การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของปฏิกิริยาออกซิเดชั่น ของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในพลูมโดยใช้วิธีมอนทิคาร์โล

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

นางสาว มุทิตา ตรีวิทยาภูมิ

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาวิศวกรรมสิ่งแวดล้อม
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2537

ISBN 974-584-825-5

ลิขสิทธิ์ของ บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

I16450950

Modeling of Sulfur Dioxide Oxidation in Plume
Using the Monte Carlo Method

Miss Mutita Triwittayapoom

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering
Department of Environmental Engineering
Graduate School
Chulalongkorn University
1994

ISBN 974-584-825-5

Copyright of the Graduate School, Chulalongkorn University

Thesis Title	Modeling of Sulfur Dioxide Oxidation in Plume Using the Monte Carlo Method
By	Miss Mutita Triwittayapoom
Department	Environmental Engineering
Thesis Advisor	Dr. Sangsant Panich

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master 's Degree.

Santi Thoongsuwan
.... Dean of Graduate School
(Associate Professor Dr. Santi Thoongsuwan)

Thesis Committee

Wongpun Lim
.... Chairman
(Associate Professor Wongpun Limpaseni)

Sant Pal
.... Thesis Advisor
(Dr. Sangsant Panich)

Sasithorn Boon-Long
.... Member
(Assistant Professor Dr. Sasithorn Boon-Long)

Theera Karot
.... Member
(Associate Professor Dr. Theera Karot)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

มุทิตา ตรีวิทยาภูมิ : การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของปฏิกิริยาออกซิเดชั่นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในพลูมโดยใช้วิธีมอนทิคาร์โล (MODELING OF SULFUR DIOXIDE OXIDATION IN PLUME USING THE MONTE CARLO METHOD)

อ. ที่ ปรึกษา : อ. ดร. แสงสันติ์ พานิช, 167 หน้า, ISBN 974-584-825-5

การวิจัยนี้ประกอบด้วยการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของปฏิกิริยาออกซิเดชั่นของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ในพลูมโดยใช้วิธีมอนทิคาร์โลสำหรับแหล่งกำเนิดแบบจุดและลักษณะภูมิประเทศเป็นที่ราบ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์แบบกายภาพและเคมีนี้สามารถประมวลผลการแพร่กระจายแบบเกาส์เสียนและการเปลี่ยนแปลงทางปฏิกิริยาเคมีของก๊าซซัลเฟอร์ไดออกไซด์ ปฏิกิริยาเคมีของ Brimblecombe และ Spedding (1974) ปฏิกิริยาเคมีของ Freiberg (1974) ในสภาพแวดล้อมที่มีแอมโมเนียมาก และ แอมโมเนียจำกัด และ ปฏิกิริยาเคมีของ Ibusuki, Ohsawa และ Takeuchi (1990) ในสภาพแวดล้อมที่มีแอมโมเนียมาก ทั้ง 3 ปฏิกิริยานี้เป็นปฏิกิริยาที่ใช้ในการศึกษาวิเคราะห์ความไวทางปฏิกิริยาเคมีด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ โดยทำการแปรเปลี่ยนตัวแปรต่าง ๆ ดังนี้ คือ ความเสถียรของบรรยากาศ ความชื้นสัมพัทธ์ อุณหภูมิ ความเข้มข้นของเหล็ก และ แอมโมเนีย ในการศึกษานี้ความเข้มข้นของซัลเฟตที่วัดได้ในอากาศบริเวณบางนาถูกเปรียบเทียบกับความเข้มข้นของซัลเฟตที่ประมวลผลได้จากปฏิกิริยาเคมีของ Freiberg (1974) และ Alkezweeny และ Powell (1977) ด้วย

ผลการศึกษาของการเกิดซัลเฟตของปฏิกิริยาเคมีทั้ง 3 แบบ พบว่า ปฏิกิริยาเคมีของ Freiberg (1974) ทั้งในสภาพแวดล้อมที่มีแอมโมเนียมาก และ แอมโมเนียจำกัด มีซัลเฟตเกิดขึ้นที่ความชื้นสัมพัทธ์สูง แต่ปฏิกิริยาเคมีของ Brimblecombe และ Spedding (1974) และ ปฏิกิริยาเคมีของ Ibusuki et al. (1990) ในสภาพแวดล้อมที่มีแอมโมเนียมาก กลับพบว่า มีการเกิดซัลเฟตได้น้อยมากในทุกสถานการณ์

