود اکسیژن حذف  $\text{NO}_x$  توسط فرآیند اتفاق نمی‌افتد. رایین و همکاران [۵] همین اثر را برای سوخت زغال سنگ در دو دمای مختلف مورد آزمایش قرار دادند. ایشان مشاهده کردند که در دمای ۱۲۷۳ کلوین، تغییرات SNCR مستقل از غلظت اکسیژن است. اما در ۱۱۸۱ کلوین، بازده SNCR با افزایش غلظت اکسیژن بالا می‌رود.

استبرگ و همکاران [۶] در کار آزمایشگاهی اثر دما را بر SNCR بررسی کردند. ایشان دریافتند که در دمای ۱۲۵۰ کلوین، بیشترین بازده SNCR اتفاق می‌افتد. در ضمن با افزودن نیتروژن به آمونیاک تزریقی مشاهده شد، که بازده SNCR افزایش می‌یابد. افزودن هوا نیز، نتایج مشابهی را در برداشت. علت وجود نیتروژن در هوا است. حدود ۷۹ درصد هوا را نیتروژن تشکیل می‌دهد و وجود نیتروژن باعث بالا رفتن بازده می‌گردد.

لیون و هاردی [۷] در کاری تجربی اثر افزودن هیدروژن بر پدیده SNCR را مورد بررسی قرار دادند. نتایج کار ایشان نشان داد، با افزودن هیدروژن بازده SNCR مقداری کاهش می‌یابد، ولی در کنار آن محدوده دمایی مؤثر، به دماهای پایین‌تر جابجا می‌شود، که باعث پرکاربردتر شدن روش SNCR می‌گردد.

به موازات کارهای تجربی انجام شده، شبیه‌سازی‌های عددی مختلفی نیز در زمینه SNCR گزارش شده است. در یک تحقیق عددی بورس‌تروم و همکاران [۸] به بررسی روش SNCR در کاهش آلاینده  $\text{NO}_x$  ایجاد شده از کوره آهن پرداختند.

آنها تغییرات  $NO_x$  و دما در طول دودکش را با سینتیک شیمیایی دو مرحله‌ای بروور مورد بررسی قرار دادند. نتایج کار ایشان نشان داد که بیشترین شیب کاهش  $NO_x$ ، در ابتدای تزریق است و در نقاط پایین دست دودکش این شیب کاهش می‌یابد. در کار عددی دیگر، زانائلو و همکاران [۹] به بررسی اثر اختلاط در پدیده SNCR پرداختند. همچنین ایشان تأثیر دو سینتیک شیمیایی دوو و بروور را مورد مطالعه قرار دادند. نتایج ایشان نشان داد که سینتیک شیمیایی بروور از دقت بالاتری برای شبیه‌سازی این پدیده برخوردار است. لازم به ذکر است زانائلو در کار عددی خود از نتایج تجربی استبرگ [۶] استفاده کرده است.

تنها کار انجام شده در زمینه روش SNCR در ایران، کار حسینی و همکاران [۱۰] می‌باشد. ایشان با استفاده از تجهیزات آزمایشگاهی، روش SNCR را برای کاهش آلاینده‌های گازهای خروجی ناشی از احتراق غیر پیش‌آمیخته گازوئیل - هوا بررسی نمودند. ایشان همچنین، به موازات کار آزمایشگاهی، به شبیه‌سازی این پدیده با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت پرداختند. اما از نقاط ضعف این شبیه‌سازی، در نظر گرفتن هندسه دودکش به صورت دو بعدی می‌باشد که با توجه به وجود یک نازل در کار آزمایشگاهی امکان اعتبار سنجی آن با نتایج تجربی وجود ندارد. همچنین از آنجایی که این پدیده ماهیتی توربولانسی دارد در نظر گرفتن هندسه دوبعدی مطلوب نمی‌باشد. نتایج کار ایشان نشان داد که استفاده از نازل با زاویه پاشش کمتر (به علت نفوذ بهتر آمونیاک به درون محصولات دودکش) بازده SNCR را افزایش می‌دهد و همچنین دمای پاشش بهینه مقدار ۱۳۵۵ کلوین می‌باشد.

با مروری بر کارهای انجام شده در زمینه روش SNCR مشاهده گردید که یکی از موضوعات مهم، بررسی تأثیر پارامترهای مختلف در جهت ایجاد یک شبیه‌سازی جامع منطبق با نتایج آزمایشگاهی می‌باشد. یکی از پارامترهای مهم در شبیه‌سازی این پدیده، انتخاب سینتیک شیمیایی قابل قبولی می‌باشد که بتواند به خوبی پدیده فیزیکی حاکم بر این روش را شبیه‌سازی نماید.

با توجه به جستجوهای انجام شده توسط نگارندگان این مقاله، در زمینه مقایسه سینتیک‌های شیمیایی تفصیلی تا کنون کار عددی انجام نشده است، بنابراین هدف از کار حاضر بررسی اثر سینتیک‌های شیمیایی مختلف در شبیه‌سازی آلاینده  $NO_x$  با روش SNCR است. برای بررسی این تأثیر، نتایج شبیه‌سازی عددی با نتایج حاصل از کار آزمایشگاهی استبرگ و همکاران [۶] مقایسه خواهند شد. بعد از انتخاب سینتیک شیمیایی مطلوب، میزان تولید آلاینده CO و پدیده لغزش آمونیاک نیز بررسی می‌گردد.

## معادلات حاکم

برای شبیه‌سازی احتراق، معادلات ناویر-استوکس به همراه معادلات بقای انرژی و بقای جرم گونه‌ها به همراه معادله حالت گاز کامل حل می‌شوند. معادلات حاکم به شکل زیر بیان می‌شوند.

برای شبیه‌سازی احتراق، معادلات ناویر-استوکس به همراه معادلات بقای انرژی و بقای جرم گونه‌ها به همراه معادله حالت گاز کامل حل می‌شوند. معادلات حاکم به شکل زیر بیان می‌شوند.

معادله پیوستگی

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

در این رابطه  $\rho$  چگالی و  $u$  بردار سرعت است.

معادله بقای مومنتوم

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \rho g - \nabla p + \mu \nabla^2 u \quad (2)$$

معادله بقای انرژی

$$\rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{i=1}^{N_g} h_i \dot{\omega}_i \quad (3)$$

در این رابطه  $\lambda$ ،  $c_p$  و  $h_i$  به ترتیب ضریب رسانش حرارتی مخلوط، ظرفیت حرارتی و آنتالپی گونه  $i$  ام هستند. جمله  $\dot{\omega}_i$  مربوط به نرخ تشکیل یا از بین رفتن گونه شیمیایی  $i$  ام می باشد که با توجه به سینتیک شیمیایی مشخص می گردد. معادله بقای گونه

$$\rho \left( \frac{\partial Y_i}{\partial t} + u \cdot \nabla Y_i \right) = -\nabla \cdot (\rho Y_i V_i) + \dot{\omega}_i \quad (4)$$

در معادله بقای گونه،  $Y_i$  و  $V_i$  به ترتیب کسر جرمی گونه و سرعت نفوذی گونه  $i$  ام هستند. معادله حالت گاز ایده آل

$$\rho = \frac{PMW_{mix}}{R_u T} \quad (5)$$

در معادله حالت گاز ایده آل،  $MW_{mix}$  و  $R_u$  به ترتیب جرم مولی مخلوط و ثابت جهانی گازها هستند. با توجه به پیشنهاد مرجع [۸]، برای مدل سازی جریان توربولانسی، مدل  $k - \varepsilon$  استاندارد بکار گرفته می شود. معادلات انرژی جنبشی و نرخ اضمحلال به صورت زیر تعریف می شود:

$$\frac{Dk}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + P_k - \varepsilon \quad (6)$$

$$\frac{D\varepsilon}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (7)$$

در این معادلات ثوابت مقادیر زیر را دارند [۸]:

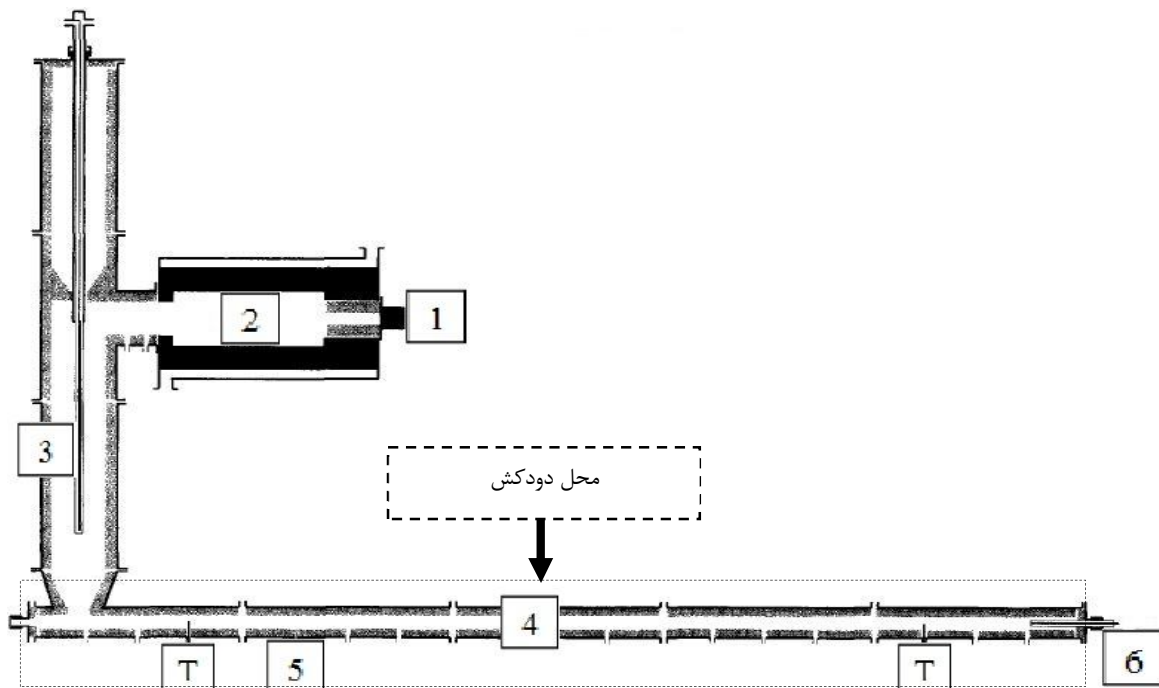
$$C_{\mu} \cong 0.09, C_{1\varepsilon} \cong 1.44, C_{2\varepsilon} \cong 1.92 \quad (8)$$

$$\sigma_k \cong 1.0, \sigma_\varepsilon \cong 1.3 \quad (9)$$

## مسئله شبیه سازی شده

هندسه مورد استفاده در کار حاضر با توجه به کار تجربی استبرگ و همکاران [۶] انتخاب گردیده است. هندسه مورد نظر دودکشی استوانه ای به طول ۵ متر و قطر ۵ سانتی متر است. طرحواره این هندسه در شکل ۱ نشان داده شده است. در این شکل، نقاط ۱ و ۲ به ترتیب مربوط به نقطه اختلاط واکنش دهنده ها (نقطه پاشش) و محفظه احتراق هستند. در کار استبرگ، احتراق متان و هوا بصورت غیر پیش آمیخته انجام می گیرد. با عبور محصولات احتراق از خنک کننده که با شماره ۳ در شکل نشان داده شده است، دمای محصولات تا دمای مورد نظر کاهش و محصولات وارد دودکش افقی می شوند. ترکیب محصولات در ورودی دودکش برابر ۷۳/۴ درصد حجمی  $N_2$ ، ۱۵/۱ درصد حجمی  $H_2O$ ، ۸/۰ درصد حجمی  $CO_2$ ، ۳/۴ درصد حجمی  $O_2$  و ۵۰۰ ppm NO است.

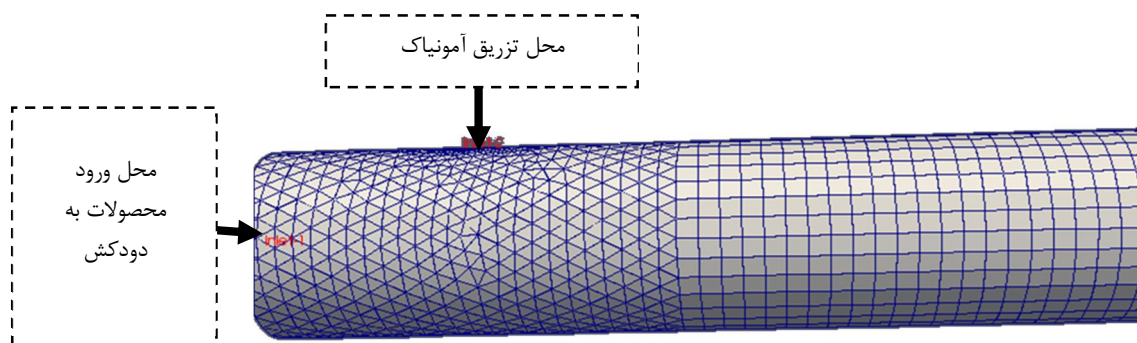
در نقطه ۵ (به فاصله ۱/۲۵ متر از ابتدای دودکش) تزریق آمونیاک از نازلی به قطر ۱/۹ میلی متر صورت می گیرد. دبی تزریق آمونیاک ثابت و برابر ۱ nl/min است. نقطه ۴ نشانگر مرکز دودکش و نقطه ۶ مربوط به مکان اندازه گیری غلظت گازهای خروجی می باشند. تمام دودکش افقی توسط پوشش سرامیک، عایق بندی گردیده است.