ผลการวิเคราะห์ความไวทางปฏิกิริยาเคมีของปฏิกิริยาเคมีแบบ Freiberg (1974) ในสภาพแวดล้อมที่มีแอมโมเนียมาก และ แอมโมเนียจำกัด พบว่า อัตราการเกิดซัลเฟตจะเพิ่มขึ้น เมื่อความชื้นสัมพัทธ์ ความเข้มข้นของเหล็ก และ แอมโมเนียเพิ่มขึ้น และ เมื่ออุณหภูมิลดลง ในสภาพแวดล้อมที่มีแอมโมเนียมาก และ แอมโมเนียจำกัด จะพบว่า ปริมาณซัลเฟตจะเกิดขึ้นในกรณีแรกมากกว่าในกรณีที่สองสำหรับที่เงื่อนไขเดียวกัน ในการทดลองแปรเปลี่ยนความเสถียรของบรรยากาศ พบว่า ปริมาณซัลเฟตที่เกิดขึ้นมีค่าต่ำมากในความเสถียรของบรรยากาศแบบไม่เสถียร และ แบบสะเทิน ในทางกลับกัน ปริมาณซัลเฟตที่เกิดขึ้นมีค่าสูงมากในความเสถียรของบรรยากาศแบบเสถียรเนื่องจากเป็นปฏิกิริยาเคมีแบบอันดับที่สอง

ปริมาณซัลเฟตต่อซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่วัดได้ที่จุดตรวจวัดบริเวณบางนา และ ที่ความเร็วลมเท่ากับ 2 เมตร ต่อ วินาที เปรียบเทียบกับปริมาณซัลเฟตต่อซัลเฟอร์ไดออกไซด์ที่ได้จากปฏิกิริยาเคมีของ Freiberg (1974) ให้ข้อสรุปว่า ปฏิกิริยาเคมีของ Freiberg (1974) อาจมีความสำคัญในการออกซิไดซ์ซัลเฟอร์ไดออกไซด์ให้กลายเป็นซัลเฟต หากในสภาวะแวดล้อมมีปัจจัย เช่น ความชื้นสัมพัทธ์ ความเข้มข้นของแอมโมเนีย และ เหล็กที่สูง และ อุณหภูมิที่ต่ำ

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา วิศวกรรมสิ่งแวดล้อม

สาขาวิชา วิศวกรรมสุขาภิบาล

ปีการศึกษา 2537

ลายมือชื่อนิสิต มุทิตา ตรีวิทยาภูมิ

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา ....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม ....

C517508 : MAJOR SANITARY ENGINEERING
KEY WORD: SULFUR DIOXIDE OXIDATION / MATHEMATICAL MODEL / MONTE CARLO
MUTITA TRIWITTAYAPOOM : MODELING OF SULFUR DIOXIDE OXIDATION IN PLUME USING THE MONTE CARLO METHOD. THESIS ADVISOR : SANGSANT PANICH, Ph.D. 167 pp.
ISBN 974-584-825-5

This research succeeds in modeling of sulfur dioxide oxidation in plume using the Monte Carlo method for a single point source and flat terrain. The physico-chemical mathematical model is capable of simulating the Gaussian dispersions and chemical transformations of sulfur dioxide. The mathematical model was also used to assess sensitivity analysis of Brimblecombe and Spedding (1974)'s reaction rate, Freiberg (1974)'s reaction rate in ammonia-rich environment and in ammonia-deficient environment and Ibusuki, Ohsawa and Takeuchi (1990)'s reaction rate in ammonia-rich environment, which effects sulfate formation by varying parameters such as atmospheric stability class, relative humidity, temperature, iron and ammonia concentrations. In this study, the measured sulfate concentration in Bang Na was compared with the simulated sulfate concentrations calculated from Freiberg (1974)'s reaction rate and Alkezweeny and Powell (1977)'s first order reaction rate.

In comparison with yields of three chemical reactions, it is found that no yield occurs for Brimblecombe and Spedding (1974)'s reaction rate. Only at relative humidity of 99%, Freiberg (1974)'s reaction rate in both of ammonia-rich environment and ammonia-deficient environment plays a significant role in sulfate formation for every atmospheric stability class, temperature, iron concentration or ammonia concentration variations. Ibusuki et al. (1990)'s reaction rate in ammonia-rich environment does not cause significant yield for each atmospheric stability class, nor as a result of the temperature decrease or the relative humidity increase or the ammonia concentration increase or iron concentration increase.