شکل ۱- طرحواره مسئله مورد بررسی [۷]

با توجه به نتایج تجربی آمونیاک تزریق شده بر بالادست اثری ندارد [۲]، به همین دلیل شبیه‌سازی برای  $3/8$  متر انتهایی دودکش انجام می‌گیرد.

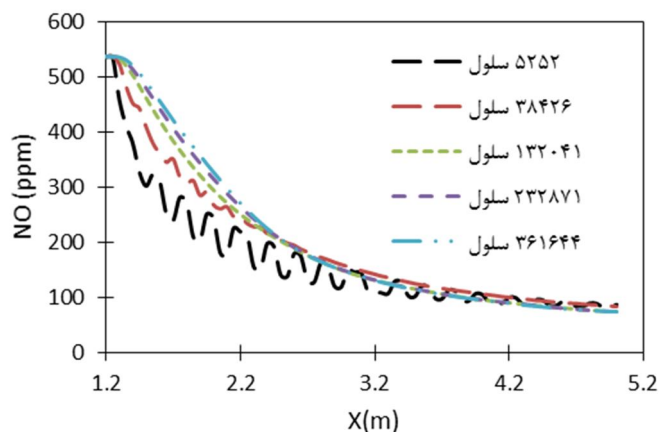
با توجه به وجود نازل در جداره کانال، شبکه‌بندی متفاوتی در طول کانال در نظر گرفته شده است بطوریکه در نزدیکی نازل شبکه بندی بی ساختار و در سایر مکان های کانال شبکه‌بندی با ساختار استفاده شده است (شکل ۲).



شکل ۲- طرحواره شبکه بندی مسئله مورد بررسی

شکل ۳ استقلال حل عددی از شبکه را نشان می‌دهد. محور افقی در این شکل مرکز کانال در راستای طول و محور عمودی مقدار گونه NO را نشان می‌دهد. نتایج حاصل از شبکه های محاسباتی شامل  $232871$  سلول و  $361644$  سلول تفاوت ناچیزی بایکدیگر دارند بنابراین با توجه به هزینه محاسباتی بالاتر برای شبکه بندی با  $361644$  سلول، تعداد  $232871$  سلول محاسباتی برای ادامه کار در نظر گرفته می‌شود.

شرط مرزی در ورودی دودکش برای دما، کسر جرمی گونه‌ها و سرعت، مقدار ثابت در نظر گرفته شده است. در خروجی شرط مرزی گرادیان نرمال صفر برای تمامی متغیرها بکار گرفته شده است. بدین معنی که تغییرات متغیرها در جهت عمود بر سطح صفر می باشد همچنین شرط مرزی خروجی برای فشار، فشار محیط می باشد. در دیواره ها نیز شرط مرزی عایق برای دما، شرط عدم لغزش برای سرعت و گرادیان صفر برای گونه ها در نظر گرفته می شود.



شکل ۳- بررسی استقلال حل عددی از شبکه

در مدل‌سازی صورت گرفته از مدل واکنشگاه نیمه مخلوط<sup>۱</sup> جهت ایجاد رابطه مناسب بین سینتیک شیمیایی و آشفستگی جریان استفاده شده است.

سخت افزار مورد استفاده برای شبیه سازی های انجام شده یک کامپیوتر ۱۴ هسته‌ای و دارای مشخصات حافظه ۱ گیگابایت و پردازشگر ۱/۵ گیگاهرتز برای هر هسته می باشد.

## نتایج و بحث

در مباحث احتراقی سینتیک شیمیایی مورد استفاده نقش مهمی در تعیین تولید و مصرف گونه‌ها دارد. در این بخش، اثر سینتیک‌های شیمیایی مختلف در شبیه سازی روش SNCR به ترتیب سال ارائه آنها مورد بررسی قرار می گیرند. سپس اثر افزودنی‌های نیتروژن و هیدروژن برفرآیند SNCR مورد بحث قرار می گیرد. در نهایت اثر تولید آلایند CO و پدیده لغزش آمونیاک بررسی می شود.

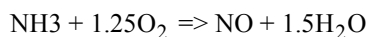
### بررسی اثر سینتیک های مختلف در پیش بینی آلایند NO با پاشش آمونیاک

سینتیک شیمیایی میلر [۱۱] در سال ۱۹۸۹ ارائه گردید. این سینتیک برای شرایط آدیاباتیک دودکش محاسبه شد و در کد سنکین<sup>۲</sup> برای پیش‌بینی SNCR مورد استفاده قرار گرفت. برنامه یک بعدی سنکین برای پیش‌بینی سینتیک‌ها در واکنش‌های همگن در فاز گازی نوشته شده است. این سینتیک شامل ۲۰ گونه و ۷۳ واکنش می باشد. سپس سینتیک شیمیایی ۱۲۹ مرحله‌ای گلاربرگ [۱۲] در سال ۱۹۹۵ ارائه گردید. این سینتیک شامل ۱۲۹ واکنش و ۲۵ گونه است. در کنار سینتیک‌های تفصیلی، دو سینتیک جزئی نیز برای شبیه سازی روش SNCR با تزریق آمونیاک ارائه گشته است.

<sup>۱</sup> PaSR (Partially Stirred Reactor)

<sup>۲</sup> Senkin

سینتیک اول مربوط به دوو [۱۳] در سال ۱۹۹۲ ارائه گشت. آزمایش های دوو مربوط به راکتور استوانه‌ای با شرایط ورودی ۴/۱ درصد حجمی  $O_2$ ،  $830$  ppmv،  $NH_3$ ،  $507$  ppmv، NO و بقیه حجم باقی‌مانده گونه  $N_2$  بود. آزمایش‌ها در بازه دمایی ۱۱۴۰ تا ۱۳۳۵ کلین و فشار اتمسفر انجام شده است. این سینتیک شامل ۲ واکنش و ۶ گونه می باشد. رابطه ۱۰ این سینتیک را نشان می‌دهد.

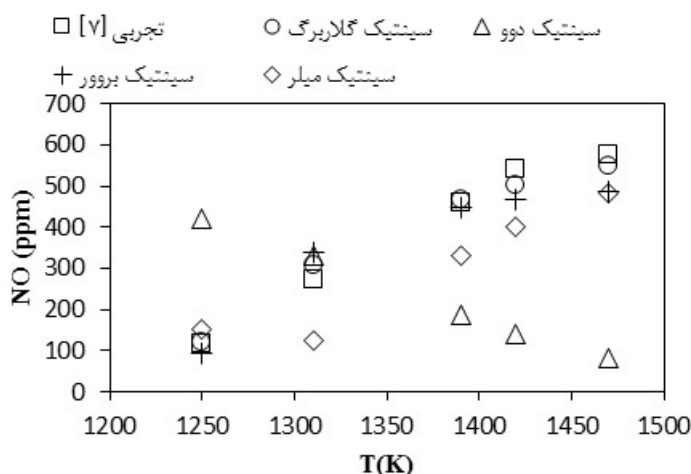


سینتیک دوم مربوط به پروور [۱۴] در سال ۱۹۹۶ ارائه گردید. وی ضرایب سینتیک میلر را تصحیح کرد و با حذف واکنش‌های با تأثیر کمتر، سینتیکی کاهش یافته برای پیش‌بینی SNCR ارائه داد. این سینتیک شامل ۲ مرحله و ۶ گونه است. رابطه ۱۱ این سینتیک را نشان می‌دهد.



۴ سینتیک معرفی شده در بالا دارای قابلیت متفاوت در پیش‌بینی فرآیند SNCR هستند. به طور مثال سینتیک‌های دوو، میلر و پروور به دلیل عدم وجود گونه کربن، قابلیت پیش‌بینی تغییرات گونه CO را هنگام فرآیند SNCR ندارند، در صورتی که سینتیک گلاربرگ این چنین نیست. حال برای بررسی دقت سینتیک‌ها در پیش‌بینی فرآیند SNCR، شبیه‌سازی این فرآیند با سینتیک‌های نام برده شده انجام می‌گردد.

شکل ۴، تغییرات NO درون دودکش برای تزریق آمونیاک در دماهای مختلف و با استفاده از سینتیک‌های شیمیایی مختلف را نشان می‌دهد. محور افقی در این شکل دماهای مختلف محصولات دودکش و محور عمودی مقدار گونه NO را نشان می‌دهد. با توجه به این شکل مشاهده می‌شود که سینتیک‌های پروور و گلاربرگ با نتایج تجربی تطابق خوبی دارند، در صورتی که در مورد سینتیک‌های دوو و میلر این چنین نیست.



شکل ۴- نمودار تغییرات NO با تزریق در دماهای مختلف برای سینتیک‌های شیمیایی مختلف

در شکل‌های ۵ تا ۹ درصد خطای مکانیزم‌های مختلف در دماهای ۱۲۵۰، ۱۳۱۰، ۱۳۹۰، ۱۴۲۰ و ۱۴۷۰ با هم مقایسه شده است. محورهای افقی در این شکلها سینتیک مورد بررسی و محور عمودی مقدار خطا در محاسبه گونه NO در مقایسه با

نتایج تجربی را نشان می‌دهد. برای محاسبه خطای نسبی در محاسبات از رابطه ۱۲ استفاده می‌گردد:

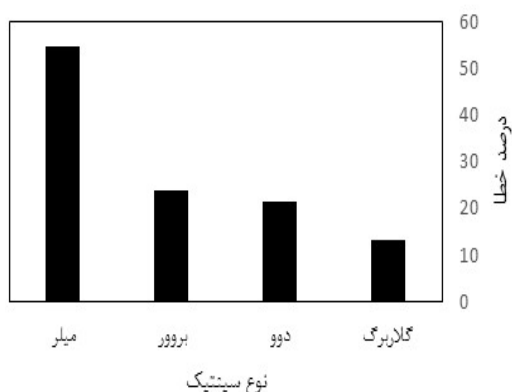
$$error(\%) = \left| \frac{NO_{in} - NO_{out}}{NO_{in}} \right| \times 100 \quad (12)$$

مکانیزم میلر دارای خطای ۵۰ درصد در دمای ۱۳۱۰ کلوین است. در سایر دماها این مکانیزم خطایی نزدیک به ۲۵ درصد دارد. خطای ایجاد شده با توجه به تفصیلی بودن این سینتیک شیمیایی بالا به نظر می‌رسد.

سینتیک شیمیایی دوو دارای ماکزیمم خطای ۲۵۰ درصد در دمای ۱۲۵۰ کلوین است. به علت این خطای زیاد، استفاده از این مکانیزم مطلوب نمی‌باشد. در ضمن طبق شکل ۵ در این مکانیزم با افزایش دما مقدار آلاینده  $NO_x$  در خروجی روند کاهشی خواهد داشت، که با نتایج تجربی سازگار نیست.

سینتیک شیمیایی گلاربرگ با ماکزیمم خطای ۱۳/۲۱ درصد، آلاینده  $NO_x$  را با دقت بسیار خوب پیش‌بینی می‌کند. از ویژگی‌های دیگر این سینتیک شیمیایی، توانایی پیش‌بینی آلاینده CO می‌باشد که سایر سینتیک‌های به کار رفته در این تحقیق این قابلیت را ندارند.

سینتیک بروور با ماکزیمم خطای ۲۳/۸۶ درصد، دقت قابل قبولی در تعیین مقدار آلاینده  $NO_x$  دارد. قابل ذکر است سینتیک بروور، در نرم‌افزارهایی تجاری معروف همچون فلونت<sup>۳</sup>، برای پیش‌بینی فرآیند SNCR مورد استفاده قرار می‌گیرد. از بررسی‌های انجام شده مشخص می‌گردد، سینتیک شیمیایی تفصیلی ۲۵ گونه‌ای گلاربرگ دارای بهترین دقت در پیش‌بینی غلظت آلاینده  $NO_x$  با روش SNCR است. سینتیک شیمیایی ۶ گونه‌ای بروور نیز با توجه به اینکه از تعداد گونه‌های کمتری نسبت به سینتیک شیمیایی گلاربرگ برخوردار است، اما با دقت بالایی غلظت آلاینده  $NO_x$  را پیش‌بینی می‌کند. با توجه به خطای بالای سینتیک‌های شیمیایی دوو و میلر استفاده از آنها برای شبیه‌سازی روش SNCR توصیه نمی‌گردد. زمان اجرای محاسبات از پارامترهای مهم در شبیه‌سازی عددی است. از اجراهای انجام شده مشخص گردید، زمان اجرا برای سینتیک گلاربرگ ۳۰ ساعت می‌باشد، در صورتی که همین زمان برای سینتیک بروور با همان کامپیوتر ۵ ساعت است. علت طولانی شدن زمان اجرای حل با سینتیک گلاربرگ تعداد گونه‌های زیاد موجود در این مکانیزم است.