The results of sensitivity analysis of Freiberg(1974)'s reaction rate in ammonia-rich environment and in ammonia-deficient environment indicate that the sulfate formation increases with increasing relative humidity, iron and ammonia concentrations and with decreasing temperature. Between ammonia-rich environment and ammonia-deficient environment, the yield in the first condition is much more than that in the latter condition for the same given condition. In the cases of varying atmospheric stability class, the sulfate production is very low in the unstable and neutral atmospheric stabilities, vice versa, the conversion of sulfur dioxide to sulfate is very high in the stable atmosphere due to the nature of second order reaction rate.

The measured yield during the dry season at the location of Bang Na with wind velocity of 2 m/s and Freiberg (1974)'s yields in some cases provide the comparable yields, which indicate that Freiberg (1974)'s reaction rate may become important if relative humidity, ammonia and iron concentrations are high with low temperature in the environment.

ภาควิชา วิศวกรรมสิ่งแวดล้อม
ลายมือชื่อนิสิต มุทิตา ตรีวิทยภูมิ
สาขาวิชา วิศวกรรมสุขาภิบาล
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา
ปีการศึกษา 2537
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Acknowledgment

First I would like to express my profound gratitude to my advisor, Dr. Sangsant Panich, for his understanding, hard working, invaluable suggestions, grammar check of this report and encouragement in all aspects throughout the period of this thesis work.

Also, I would like to gratefully thank to Associate Professor Wongpun Limpaseni, Assistant Professor Dr. Sasithorn Boon-Long and Associate Professor Dr. Theera Karot for kindly accepting to be my committee members.

Furthermore I wish to thankfully acknowledge all of brothers, sisters, friends and staffs of Chulalongkorn University Unix Center for their help and support.

To my parents whose invariable love, care and understanding are beyond the reach of words, I dedicate this modest piece of work.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Contents

Page

Thai Abstract iv

English Abstract v

Acknowledgement vi

List of Tables xi

List of Figures xii

Nomenclature xx

Chapter

I Introduction 1

1.1 Rationale of the Study 1

1.2 Objectives of the Study 2

1.3 Scopes of the Study 2

1.4 Expected Uses of the Study 3

II Literature Review 4

2.1 Atmospheric Dispersion 4

2.2 Mathematical Models of Air Pollution Simulations 6

2.2.1. Analytical Models 6

- Gaussian Plume Model 7

2.2.2. Numerical Models 12

- Numerical Models Simulated by the Monte Carlo Method 12

2.3 Sulfur Dioxide 14

2.3.1 Sources of Sulfur Dioxide 14

2.3.2 Properties of Sulfur Dioxide 15

2.4 Atmospheric Oxidation of Sulfur Dioxide 15

2.4.1 Photochemical Reactions in the Gas-Phase 15

2.4.2 Heterogeneous Reactions in the Liquid-Phase 16

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Contents (Continued)

Page

Chapter

2.4.2.1 Mechanisms of the Catalytic Oxidation of Sulfur Dioxide in the Liquid-Phase 16
2.4.2.2 Absorption Equilibria of Sulfur Dioxide in Water 17
2.4.2.3 Liquid-Phase Oxidation of Sulfur Dioxide by O_2 Catalyzed by Transition Metal Ions 18
2.5 Potential Role of Ammonia on the Atmospheric Oxidation of Sulfur Dioxide in the Liquid-Phase 22
III Methodology 24
3.1 Development of Mathematical Model of Sulfur Dioxide Oxidation in Plume Using the Monte Carlo Method 25
3.1.1 Description of Physical Mathematical Model 25
3.1.1.1 Advection 25
3.1.1.2 Dispersion 26
3.1.2 Description of Chemical Reaction Mathematical Model 29
3.1.2.1 The First Order Reaction Rate of Sulfur Dioxide Oxidation 30
3.1.2.2 The Non-First Order Reaction Rate of Sulfur Dioxide Oxidation 31
- In Case of Freiberg (1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment 35
- In Case of Ibusuki, Ohsawa and Takeuchi (1990)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment 36
- In Case of Freiberg (1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment 42

Contents (Continued)

Page

Chapter

3.2 Verification of Mass Conservation of Mathematical Model of Sulfur Dioxide Oxidation in Plume Using the Monte Carlo Method 47

3.3 Evaluation of the Values of the Simulated Horizontal and Vertical Dispersion Coefficients in Comparison to Pasquill-Gifford Dispersion Coefficients 47

3.3.1 Calculation of the Empirical Concentrations of Sulfur Dioxide 48

3.3.2 Calculation of the Numerical Concentrations of Sulfur Dioxide 49

3.4 Application of the Mathematical Model of Sulfur Dioxide Oxidation in Plume Using the Monte Carlo Method to a Stack of the South Bangkok Power Plant in Samut Prakarn 50

3.5 Sensitivity Analysis of Chemical Reactions of the Mathematical Model of Sulfur Dioxide Oxidation in Plume Using the Monte Carlo Method with a Stack of the South Bangkok Power Plant in Samut Prakarn 51

IV Results and Discussion 56

4.1 Verification of Mass Conservation of Mathematical Model of Sulfur Dioxide Oxidation in Plume Using the Monte Carlo Method 56

4.2 Evaluation of the Values of the Simulated Horizontal and Vertical Dispersion Coefficients in Comparison to Pasquill-Gifford Dispersion Coefficients 57

4.3 Sensitivity Analysis of Chemical Reactions of Mathematical Model of Sulfur Dioxide Oxidation in Plume Using the Monte Carlo Method

Contents (Continued)

Page

Chapter

with a Stack of the South Bangkok Power Plant in Samut Prakarn 59

4.3.1 Brimblecombe and Spedding (1974)'s Reaction Rate 60

4.3.2 Freiberg (1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment 60

4.3.2.1 Effect of Relative Humidity on %Yield 78

4.3.2.2 Effect of Temperature on %Yield 79

4.3.2.3 Effect of Iron Concentration on %Yield 79

4.3.2.4 Effect of Ammonia Concentration on %Yield 80

4.3.2.5 Effect of Atmospheric Stability Class on %Yield 81

4.3.3 Ibusuki, Ohsawa and Takeuchi (1990)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment 82

4.4 Evaluation of Simulated Sulfate Concentrations in Comparison to Measured Sulfate Concentrations of a Stack of the South Bangkok Power Plant in Samut Prakarn 83

V Conclusions and Recommendations 85

5.1 Conclusions 85

5.2 Recommendations 88

References 89

Appendix A Details of Programs of Physico-Chemical Mathematical Models ... 93

Appendix B Results of Simulations 110

Vita 167

List of Tables

Table Page

2.1 Pasquill Chart for Determing Atmospheric Stability Class 9

2.2 Effect of Temperature on the Value of $K_o * \beta_s^2 * K_s^2 * \beta_n^3 * K_n^3 / K_w^3$ 19

3.1 The Probability of Sulfur Dioxide to Sulfate Transformation for the Non-First Order Reaction Rate 34

3.2 The Data of the 5th Sulfur Dioxide Emission Source 51

3.3 Measured Sulfur Dioxide and Sulfate Concentrations in Bang Na 54

4.1 Comparison of Pasquill-Gifford Dispersion Coefficients and the Simulated Horizontal and Vertical Dispersion Coefficients for Every Atmospheric Stability Class at 1, 5 and 10 km Downwind from the Source 58

4.2 Comparison of %Yield of Brimblecombe and Spedding (1974)'s Reaction Rate, Freiberg (1974)'s Reaction Rate and Ibusuki, Ohsawa and Takeuchi (1990)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment at 10 km Downwind from the Source 61

4.3 %Yield of Freiberg (1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment at 10 km Downwind from the Source 75

4.4 Comparison of Measured Yield, Freiberg's Yields and Alkezweeny and Powell's Yields at Temperature of 25 °C and 7 km Downwind from the Source 83

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

List of Figures

Figure Page

2.1 Three-Dimensional Concentration Profiles of Gaussian Plume Model 8

2.2 Pasquill-Gifford Dispersion Coefficients 10

2.3 ASME Dispersion Coefficients 11

3.1 Dispersion of Sulfur Dioxide or Sulfate Aerosol Concentration in Y or Z Direction 27

3.2 Flow Chart of the Physico-Chemical Mathematical Model for Brimblecombe and Spedding (1974)'s Reaction Rate, Freiberg (1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment and Ibusuki et al., (1990)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment 38