شکل ۶- مقایسه درصد خطای مکانیزم‌های مختلف در دمای ۱۳۱۰ کلوین



شکل ۵- مقایسه درصد خطای مکانیزم‌های مختلف در دمای ۱۲۵۰ کلوین

<sup>3</sup> Fluent





شکل ۷- مقایسه درصد خطای مکانیزم‌های مختلف در دمای ۱۳۹۰ کلوین  
 شکل ۸- مقایسه درصد خطای مکانیزم‌های مختلف در دمای ۱۴۲۰ کلوین



شکل ۹- مقایسه درصد خطای مکانیزم‌های مختلف در دمای ۱۴۷۰ کلوین

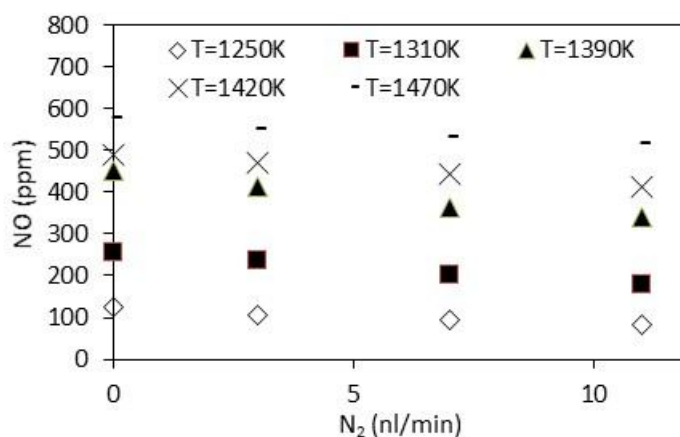
### بررسی اثر سنیتیک‌های مختلف در پیش بینی آلاینده NO با پاشش آمونیاک همراه با افزودنی

یکی از عوامل مؤثر بر بازده SNCR افزودن مواد دیگر هنگام تزریق کاهنده آمونیاک است. افزودن  $N_2$  باعث بالارفتن بازده در همان محدوده دمایی بین ۱۱۵۰ تا ۱۳۵۰ درجه کلوین می‌گردد. افزودن هیدروژن به مقدار نسبت مولی  $H_2/NH_3 = 2.4$  در بازده تأثیر آن‌چنانی ندارد، ولی در عوض باعث جابجایی محدوده دمایی به ۹۰۰ تا ۱۱۰۰ درجه کلوین می‌شود. این جابجایی به دماهای پایین‌تر باعث پرکاربردتر شدن SNCR می‌گردد. در ضمن قابل ذکر است با کمتر کردن نسبت مولی  $H_2/NH_3$  از ۲.۴ به سمت صفر محدوده دمایی نیز جابجا شده و از ۹۰۰ تا ۱۱۰۰ به سمت ۱۱۵۰ تا ۱۳۵۰ درجه کلوین میل می‌کند [۲].

### بررسی اثر سنیتیک‌های مختلف در پیش بینی آلاینده NO با پاشش همراه با افزودنی $N_2$

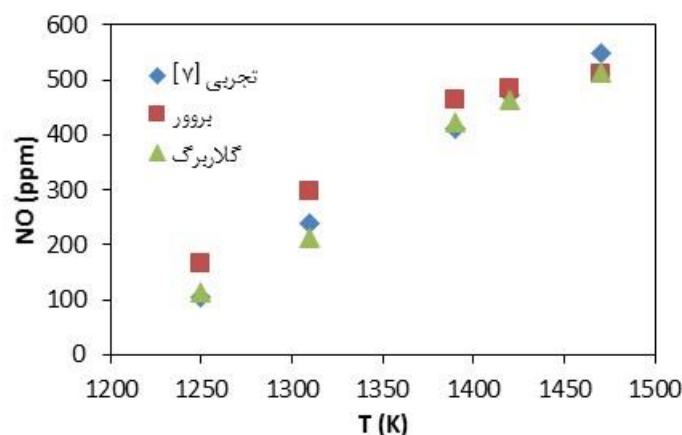
طبق آزمایش استبرگ و همکاران افزودن  $N_2$  باعث افزایش بازده SNCR در محدوده دمایی بین ۱۱۵۰ تا ۱۳۵۰ درجه کلوین می‌گردد [۶]. شکل ۱۰ نتایج آزمایش استبرگ و همکاران را نشان می‌دهد. محور افقی در این شکل مقدار نیتروژن اضافه شده همراه آمونیاک و محور عمودی مقدار گونه NO را نشان می‌دهد. افزودن  $N_2$  بر بازه دمایی مؤثر SNCR تأثیر ندارد و باعث

جابجایی بازه به دماهای بالاتر یا پایین تر نمی‌گردد. در کار حاضر همانند کار آزمایشگاهی استبرگ اثر افزودن ۳ nl/min نیتروژن همراه آمونیاک در دودکش بررسی گردیده است. همان‌طور که در قسمت بررسی اثر سینتیک های مختلف در پیش‌بینی آلاینده NO با پاشش آمونیاک نشان داده شد، سینتیک‌های بروور و گلاربرگ از دقت بیشتری در پیش‌بینی فرآیند SNCR برخوردار هستند. به همین دلیل در این قسمت برای بررسی قابلیت پیش‌بینی سینتیک‌ها در پیش‌بینی آلاینده NO با پاشش همراه با افزودنی N<sub>2</sub> از این دو سینتیک استفاده شده است.

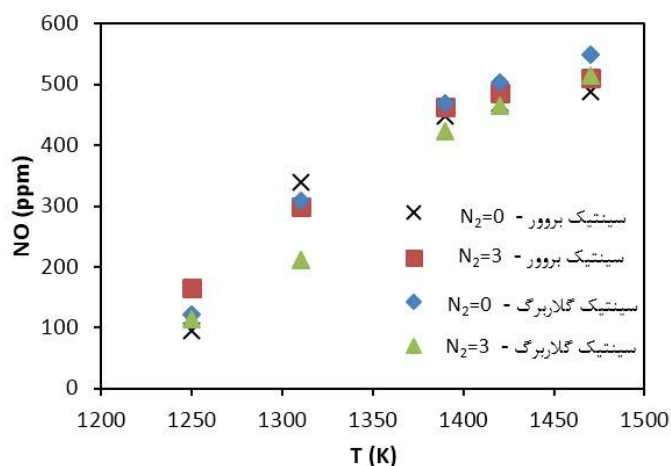


شکل ۱۰- اثر افزودن نیتروژن بر کاهش NO مربوط به نتایج تجربی استبرگ و همکاران [۶]

شکل ۱۱ مربوط به مقایسه اثر سینتیک های بروور و گلاربرگ در پیش‌بینی آلاینده NO با پاشش همراه با افزودنی N<sub>2</sub> است. محور افقی در این شکل دماهای مختلف محصولات دودکش و محور عمودی مقدار گونه NO را نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل ۱۱ مشاهده می‌شود، سینتیک ۲ مرحله‌ای بروور علیرغم داشتن گونه N<sub>2</sub> قادر به پیش‌بینی صحیح کاهش NO حین فرآیند SNCR نیست. با مقایسه نتایج ارائه شده در شکل ۱۱ با شکل ۴ و یکجا آوردن نتایج در شکل ۱۲ مشخص می‌گردد سینتیک بروور مقدار NO را در حالت افزودنی N<sub>2</sub> بیشتر از حالت عدم N<sub>2</sub> نشان می‌دهد، که این کاملاً اشتباه است. علت واکنش‌های به کار رفته در این سینتیک است که نمی‌توانند اثر افزودن نیتروژن را در شبیه‌سازی دخالت دهند. در مقابل، سینتیک تفصیلی گلاربرگ با دقت قابل قبولی مقدار آلاینده NO را با افزودنی N<sub>2</sub> پیش‌بینی می‌کند. علت پیش‌بینی درست سینتیک گلاربرگ وجود واکنشهایی است که اثر گونه نیتروژن را در فرآیند SNCR دخالت می‌دهد.