3.3 Flow Chart of the Physico-Chemical Mathematical Model for Freiberg (1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment 44

3.4 The Location of Survey Area 53

4.1 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class A at 1 km Downwind from the Source 111

4.2 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class B at 1 km Downwind from the Source 112

4.3 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class C at 1 km Downwind from the Source 113

4.4 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class C at 5 km Downwind from the Source 114

List of Figures (Continued)

Figure Page

4.5 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class C at 10 km Downwind from the Source 115

4.6 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class D at 1 km Downwind from the Source 116

4.7 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class D at 5 km Downwind from the Source 117

4.8 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class D at 10 km Downwind from the Source 118

4.9 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class E at 1 km Downwind from the Source 119

4.10 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class E at 5 km Downwind from the Source 120

4.11 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class E at 10 km Downwind from the Source 121

4.12 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class F at 1 km Downwind from the Source 122

4.13 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

List of Figures (Continued)

Figure Page

for Atmospheric Stability Class F at 5 km Downwind from the Source 123

4.14 Comparison of the Empirical and Numerical Concentrations of SO_2 for Atmospheric Stability Class F at 10 km Downwind from the Source 124

4.15 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class C at [Fe] = 1201 ng/m^3 and $[NH_3]$ = 50 ppb 125

4.16 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class C at [Fe] = 1201 ng/m^3 and $[NH_3]$ = 80 ppb 126

4.17 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class C at [Fe] = 1201 ng/m^3 and $[NH_3]$ = 100 ppb 127

4.18 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class C at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and $[NH_3]$ = 50 ppb 128

4.19 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class C at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and $[NH_3]$ = 80 ppb 129

4.20 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class C at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and $[NH_3]$ = 100 ppb 130

4.21 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class D at [Fe] = 1201 ng/m^3

List of Figures (Continued)

Figure Page

and $[NH_3]$ = 50 ppb 131

4.22 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class D at [Fe] = 1201 ng/m^3 and $[NH_3]$ = 80 ppb 132

4.23 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class D at [Fe] = 1201 ng/m^3 and $[NH_3]$ = 100 ppb 133

4.24 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class D at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and $[NH_3]$ = 50 ppb 134

4.25 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class D at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and $[NH_3]$ = 80 ppb 135

4.26 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class D at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and $[NH_3]$ = 100 ppb 136

4.27 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class E at [Fe] = 1201 ng/m^3 and $[NH_3]$ = 50 ppb 137

4.28 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class E at [Fe] = 1201 ng/m^3 and $[NH_3]$ = 80 ppb 138

4.29 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class E at [Fe] = 1201 ng/m^3 and $[NH_3]$ = 100 ppb 139

List of Figures (Continued)

Figure Page

4.30 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class E at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and [NH_3] = 50 ppb 140

4.31 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class E at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and [NH_3] = 80 ppb 141

4.32 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class E at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and [NH_3] = 100 ppb 142

4.33 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class F at [Fe] = 1201 ng/m^3 and [NH_3] = 50 ppb 143

4.34 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class F at [Fe] = 1201 ng/m^3 and [NH_3] = 80 ppb 144

4.35 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class F at [Fe] = 1201 ng/m^3 and [NH_3] = 100 ppb 145

4.36 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class F at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and [NH_3] = 50 ppb 146

4.37 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich Environment for Atmospheric Stability Class F at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and [NH_3] = 80 ppb 147

4.38 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Rich

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

List of Figures (Continued)

Figure Page

Environment for Atmospheric Stability Class F at [Fe] = 0.1 mg/m^3 and [NH_3] = 100 ppb 148

4.39 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class C at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 1201 ng/m^3 149

4.40 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class C at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 0.1 mg/m^3 150

4.41 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class D at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 1201 ng/m^3 151

4.42 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class D at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 0.1 mg/m^3 152

4.43 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class E at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 1201 ng/m^3 153

4.44 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class E at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 0.1 mg/m^3 154

4.45 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class F at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 1201 ng/m^3 155

4.46 %Yield VS Time of Freiberg(1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class F at Relative

List of Figures (Continued)