شکل ۱۱- مقایسه اثر سینتیک های بروور و گلاربرگ در پیش‌بینی آلاینده NO با پاشش همراه با افزودنی N<sub>2</sub>



شکل ۱۲- مقایسه اثر سینتیک های پروور و گلاربرگ در پیش بینی آلاینده NO با پاشش بدون افزودنی N<sub>2</sub> و همراه با افزودنی N<sub>2</sub>

### تاثیر افزودن H<sub>2</sub> بر فرآیند SNCR با استفاده از سینتیک گلاربرگ

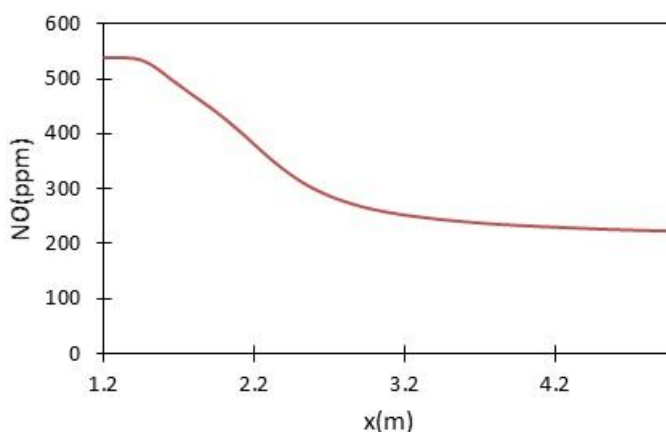
یکی از مشکلات رایج در فرآیند SNCR کوچک بودن محدوده دمایی قابل استفاده در این روش است. محدوده دمایی ۱۱۵۰ تا ۱۳۵۰ درجه کلوین قابل تطبیق با دامنه دمایی بسیاری از دودکش‌ها در صنعت نیست. افزودن هیدروژن باعث جابجایی محدوده دمایی SNCR به دماهای پایین‌تر می‌گردد، که باعث استفاده بیشتر این فرآیند در دودکش‌های صنعتی می‌گردد. دمای تعدادی از دودکش‌ها و قابلیت استفاده در حالات بدون افزودنی هیدروژن و با این افزودنی در جدول ۱ آمده است:

جدول ۱- قابلیت استفاده SNCR در دودکش‌های مختلف در حالات بدون افزودنی هیدروژن و با این افزودنی [۲]

H <sub>2</sub> با	H <sub>2</sub> بدون	محدوده دمای دودکش (درجه کلوین)	سیستم احتراقی
قابل استفاده با sncr	غیر قابل استفاده با sncr	۱۰۰۰-۱۰۷۰	اکسیدهای شیمیایی
قابل استفاده با sncr	غیر قابل استفاده با sncr	۸۶۰-۹۲۰	کوره پخت آجر
قابل استفاده با sncr	قابل استفاده با sncr	۱۱۴۰-۱۲۹۰	محفظه احتراق‌های بستر سیال
غیر قابل استفاده با sncr	غیر قابل استفاده با sncr	۴۸۰	گاز طبیعی
غیر قابل استفاده با sncr	غیر قابل استفاده با sncr	۵۷۰	نفت با مصرف مسکونی
قابل استفاده با sncr	قابل استفاده با sncr	۹۲۰-۱۱۴۰	کوره ذوب شیشه
قابل استفاده با sncr	غیر قابل استفاده با sncr	۱۰۳۰	کوره آشغال سوزی معمولی
قابل استفاده با sncr	غیر قابل استفاده با sncr	۶۴۰-۸۶۰	توربین گاز
قابل استفاده با sncr	غیر قابل استفاده با sncr	۸۱۰-۹۲۰	سوخت دیزل
قابل استفاده با sncr	قابل استفاده با sncr	۱۲۹۰-۱۵۷۰	کوره سرامیک

همان‌طور که از جدول بالا مشخص است، دمای دودکش کوره پخت آجر، کوره زباله سوز، توربین گاز و سوخت دیزل تنها با افزودن هیدروژن، قابل استفاده برای فرآیند SNCR خواهند شد. از این رو بررسی اثر سینتیک اعمال شده در شبیه‌سازی فرآیند SNCR در پیش بینی کاهش آلاینده NO با پاشش افزودنی H<sub>2</sub> از اهمیت خاصی برخوردار می‌باشد. در کار حاضر اثر افزودن هیدروژن همراه آمونیاک با نسبت مولی  $H_2/NH_3 = ۲.۴$  در دودکش بررسی گردیده است.

برای بررسی قابلیت پیش‌بینی سینتیک‌ها از سینتیک‌های ۲ مرحله‌ای بروور و دوو به دلیل عدم وجود گونه  $H_2$  در این سینتیک‌ها نمی‌توان استفاده کرد. از طرفی همان‌طور که قسمت بررسی اثر سینتیک‌های مختلف در پیش‌بینی آلایندة NO با پاشش آمونیاک مشخص گردید، سینتیک میلر در پیش‌بینی SNCR دارای خطای بالا بوده و مناسب نیست. پس در این قسمت از سینتیک ۱۲۹ مرحله‌ای گلاربرگ استفاده شده است زیرا دارای گونه  $H_2$  است و از دقت خوبی در پیش‌بینی فرآیند SNCR برخوردار است. بر خلاف سینتیک بروور، سینتیک ۱۲۹ مرحله‌ای گلاربرگ قادر به پیش‌بینی رفتار فرآیند SNCR همراه با افزودنی هیدروژن است. علت وجود واکنش‌هایی در این سینتیک است که گونه هیدروژن را در این پدیده دخالت می‌دهد. شکل ۱۳ مربوط به پیش‌بینی آلایندة NO با پاشش همراه با افزودنی  $H_2$  با استفاده از سینتیک گلاربرگ در دمای ۱۰۲۰ کلوین است. محور افقی در این شکل مرکز کانال در راستای طول و محور عمودی مقدار گونه NO را نشان می‌دهد. از شکل ۱۳ مشخص می‌گردد فرآیند SNCR در دمای ۱۰۲۰ کلوین آلایندة NO را به خوبی کاهش می‌دهد. در این شکل ورودی NO، ۵۳۷ ppm و در خروجی مقدار این آلایندة تا ۲۰۰ ppm کاهش می‌یابد. این باعث بازده بالای ۶۰ درصد برای فرآیند SNCR می‌گردد. با توجه به مطالب بیان شده در مقدمه در دماهای زیر ۱۱۵۰ کلوین و بدون وجود افزودنی‌ها، بازده کمتر از ۲۰ درصد است. در نتیجه با توجه به نتایج این قسمت بازه دمایی بالای SNCR در حضور افزودنی هیدروژن، به دماهای پایین‌تر جابجا شده است.

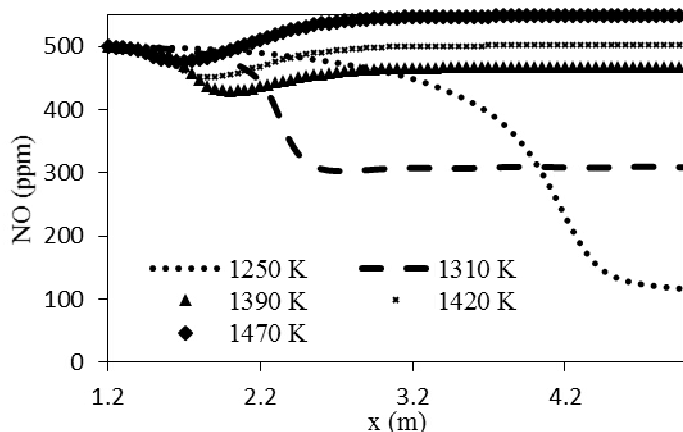


شکل ۱۳- پیش‌بینی آلایندة NO با پاشش همراه با افزودنی  $H_2$  با استفاده از سینتیک گلاربرگ در دمای ۱۰۲۰ کلوین

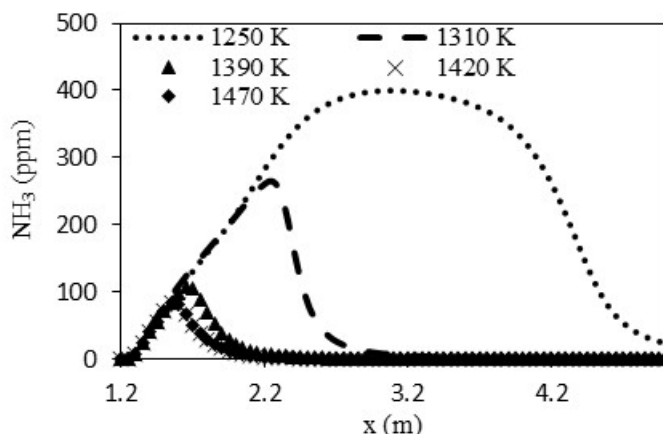
### بررسی پدیده لغزش آمونیاک

با استفاده از سینتیک شیمیایی گلاربرگ که کمترین خطا را در پیش‌بینی آلایندة  $NO_x$  داشت، پدیده لغزش آمونیاک در طول دودکش بررسی می‌گردد. شکل‌های ۱۴ و ۱۵ بترتیب تغییرات غلظت NO و  $NH_3$  با تزریق در دماهای مختلف محصولات در راستای طول دودکش با سینتیک گلاربرگ را نشان می‌دهند. همان‌طور که از شکل ۱۴ مشخص است، با افزایش دما به دماهای بالاتر از ۱۲۵۰ کلوین، بازده SNCR کاهش می‌یابد. علت این امر وجود واکنش‌های تولید NO است، که در این دماها فعال می‌گردند و باعث کمتر شدن اثر واکنش‌های مصرف NO می‌گردند. با توجه به شکل ۱۵ مشاهده می‌گردد که با افزایش دما، آمونیاک پاشش شده با حرکت در راستای کانال سریع‌تر مصرف شده و مقدار کمتری از آن در خروجی دودکش باقی می‌ماند. به‌طوری که برای دماهای بالاتر از ۱۳۱۰ کلوین تقریباً هیچ آمونیاکی در خروجی مشاهده نمی‌گردد. با توجه به اینکه با افزایش دما بازده فرآیند SNCR کاهش می‌یابد، دمای ۱۲۵۰ کلوین برای انجام فرآیند تزریق آمونیاک

مطلوب به نظر می‌رسد، زیرا در آن بیشترین بازده SNCR ایجاد می‌گردد و هم‌زمان مقدار ناچیزی (کمتر از ۵۰ ppm) آمونیاک در خروجی وجود دارد.



شکل ۱۴- نمودار تغییرات غلظت NO با تزریق در دماهای مختلف در راستای طول دودکش با سینتیک شیمیایی گلاربرگ

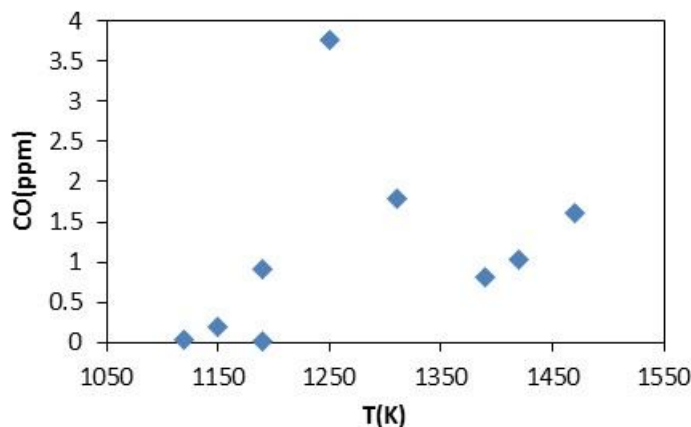


شکل ۱۵- نمودار تغییرات غلظت NH<sub>3</sub> با تزریق در دماهای مختلف در راستای طول دودکش با سینتیک گلاربرگ

### بررسی تولید آلاینده CO

فرآیند SNCR در حضور CO<sub>2</sub> باعث تولید آلاینده CO می‌گردد. سینتیک ۱۲۹ مرحله‌ای گلاربرگ، تنها سینتیکی است که کربن را وارد واکنش‌ها کرده و قابلیت پیش‌بینی آلاینده CO را دارد. در این بخش با استفاده از این سینتیک به بررسی تولید آلاینده CO حین فرآیند SNCR پرداخته می‌شود.

با توجه به شکل ۱۶ بیشترین مقدار آلاینده CO مربوط به دمای ۱۲۵۰ کلوین و مقدار ۴ ppm می‌باشد. با توجه به بخش مقدمه و توصیف آزمایش استبرگ، بیشترین بازده SNCR نیز در این دما اتفاق می‌افتد. با توجه به اینکه ۲۵ ppm مجاز CO در جو برای سلامتی است، مقدار CO تولید شده در روش SNCR بسیار پایین بوده و مضر نیست. در نتیجه کار در دمای ۱۲۵۰ کلوین در بیشترین بازده مشکلی از لحاظ تولید آلاینده CO ایجاد نمی‌کند.



شکل ۱۶- نمودار تغییرات غلظت CO با تزریق در دماهای مختلف در انتهای دودکش با سینتیک گلاربرگ

## نتیجه گیری

در کار حاضر اثر سینتیک‌های شیمیایی مختلف در کاهش آلاینده  $\text{NO}_x$  با روش کاهش انتخابی غیر کاتالیستی (SNCR) در دودکش، به صورت عددی بررسی گردید. چهار سینتیک میلر، دوو، گلاربرگ و بروور مورد بررسی قرار گرفتند. در مقایسه با کار تجربی، خطای پیش‌بینی مقدار گونه NO در سینتیک میلر ۵۴/۷۷ درصد، در سینتیک دوو ۲۵۳/۱۳ درصد، در سینتیک گلاربرگ ۱۳/۲۱ درصد و در سینتیک بروور ۲۳/۸۶ درصد است. سینتیک‌های گلاربرگ و بروور دارای نتایج بهتری بودند. سینتیک دوو دارای بیشترین خطا در بین سینتیک‌ها است. باید توجه داشت سینتیک گلاربرگ هر چند کمترین خطا را دارد، ولی به دلیل زیاد بودن گونه‌ها احتیاج به تجهیزات کامپیوتری بالاتر برای اجرا دارد.

با توجه به نتایج کار حاضر پیشنهاد می‌گردد از سینتیک بروور برای پیش‌بینی  $\text{NO}_x$  در فرآیند SNCR استفاده گردد. با افزودن نیتروژن به آمونیاک مشخص گردید، این ماده باعث بالارفتن بازده SNCR می‌گردد. از طرف دیگر، افزودن هیدروژن به آمونیاک بازده فرآیند را مقداری کاهش می‌دهد. در حالیکه باعث جابجایی محدوده دمایی مؤثر فرآیند به دماهای پایین‌تر می‌شود، که این مسئله روش SNCR را پرکاربردتر می‌کند. با بررسی پدیده لغزش آمونیاک مشخص گردید که با افزایش دما به دماهای بالاتر از ۱۲۵۰ کلوین، این پدیده کاهش می‌یابد. ولی به دلیل کم شدن بازده SNCR در این دماها، همان دمای ۱۲۵۰ کلوین برای SNCR مطلوب به نظر می‌رسد.

## منابع

1. <http://www.mohitzist.ir/fa/content/1140.html>, 13/02/2014.
2. M.T.Javed, N.Irfan and B.M.Gibbs, "Review Control of combustion-generated nitrogen oxides by selective non-catalytic reduction," *Journal of Environmental Management* 83, 251–289, 2007.
3. L.J.Muzio and J.K.Arand, "Gas Phase Decomposition of Nitric Oxide in Combustion Products," *Electric Power Research Institute, Palo Alto, California*, 1976.
4. R.K.Lyon and N.J.Fanwood, "Method for the reduction of the concentration of NO in combustion"
5. M.A.Robin, H.J.Price and R.T.Squires, "Tailoring  $\text{NH}_3$  based SNCR for installation on power plants boilers," *Joint EPA/EPRI Symposium on Stationary Combustion  $\text{NO}_x$  Control*, 251–289, 1991.

6. M.Ostberg, D.J.Kim and E.J.Jan, "Influence of mixing on the SNCR process," Chemical Engineering Science, Vol. 52, No. 15, pp. 2511-2525, 1997.
7. R.K.Lyon and J.E.Hardy, "Discovery and Development of the Thermal DeNO<sub>x</sub> Process," Ind. Eng. Chem. Fundam, pp.19-24, 1988.
8. P.E.C.Burstrom and T.S.Lundstrom, "CFD-modelling of Selective Non-Catalytic Reduction of NO<sub>x</sub> in grate-kiln plants," Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 10, Nos. 5/6, 2010.
9. E.F.Zanoelo, "Modeling Study of Selective Non-catalytic Reduction of nitrogen Oxides by Ammonia and Urea. Chemical Kinetics and Fluid Dynamics," Thesis Phd, University Torino, 1999.
10. N.Hosseini, "The effect of SNCR NO<sub>x</sub> emissions in the combustion of liquid fuel in the furnace," Master's thesis, Islamic Azad University of Mashhad, 1391, (in Farsi).
11. J.A.Miller and C.T.Bowman, "Mechanism And Modeling Of Nitrogen Chemistry in Combustion", Prog. Energy Combust. Sci., Vol.15, pp.287-338, 1989.
12. P.Glarborg and J.K.Dam, "The Reaction of Ammonia with Nitrogen Dioxide in a Flow Reactor: Implications for the NH<sub>2</sub> + NO<sub>2</sub> Reaction," International Journal of Chemical Kinetics, Vol. 27, 1207- 1220, 1995.
13. W.Duo, J.K.Dam and K.Ostergaard, "Kinetics of the Gas-Phase Reaction Between Nitric Oxide. Ammonia and Oxygen," The Canafian Journal Of Chemical Engineering. Vol. 70, October, 1992.
14. J.Brouwer and R.Fursenko, "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," Proc. Combust. Inst., vol. 30, no. 2, pp. 2429–2436, 2005.
15. L.D.Schmidt, "The Engineering Of Chemical Reactions," New York., Oxford University Press, 1998.

## English Abstract

### Effect of chemical kinetics in predicting NO<sub>x</sub> reduction with Selective Non Catalytic Reduction (SNCR) method

M.Shafa<sup>1</sup>, K.Mazaheri<sup>2</sup> and A.Alipour<sup>3</sup>

1- MSc Student, Mech. Eng., Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

2- Prof., Mech. Eng., Tarbiat Modares University, Tehran, Iran (Correspondent author)

3- PhD Candidate, Mech. Eng., Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

*Using fossil fuels in industrial furnaces and power plants have a major role in the production of NO<sub>x</sub>. In the present study, different chemical kinetics are used to predict NO<sub>x</sub> reduction by selective non-catalytic reduction method (SNCR). In SNCR method, ammonia is injected into stack flue gas, over a temprature rang from 1150 K to 1350 K, and converts NO<sub>x</sub> to nitrogen. To validate the present simulations, the results are comapred with experimental data of Ostberg et al which is a cylinder tube with 5 ft length and 5 in diameter. Four chemical*

*kinetics mechanisms, offered by Miller, Duo, Glarborg and Brouwer are used in this study to predict the NO<sub>x</sub> reduction. The results indicate that the Glarborg and Brouwer kinetics mechanism predicts the NO<sub>x</sub> reduction better than other mechanisms. In this study, the effect of inert materials (Hydrogen and Nitrogen) to improve the reduction of NO<sub>x</sub> by SNCR is also investigated. An important question that should be considered in SNCR method is the ammonia slip phenomenon. Using Glarborg chemical kinetic mechanism, it is found that the ammonia slip decreases by increasing the inlet temperature to 1250 K.*

**Keywords:** Pollution, NO<sub>x</sub>, Selective Non catalytic Reduction method, chemical kinetics.