Figure Page

Humidity = 99% and [Fe] = 0.1 mg/m³ 156

4.47 Comparison of Freiberg(1974)'s Yield between in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class C at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 1201 ng/m³ 157

4.48 Comparison of Freiberg(1974)'s Yield between in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class C at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 0.1 mg/m³ 158

4.49 Comparison of Freiberg(1974)'s Yield between in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class D at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 1201 ng/m³ 159

4.50 Comparison of Freiberg(1974)'s Yield between in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class D at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 0.1 mg/m³ 160

4.51 Comparison of Freiberg(1974)'s Yield between in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class E at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 1201 ng/m³ 161

4.52 Comparison of Freiberg(1974)'s Yield between in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class E at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 0.1 mg/m³ 162

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

List of Figures (Continued)

Figure Page

4.53 Comparison of Freiberg(1974)'s Yield between in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class F at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 1201 ng/m^3 163

4.54 Comparison of Freiberg(1974)'s Yield between in Ammonia-Rich Environment and in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class F at Relative Humidity = 99% and [Fe] = 0.1 mg/m^3 164

4.55 Sulfur Dioxide, Remaining Ammonia and Sulfate Concentration Profiles of Freiberg (1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class D at 4 km Downwind from the Source, Relative Humidity = 99%, T = 25 °C, [Fe] = 0.1 mg/m^3 and [NH_3] = 100 ppb 165

4.56 Sulfur Dioxide, Remaining Ammonia and Sulfate Concentration Profiles of Freiberg (1974)'s Reaction Rate in Ammonia-Deficient Environment for Atmospheric Stability Class F at 2 km Downwind from the Source, Relative Humidity = 99%, T = 20 °C, [Fe] = 0.1 mg/m^3 and [NH_3] = 100 ppb 166

Nomenclature

C	concentration of the non-gaseous pollutant	(g/m^3)
d	stack diameter	(m)
g	gravitational acceleration	(m/s^2)
Δh	plume rise	(m)
H	effective height	(m)
K_d	diffusion coefficient	(m^2/s)
K_n	dissociation constant of ammonia	(mole/m^3)
K_o	rate constant of the reaction	(m^3/mole-min)
K_s	first dissociation constant of sulfurous acid	(mole/m^3)
K_w	dissociation constant of water	(mole/m^3)^2
K_x	diffusion coefficient in x direction	(m^2/s)
K_y	diffusion coefficient in y direction	(m^2/s)
K_z	diffusion coefficient in z direction	(m^2/s)
m	m^{th} order with respect to oxidizing agent or inert substance or catalyst concentration	(-)
n	n^{th} order with respect to sulfur dioxide concentration	(-)
P	probability of sulfur dioxide to sulfate transformation of each sulfur dioxide quantum	(-)
P1	probability of sulfur dioxide to sulfate transformation of the first sulfur dioxide quantum	(-)
P2	probability of sulfur dioxide to sulfate transformation of the second sulfur dioxide quantum	(-)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Nomenclature (Continued)

Ptotal	probability of sulfur dioxide to sulfate transformation of the both sulfur dioxide quanta	(-)
Q	sulfur dioxide emission rate	(g/s)
RH	relative humidity	(-)
t	time	(s or min)
T	temperature	(^{o}C)
T_a	absolute temperature of ambient atmosphere	(K)
T_s	absolute flue gas exit temperature	(K)
$\bar{u}$	average wind velocity	(m/s)
V_s	stack gas exit velocity	(m/s)
x	distance downwind from the source	(m)
y	distance horizontally from the plume center line	(m)
z	distance vertically from the plume center line	(m)
β_n	Ostwald's constant for ammonia	(-)
β_s	Ostwald's constant for sulfur dioxide	(-)
λ_z	pressure-lowering coefficient for ammonium sulfate	(m^3/mole)
σ_y	horizontal dispersion coefficient	(m)
σ_z	vertical dispersion coefficient	(m)
[ ]	molar concentration of the component	(mole/m^3)
subscript $[\ ]_o$	initial condition	(-)
subscript $[\ ]_{react}$	reacting condition	(-)
subscript $[\ ]_{remaining}$	remaining condition	(-)
subscript $(\ )_{acc}$	accumulation condition	(-)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Nomenclature (Continued)

subscript $(\ )_{in}$	input condition	(-)
subscript $(\ )_{out}$	output condition	(-)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย