

# Desarrollo de un Modelo de Predicción de Emisiones para Turbinas de Gas de Aviación Basado en Redes de Reactores

José M<sup>a</sup> García-Oliver<sup>1</sup>, Jaime Gimeno García<sup>1</sup>, Borja Martínez Corzo<sup>1</sup>, Javier Navarro Laboulais<sup>1</sup>,  
Pénélope Leyland<sup>-1,2</sup>

<sup>1</sup>Universitat Politècnica de Valencia, Valencia, España

<sup>2</sup>Advanced Engineering Design Solutions (AEDS), Lausanne, Suiza

## Resumen

El presente trabajo se centra la predicción emisiones contaminantes en motores turbina de gas. Para ello, se ha desarrollado una red de reactores químicos, en la que cada reactor modela el comportamiento de cada zona de la cámara de combustión en 0D/1D. Dicha red ha sido desarrollada en base al motor de aviación CFM56 -7B27/B1F y validada con los datos de emisiones (EINO<sub>x</sub>, EICO y EIHC) proporcionados por ICAO del mismo motor para el punto de operación de máxima potencia y su comparación posterior con los puntos de operación restantes. Finalmente se ha realizado un estudio detallado de la formación de especies y la termodinámica en cada reactor para analizar las diferencias y similitudes entre el modelo y los datos experimentales.

**Palabras clave:** Modelado; Red de reactores; Emisiones; Combustión.

## Abstract

The present work focuses on emission prediction in gas turbine engines. Thus, a chemical kinetics-based reactor network has been developed, in which a set of reactors model the behavior of each different zones of the combustion chamber in 0D/1D. The network has been developed based on the CFM56 -7B27/B1F aviation engine, and validated with the emission data (EINO<sub>x</sub>, EICO and EIHC) provided by ICAO of the same engine at maximum power and compared to other operating conditions. Finally, a detailed study of species formation and thermodynamics in every reactor is carried out to analyze the differences and similarities between the model and experimental data.

**Keywords:** Modelling; reactor network; emissions; combustion.

## 1. Introducción

Hoy en día, las simulaciones numéricas son empleadas para casi la totalidad de los campos de la termofluidodinámica. Un ejemplo relevante son los estudios de dinámica de fluidos computacional (CFD) relacionados con la combustión, las emisiones contaminantes o las prestaciones de los motores. No obstante, este tipo de simulaciones conllevan un gran coste computacional y de recursos. En aquellos estudios en los que lo más importante es obtener información detallada de la química para predecir la formación de especies se emplean herramientas de cálculo optimizadas para obtener un análisis con mecanismos químicos detallados como el que se muestra en [1], con 1550 especies y 6000 reacciones.

Con frecuencia también se usan en estas herramientas mecanismos algo más reducidos [2-3] (91 especies y 991 reacciones en [2] y 225 especies y 1800 reacciones en [3]) con un coste computacional mucho menor. Este es el caso de estudios como los mostrados en [4,5,6,7-8], los cuales emplean este tipo de herramientas para modelar cámaras de combustión de turbina de gas mediante una red de reactores 0D/1D en la que discretizan los fenómenos que acontecen en cada zona. Habitualmente se distingue en estas cámaras de combustión entre zona Primaria (PZ), Intermedia (IZ) y de dilución (DZ). En [7-8] se muestra el estudio detallado de estas redes para finalmente hacer una validación con los datos del motor GE CF6-80E1 y de emisiones provenientes del banco de datos de ICAO (International Civil Aviation Organisation) [9]. A pesar

de que [8] es una mejora del estudio realizado en [7], no dejan de haber diferencias significativas, en lo que a las emisiones respecta, para bajos puntos de potencia. A esto, se le suma que en ese estudio se realizan dos redes, una de ellas predice bien los índices de emisiones de diferentes contaminantes, a saber, EICO (monóxido de carbono), EIHC (hidrocarburos sin quemar) y EINOx (óxidos de nitrógeno), todos ellos cuantificados en  $g/(kg-fuel)$ . Esto es debido a que es sencillo ubicar y ajustar la temperatura de la combustión en el reactor, pero este tipo de modelos presentan una serie de problemas intrínsecos como la incertidumbre en la separación de flujos másicos y el porcentaje de adición de aire en cada zona modelada, el uso de un mecanismo químico detallado para el combustible adecuado y la dificultad para encontrar datos acerca del motor que se pretende someter a estudio (prestaciones, puntos de operación, geometría...). Por este motivo, aun con la combustión calibrada y validada, si la zona modelada no presenta la proporción combustible/aire o el volumen adecuado, la formación de especies no será la correcta, y se encontrarán diferencias significativas en la validación. En definitiva, para validar un modelo de esta índole, se requiere primero una fase de calibración. Por otra parte, en los estudios de [10-11] se realiza un modelado de una red de reactores basada en las cámaras de combustión CIAM y HISAC, ambas supersónicas, donde se discretizan las diferentes zonas en términos de fracción de mezcla y tiempo de residencia en cada uno de los reactores. Frente a los estudios anteriores [7-8], que imponían estados de equilibrio químico en cada reactor, en este caso se emplea cinética química, que

valida el modelo con datos experimentales de sendas cámaras. Se obtienen errores relativamente bajos para el EINOx, pero no con otras emisiones de como el EICO, las cuales suelen presentar más dificultades para ser predichas. Además, los resultados se comparan con otros motores con relaciones de compresión similares obteniéndose valores del mismo orden, pero no cercanos.

De esta revisión de antecedentes se deduce que cada estudio presenta análisis e hipótesis interesantes en sus modelos. Sin embargo, ninguno de ellos consigue calibrar y validar con bajos errores las emisiones comentadas con una misma red y varios puntos de operación, sobre todo si estos varían en todo el rango de potencia del motor. Por lo tanto, el objetivo de este artículo es la construcción de un modelo de red de reactores implementado con el software libre Cantera [12] en el que se recogen la experiencia e hipótesis comentadas anteriormente para predecir las emisiones en motores de aviación comerciales. En concreto, en el presente trabajo se realiza la validación del modelo para el motor CFM56 - 7B27/B1F.

## 2. Metodología

El trabajo parte de los datos geométricos y termodinámicos del aeromotor de [13]. Con ellos, se ha podido construir una red de reactores cero y unidimensionales (0D/1D) en los que se definen la temperatura, la presión y la composición del gas en la entrada para todos los reactores, además del volumen en el caso de los reactores 0D y la sección transversal junto con la longitud del reactor en el caso de los 1D.

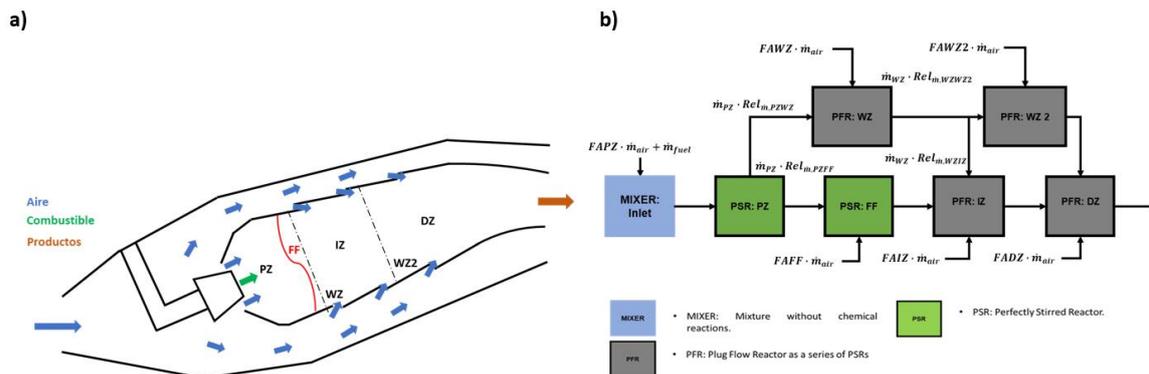


Figura 1. Esquema genérico de cámara de combustión para motor de aviación (a) y modelo de red de reactores 0D/1D para el motor CFM56 7B27/B1F (b). Fuente: elaboración propia.

acerca más el modelo a la realidad. No obstante, este modelo introduce nuevas incógnitas que se suman a las comentadas anteriormente, como son los tiempos de residencia o la separación en volúmenes de cada zona. Con todo ello, y después de realizar un estudio CFD previo, se obtiene una estimación de esos tiempos de residencia y fracciones de mezcla en cada zona, y se

Los reactores 0D se definen como PSR (Perfectly Stirred Reactors o reactores de mezcla perfecta) y funcionan con un gas ideal y a presión constante. En el modelo físico del reactor se resuelven las ecuaciones de conservación para la masa, especies y energía.

Por otra parte, los reactores 1D se modelan físicamente como reactores PFR (Plug Flow Reactor o reactores de

flujo pistón). En este caso, las ecuaciones que gobiernan el modelo también son las de conservación de masa, especies y energía. Además, se añade una ecuación adicional de conservación del momento, ya que ahora se considera avance en la dirección axial del flujo.

Por último, cabe destacar que el modelo químico de estos reactores se resuelve mediante cinética química empleando las ecuaciones expuestas en [15,16,17,18,19,20,21]. Esto permite evaluar la interacción entre el tiempo de residencia y la composición química de la mezcla, tanto en reactores 0D como en 1D. Las tasas cinéticas de reacción vienen definidas por el mecanismo químico de Luche [2], desarrollado para queroseno y que emplea como combustible de sustitución una mezcla de decano (NC10H22), propilbenceno (PHC3H7) y ciclohexano (CYC9H18).

## 2.1. Modelo de redes de reactores

Con los modelos de PSR y PFR comentados, se construye una red de reactores que pretende emular la combustión de un motor de aviación convencional modelando cada una de las zonas de éste.

En la Figura 1a se muestra, en primer lugar, un esquema convencional para una cámara de combustión de un motor de aviación sobre la que se ha superpuesto la red de reactores. Esta, se divide principalmente en tres zonas: zona primaria (PZ) donde el dosado relativo es rico, (ecuación (1), con  $\dot{m}_{fuel}$  y  $\dot{m}_{air}$  como caudales másicos de combustible y aire,  $S$  la relación estequiométrica aire/combustible), zona intermedia donde el dosado es pobre y zona de dilución donde el dosado es muy pobre.

$$\phi = \frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} S \quad (1)$$

Para buscar una mayor discretización de los fenómenos que acontecen en la cámara, se crean otras dos zonas: frente de llama (FF), zona de muy poco volumen de igual sección transversal que la zona primaria y en la que el dosado es igual/ligera superior al estequiométrico, y la zona de pared (WZ) una zona de gran longitud y reducida sección transversal donde el dosado es extremadamente pobre pues por esa zona trasiega, principalmente, aire. Esta última zona se divide en dos para modelar la interacción entre las zonas de pared e intermedia/dilución. La variación de los citados dosados se realiza mediante la adición de aire, separado previamente antes de entrar a la cámara en dos corrientes (primario y secundario). El aire secundario se introduce en la cámara de combustión por los orificios mostrados en la Figura 1a.

Por otra parte, para la obtención del tiempo de residencia, la fracción de mezcla y los índices de emisiones de cualquier sustancia M se emplean las expresiones de las ecuaciones (2) a (4), donde  $Y_M$  es la

fracción másica de la especie M a la salida del quemador:

$$\tau_{res} = \frac{m}{\dot{m}} \quad (2)$$

$$Z = \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_f + \dot{m}_a} = \frac{\phi}{s + \phi} \quad (3)$$

$$EI_M = 1000 \frac{Y_M}{Z} \quad (4)$$

A su vez, para obtener el índice de emisiones del NOx se emplea una expresión con la suma ponderada de los pesos moleculares del NO y del NO<sub>2</sub>, ecuación (5).

$$EI_{NO_x} = 1000 \frac{Y_{NO} \frac{PM_{NO_2} + Y_{NO_2}}{PM_{NO}}}{Z} \quad (5)$$

A modo de resumen se muestra en la Tabla 1 las condiciones de operación del motor [13] para los diferentes puntos de operación disponibles del motor CFM56. Estas condiciones son las referentes a la estación 3 del ciclo del motor, es decir, salida del compresor y entrada a la cámara de combustión y se definen como: caudales másicos a la entrada,  $\dot{m}_{fuel,in}$   $\dot{m}_{air,in}$ , que definen el dosado relativo global de la cámara ( $\phi_{glob}$ ), Temperatura del aire a la entrada ( $T_{a,in}$ ), Presión ( $P_{in}$ ), y Temperatura de las zonas de la cámara ( $T_{PZ}$ ,  $T_{IZ}$  y  $T_{DZ}$ ). Por otra parte, en la tabla 2 se muestran los datos geométricos referentes a las diferentes zonas de la cámara [13].

Tabla 1. Tabla resumen de condiciones de entrada y contorno del modelo [13].

Puntos de operación para CFM56 7B27/B1F				
Dato	T - O	Climb	App	Idle
$\dot{m}_{air} \left[ \frac{kg}{s} \right]$	44.52	39.1	20.87	12.12
$\dot{m}_{fuel} \left[ \frac{kg}{s} \right]$	1.28	1.04	0.349	0.119
$P_{in} [MPa]$	2.9	2.48	1.13	0.559
$T_{a,in} [K]$	800	764	613	505
$T_{PZ} [K]$	2600	2500	1900	1300
$T_{IZ} [K]$	2400	2300	1700	1200
$T_{DZ} [K]$	1750	1650	1250	900
$\phi_{glob} [-]$	0.42	0.39	0.245	0.144

Tabla 2. Tabla resumen de datos geométricos [13]

Datos geométricos para CFM56 7B27/B1F			
Zona	L [m]	A [m <sup>2</sup> ]	V [m <sup>3</sup> ]
PZ	0.05137	0.1816	0.0093288
FF	0.00173	0.1816	0.0003142
IZ	0.05970	0.2160	0.0128952
WZ	0.05970	0.0580	0.0034626
WZ2	0.06480	0.0580	0.0037584
DZ	0.06480	0.2880	0.0186624

Para las secciones transversales se ha seleccionado una relación  $\frac{A_{CORE}}{A_{TOT}}$  de 0.8 y  $\frac{A_{WALL}}{A_{TOT}}$  de 0.2. Por último, se muestran en la tabla 3 los valores utilizados tras la correspondiente calibración para las fracciones de aire añadidas en cada reactor (porcentaje de aire secundario añadido en cada zona), así como la separación de flujos relativa entre estos. Esto último significa que cada valor de  $REL_{\dot{m},XY}$  es el porcentaje de gasto másico total en tanto por uno que se dirige del reactor X al reactor Y.

Tabla 3. Tabla resumen de fracciones de aire y separación de flujos.

Nombre	Definición	Valor [-]
$F_{A,PZ}$	Aire en zona primaria	0.2
$F_{A,FF}$	Aire en frente de llama	0.21
$F_{A,IZ}$	Aire en zona intermedia	0.29
$F_{A,WZ}$	Aire en zona pared 1	0.01
$F_{A,WZ2}$	Aire en zona pared 2	0.29
$F_{A,DZ}$	Aire en zona dilución	0
$REL_{\dot{m},PZFF}$	$\dot{m}$ entre PZ y FF	0.99
$REL_{\dot{m},PZWZ}$	$\dot{m}$ entre PZ y WZ	0.01
$REL_{\dot{m},FFIZ}$	$\dot{m}$ entre FF e IZ	1
$REL_{\dot{m},WZIZ}$	$\dot{m}$ entre WZ e IZ	0.8
$REL_{\dot{m},WZWZ2}$	$\dot{m}$ entre WZ y WZ2	0.2
$REL_{\dot{m},IZDZ}$	$\dot{m}$ entre IZ y DZ	1
$REL_{\dot{m},WZ2DZ}$	$\dot{m}$ entre WZ2 y DZ	1

Fuente: Elaboración propia.

El esquema de la red de reactores, así como la nomenclatura empleada se observa en la Figura 1b. En aquellos reactores donde se tiene un dosado pobre se ha optado por el reactor 1D (PFR), pues contempla en mejor medida las emisiones de especies como el CO. En las zonas de dosado rico y estequiométrico se opta por el reactor 0D (PSR), pues en estas zonas se generan los NOx debido a las elevadas temperaturas. Por este motivo, no es necesario tener en cuenta la longitud de la zona, sino el tiempo de residencia y la temperatura. Por último, se ha considerado una temperatura del combustible de 400 [K], y la temperatura de la mezcla aire combustible se obtiene de un mezclador introducido previamente a la zona primaria (véase Figura 1b) donde el fluido no evoluciona químicamente.

### 3. Resultados

Los resultados obtenidos se pueden agrupar en dos secciones. Una primera sección de calibración del modelo en la que se pretende obtener los mismos resultados termodinámicos de Z. Saboohi et al. [13] y las mismas emisiones que las presentadas por ICAO [9] para cuatro puntos de operación de la aeronave CFM56

7B27/B1F: Take-off (T/O, despegue), Climb (ascenso), App (aproximación) e Idle (ralentí). En la otra, se pretende analizar en profundidad cada reactor para observar los resultados termodinámicos y de especies en cada zona de la cámara de combustión.

#### 3.1. Calibración del modelo

Para la calibración del modelo se han escogido como variables de ajuste tanto la longitud del frente de llama,  $L_{FF}$  [m] (esto influye directamente en la longitud de la zona primaria) como las fracciones de aire,  $F_{A,x}$  y separación de flujos en los reactores,  $REL_{\dot{m},XY}$ . En este proceso se busca un valor de dosados relativos en cada reactor que emule el valor real de las zonas de la cámara. Además, cabe destacar que la calibración se ha efectuado para el punto de máxima potencia (despegue) y se ha hecho un posterior barrido de condiciones hacia los demás puntos de operación para evaluar la capacidad predictiva del modelo.

Los resultados de la calibración se observan en la Figura 2. En primer lugar se muestran: el dosado global (Figura 2a), el tiempo de residencia (Figura 2b) y la temperatura de salida (Figura 2c) de cada uno de los reactores de la cámara. Estas Figuras son mostradas para comprobar la conservación de los gastos másicos de aire y combustible y una liberación de calor correcta. Así pues, los valores de estos parámetros son iguales a los referidos en [13] y, por tanto, el modelo tiene predicciones termodinámicas consistentes. Por otra parte, la Figura 2b muestra el tiempo de residencia total de la cámara. Si bien no se dispone de valores de referencia para el presente motor hay que señalar que el combustor CIAM – M [10], similar al actual presenta un tiempo de residencia global de 6.7 [ms] para máxima potencia (despegue). Dado que el tiempo que aquí se muestra para ese mismo punto de operación es de aproximadamente 8.4 [ms], se puede afirmar que el valor está en el orden de magnitud y que, en consecuencia, el volumen de la cámara también está en el orden de magnitud adecuado para los datos geométricos escogidos.

Por lo que a las emisiones respecta, se muestran las de: Hidrocarburos sin quemar, EIHC (Figura 2d), Monóxido de carbono, EICO (Figura 2e) y Óxidos nítricos, NOx (Figura 2f). Dada la complejidad del modelado químico para predecir emisiones, se puede afirmar que los resultados obtenidos son bastante realistas para los puntos de operación de alta y media potencia si son comparados con [9]. No obstante, si se observan los valores obtenidos para el punto de mínima potencia (ralentí) se aprecian diferencias algo más notorias en el caso de EICO y EINOx y, sobre todo, en el caso de EIHC. Para discernir cual es el posible motivo de las diferencias en baja potencia de las emisiones se procede a realizar un análisis detallado de cada zona de la cámara.

#### 3.2. Análisis detallado del modelo

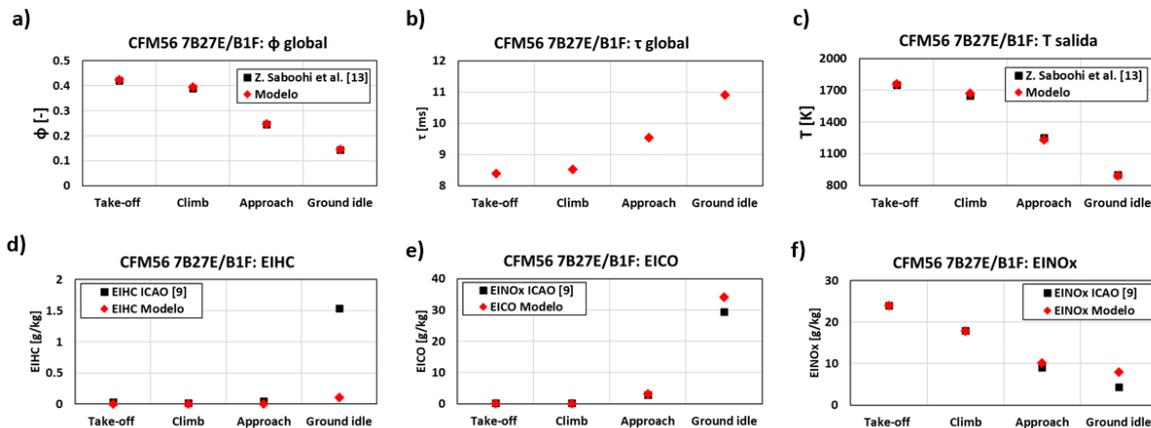


Figura 2. Comparación de resultados de la calibración del modelo con los datos de [9 – 13]. Fuente: elaboración propia.

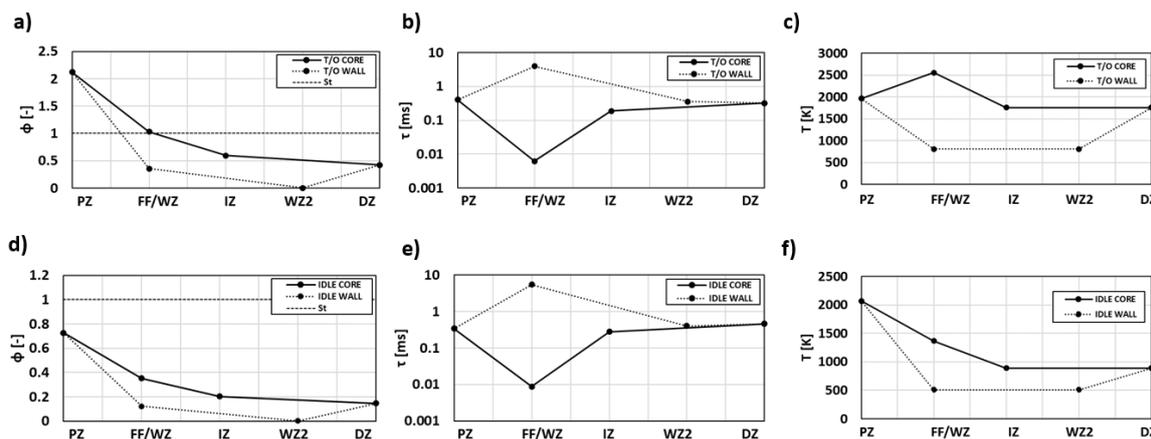


Figura 3. Análisis termodinámico detallado de cada zona en la cámara de combustión. T/O = despegue, (a,b,c) IDLE = ralentí (d,e,f). Fuente: elaboración propia.

El análisis detallado del comportamiento de la red de reactores muestra en las Figuras 3 y 4 los resultados termodinámicos y de fracción másica de especies de dos puntos de operación: el calibrado (despegue) y el que arroja mayores diferencias en la predicción de emisiones (ralentí); de este modo se pueden ver las diferencias más relevantes de las variables críticas del modelo.

En la Figura 3 se representan para los dos puntos de operación los dos caminos que sigue el flujo a lo largo de la cámara de combustión, esto es, un camino para la zona central del combustor que engloba las zonas: PZ, FF, IZ y DZ llamado CORE y otro para la zona de pared, el cual engloba las zonas: PZ, WZ, WZ2 y DZ llamado WALL. En lo que al dosado respecta, se puede ver que en el despegue (Figura 3a) cada zona guarda concordancia con los valores convencionales de un combustor, siendo la zona primaria la de mayor cantidad de combustible resultando en un dosado rico.

A continuación, el flujo sigue el camino hacia el frente de llama, donde se le añade un porcentaje de aire y la mezcla se acerca mucho a la estequiométrica. A partir de aquí, el flujo se ve diluido en aire hasta llegar al final de la cámara reduciendo más el dosado y la temperatura. En el camino de la zona de pared, la mezcla siempre es pobre, lo cual es lógico, pues es la zona donde el aire se introduce a la cámara por los orificios. Por otra parte, se observa que en aquellas zonas donde el dosado relativo es cercano a la unidad (estequiométrico), las temperaturas (Figura 3c) resultan elevadas debido a la oxidación completa del combustible.

Si se observan los resultados de dosado para ralentí (Figura 3d), es evidente que el modelo muestra diferencias respecto al de despegue. En la zona primaria el dosado no es rico y, en el frente de llama no es cercano al estequiométrico. Esto repercute

directamente en las temperaturas y, en consecuencia, en la formación de especies contaminantes.

Por otra parte, también se muestran los tiempos de residencia en cada zona (Figuras 3b despegue y 3e ralentí). En ellas se observa que en el caso de ralentí, el tiempo de residencia es mayor como consecuencia de que, a menor potencia en el motor, menor gasto másico. Además, el tiempo de residencia máximo se da en las zonas de pared, debido al poco gasto másico que trasiegan estos reactores en proporción al volumen de los mismos.

Para observar la influencia de estas tendencias en los resultados de contaminantes se muestra en la Figura 4 los valores de las fracciones másicas para cada una de las M especies para las cuales se han obtenido los índices de emisiones en la calibración (con  $Y = \dot{m}_M / \dot{m}_{total}$ ) y se comparan con las fracciones másicas extraídas de las medidas experimentales [9]. De igual forma que en la figura anterior, la formación de especies sigue los caminos CORE y WALL para los puntos de operación de máxima (despegue) y mínima (ralentí) potencia.

En primer lugar, se observa que, tanto los hidrocarburos sin quemar como el monóxido de carbono (Figuras 4a, 4b, 4d y 4e) se reducen a medida que se avanza en la cámara. En el camino CORE, ambas especies aparecen en los dos primeros reactores, a partir de los cuales las reacciones de oxidación se congelan debido a bajas temperaturas y cortos tiempos de residencia. El valor final depende del punto de funcionamiento. En cambio en el camino WALL los valores de ambas especies caen drásticamente debido al alto tiempo de residencia en WZ, que junto a un dosado pobre permiten llegar a una situación de equilibrio químico de baja temperatura. Ello impide la formación de nuevas especies en WZ2.

En las Figuras 4c y 4f se tienen los NOx. En ellas se observa que, las zonas que gobiernan la formación son la zona primaria y el frente de llama, aquellas donde el

dosado es cercano al estequiométrico y, por tanto, las temperaturas son muy elevadas. Esto es debido a que la formación de esta especie depende, principalmente, del mecanismo térmico, es decir, cuanto mayor sea la temperatura y más tiempo estén expuestas las moléculas de nitrógeno a esa temperatura, mayor será la formación de NOx. Por otro lado, se observa una reducción de NOx en el camino del CORE al pasar del FF en adelante. Esto es debido a que se añade aire para diluir la mezcla y la fracción másica de la especie se reduce. Los reactores del camino WALL no contribuyen en absoluto a la formación de NOx debido a los bajos dosados y, en consecuencia, temperaturas.

Comprando los dos puntos de operación, se observa que para el punto de ralentí aumentan los hidrocarburos sin quemar y el monóxido de carbono a la salida de la cámara. Tal como ya se ha comentado, los hidrocarburos sin quemar en configuración de despegue (Figuras 4a y 4b) se forman en el primer reactor debido al dosado rico. No obstante, después del frente de llama (zonas FF) caen drásticamente debido a unas temperaturas elevadas asociadas al dosado estequiométrico que causan una oxidación casi completa. El valor experimental para este punto [9] es aparentemente muy diferente, si bien está en la parte baja del rango reportado para este motor. Teniendo en cuenta que los hidrocarburos sin quemar son prácticamente cero en puntos de plena carga en este tipo de motores, es probable la discrepancia entre medidas sea principalmente de tipo numérico, indicando en ambos casos nulas emisiones. En ralentí, en cambio, se forman menos hidrocarburos al inicio por una combustión pobre en toda la cámara. Sin embargo, la misma naturaleza de esta combustión genera unas temperaturas mucho menores, lo cual realentiza las reacciones e impide que se quemen los hidrocarburos. Por tanto, los hidrocarburos sin quemar resultantes a la salida son mayores que en máxima potencia.

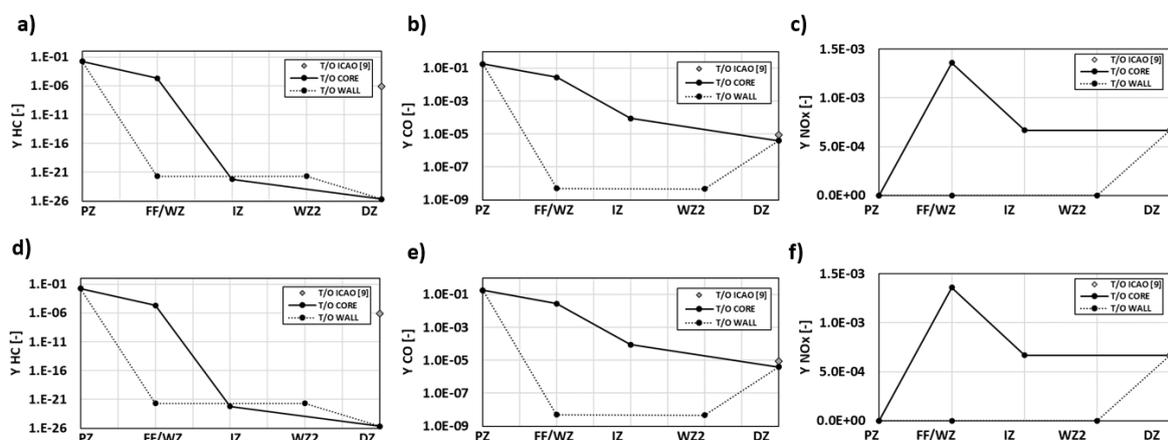


Figura 4. Análisis de especies detallado de cada zona en la cámara de combustión. Con: T/O = despegue, IDLE = ralentí. Los símbolos vacíos a la salida del reactor indican los valores experimentales. Fuente: elaboración propia.

El monóxido de carbono (Figuras 4b y 4e) presenta un comportamiento análogo a los hidrocarburos sin quemar, donde se aprecian formaciones mayores en los primeros reactores para despegue frente al ralentí, pero las mayores temperaturas en la cámara permite oxidaciones más rápidas durante el avance de la mezcla en la cámara. Esta disminución es mayor en despegue debido a las altas temperaturas.

El comportamiento del modelo es similar al de los experimentos, con una predicción mejor en el caso del monóxido de carbono que en los hidrocarburos sin quemar. Las discrepancias para estas últimas especies en el punto de operación de ralentí pueden ser debidas a las simplificaciones realizadas en cuanto al mecanismo químico y al combustible de sustitución. Dichas simplificaciones de la realidad cobran un papel más relevante en situaciones en las que la reacción de combustión no es tan rápida.

Para el caso de los NO<sub>x</sub>, los resultados del punto de despegue (Figura 4c) muestran que en PZ no se crean estas especies debido a un dosado rico muy superior al estequiométrico. Es en el frente de llama, con dosado muy cercano a la unidad es donde se generan todos los NO<sub>x</sub>. Por otra parte, en el punto de ralentí (Figura 4f), se observa como en la PZ sí se forman estas especies, pues el dosado ahora es pobre pero mucho más cercano a la unidad (Figura 3d). En este caso, se forman en menor medida que para máxima potencia, pero no se reducen lo suficiente por las bajas temperaturas de la cámara y la predicción a la salida se sobreestima ligeramente si se compara con [9].

#### 4. Conclusiones

Se ha desarrollado un modelo de redes de reactores basado en cinética química, el cual emplea mecanismos químicos detallados para predecir las emisiones de especies como HC, CO y NO<sub>x</sub>. El modelo separa la cámara en diferentes zonas que pretenden emular aquellas que aparecen en cámaras de combustión convencionales de motores de aviación. Tales zonas son la primaria, con dosados ricos, el frente de llama, con dosado estequiométrico, las zonas intermedias y de dilución, con dosados pobres y las zonas de pared por donde se introduce el aire secundario hacia la cámara, con dosados muy pobres. Además, las zonas de pared, intermedia y dilución se modelan en 1D para tener en cuenta el avance y formación de especies aguas abajo del frente de llama.

Se han obtenido las temperaturas, dosados y tiempos de residencia, así como los índices de emisiones: EIHC, EICO y EINO<sub>x</sub> para la cámara de combustión del motor CFM56 7B27/B1F. Las predicciones de temperatura han sido buenas y los valores de tiempos de residencia lógicos comparados con motores análogos como el CIAM – M. Las predicciones de los índices de emisiones de monóxido de carbono y óxidos nítricos han sido buenas para todo el rango de potencias salvo para el punto de operación de mínima potencia.

En cambio, las predicciones para los hidrocarburos sin quemar han sido subestimadas en el punto de ralentí. Esto parece explicarse debido a que la mezcla combustible aire no es la adecuada en las zonas primaria y frente de llama y que eso afecta directamente a las temperaturas locales de las zonas y, en consecuencia, varía la formación de especies, sobreestimando los CO y NO<sub>x</sub> y subestimando los HC. En resumen, el modelo desarrollado puede emplearse para predecir emisiones en casi todo el rango de operación del motor CFM56 7B27/B1F con buenos resultados y un coste computacional reducido.

#### 5. Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el programa Horizon 2020 Research and Innovation de la Unión Europea por medio del proyecto SENECA (LTO Noise and Emissions of Supersonic Aircraft) contrato No. 101006742, y también por el proyecto AHEAD (PID2020-118387RB-C31) de la Agencia Estatal de Investigación del gobierno de España.

#### 6. Referencias

- [1] Marco Mehl, William J.Pitz, Charles K.Westbrook, Henry J.Curran. “Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions”. Proceedings of the Combustion Institute 33, 2011. [PDF]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.05.027>
- [2] J. Luche. “Obtention de modèles cinétiques réduits de combustion. Application à un mécanisme du kérosène”. Université d’Orleans, 2003 [PDF]. Disponible en: [chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcgiclfndmkaj/https://www.cerfacs.fr/cantera/docs/mechanisms/kerosene-air/Luche/These\\_LUCHE.pdf](chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcgiclfndmkaj/https://www.cerfacs.fr/cantera/docs/mechanisms/kerosene-air/Luche/These_LUCHE.pdf)
- [3] P. Dagaut, M. Cathonet. “The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modelling”. Progress in Energy and Combustion Science 32 48–92, 2006 [PDF]. Disponible en: [chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcgiclfndmkaj/https://www.cerfacs.fr/cantera/docs/mechanisms/kerosene-air/Dagaut/HighP/dagaut\\_cathonnet\\_PECS\\_2006.pdf](chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcgiclfndmkaj/https://www.cerfacs.fr/cantera/docs/mechanisms/kerosene-air/Dagaut/HighP/dagaut_cathonnet_PECS_2006.pdf)
- [4] Douglas L. Allaire. “A Physics-Based Model for Aircraft Gas Turbine Combustors”. Massachusetts institute of technology MIT, 2006 [PDF]. Disponible en: <https://dspace.mit.edu/handle/1721.1/35584>
- [5] N. Ramachandran. “Prediction of Emissions for Lean-Premixed Gas Turbine Combustors”. Carleton Universiti (Canada), 2009 [PDF]. Disponible en: <https://curve.carleton.ca/system/files/etd/62167f28-d446-400d-928c->

8fe203fdcb29/etd\_pdf/cd5fe3e8329dbd63c0448a117c  
a3a392/ramachandran-  
predictionofemissionsforleanpremixedgasturbine.pdf

[6] B. Rosati. “Prediction of emissions from combustion systems using 0D and 1D reaction flow models. Chemical reactor network modelling”. Delft University of Technology DelftTU, 2010 [PDF]. Disponible en: <https://repository.tudelft.nl/islandora/object/uuid:e4123ab3-0d3d-48cc-8b71-ada6badc83e7/datastream/OBJ/download>

[7] C. Celis. “Evaluation of environmentally friendly aircraft propulsion systems”. Cranfield University CU, 2010 [PDF]. Disponible en: <chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/https://files.core.ac.uk/pdf/23/139781.pdf>

[8] H. Pervier. “Emissions modelling for engine cycle and aircraft trajectory optimisation”. Cranfield University CU, 2013 [PDF]. Disponible en: [chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/https://dspace.lib.cranfield.ac.uk/bitstream/handle/1826/10396/Pervier\\_H\\_2013.pdf;jsessionid=156CDAAC2EF9722795255D280FC1AEBA?sequence=1](chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/https://dspace.lib.cranfield.ac.uk/bitstream/handle/1826/10396/Pervier_H_2013.pdf;jsessionid=156CDAAC2EF9722795255D280FC1AEBA?sequence=1)

[9] European Union Aviation Safety Agency, EASA. “Aircraft Engine Emissions Databank, International Civil Aviation Organization ICAO”. 2021 [En línea]. Disponible en: <https://www.easa.europa.eu/domains/environment/icao-aircraft-engine-emissions-databank>

[10] A.B. Lebedev, A.N. Secundov, A.M. Starik, N.S. Titova, A.M. Schepin. “Modelling study of gas-turbine combustor emission”. Proceedings of the Combustion Institute 32 2941–2947, 2009 [PDF]. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748908000746>

[11] A. M. Starik, A. B. Lebedev, A. M. Savel'ev, N. S. Titova and P. Leyland. “Impact of operating regime on aviation engine emissions: modelling study”. Journal of Propulsion and Power, Vol. 29, No. 3, 2013 [PDF]. Disponible en: <https://arc.aiaa.org/doi/10.2514/1.B34718>

[12] David G. Goodwin, Harry K. Moffat, Ingmar Schoegl, Raymond L. Speth, and Bryan W. Weber. “Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes”. 2022 [En línea]. Disponible en: <https://cantera.org/>

[13] Z. Saboohi, F. Ommi, A. Fakhrtabataebai. “Development of an augmented conceptual design tool for aircraft gas turbine combustors”. Int. Jnl. of Multiphysics Volume 10, Number 1. 2016 [PDF].

Disponible en: [https://www.researchgate.net/publication/306209124\\_Development\\_of\\_an\\_Augmented\\_Conceptual\\_Design\\_Tool\\_for\\_Aircraft\\_Gas\\_Turbine\\_Combustors](https://www.researchgate.net/publication/306209124_Development_of_an_Augmented_Conceptual_Design_Tool_for_Aircraft_Gas_Turbine_Combustors)

[14] R. J. Kee, M. E. Coltrin, P. Glarborg, and H. Zhu. “Chemically Reacting Flow: Theory and Practice”. 2nd Ed. John Wiley and Sons, 2017 [LIBRO]. Disponible en: <https://www.wiley.com/en-us/Chemically+Reacting+Flow%3A+Theory%2C+Modeling%2C+and+Simulation%2C+2nd+Edition-p-9781119184874>

[15] F. Lindemann. Trans. Faraday Soc. “Discussion on the radiation theory of chemical action”. Transactions of the Faraday Society. Vol 17:598, 1922 [LIBRO]. Disponible en: <https://doi.org/10.1039/TF9221700598>

[16] R. G. Gilbert, K. Luther, and J. Troe. Ber. Bunsenges. “Theory of Thermal Unimolecular Reactions in the Fall-off Range. II. Weak Collision Rate Constants”. Phys. Chem. Vol 87:169, 1983 [LIBRO]. Disponible en: <https://doi.org/10.1002/bbpc.19830870218>

[17] W. Tsang and J. Herron. “Chemical Kinetic Data Base for Propellant Combustion I. Reactions Involving NO, NO<sub>2</sub>, HNO, HNO<sub>2</sub>, HCN and N<sub>2</sub>O”. Journal of Physical and Chemical Reference Data. Vol 20:4, 1991 [PDF]. Disponible en: <https://doi.org/10.1063/1.555890>

[18] P. H. Stewart, C. W. Larson, and D. Golden. “Pressure and temperature dependence of reactions proceeding via a bound complex. 2. Application to 2CH<sub>3</sub> → C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> + H”. Combustion and Flame. Vol 75:25, 1989 [PDF]. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(89\)90084-9](https://doi.org/10.1016/0010-2180(89)90084-9)

[19] Blowers, P., & Masel, R. “Engineering approximations for activation energies in hydrogen transfer reactions”. AIChE Journal, 46(10), 2041-2052, 2000 [PDF]. Disponible en: <https://doi.org/10.1002/aic.690461015>

[20] C. K. Westbrook and F. L. Dryer. “Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames”. Combustion Science and Technology 27, pp. 31--43. 1981 [PDF]. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/00102208108946970>

[21] I. A. Kossyi, A. Y. Kostinsky, A. A. Matveyev, and V. P. “Kinetic scheme of the non-equilibrium discharge in nitrogen-oxygen mixtures. mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames”. Plasma Sources Science and Technology 1, no. 3, pp. 207. 1992 [PDF]. Disponible en: <https://doi.org/10.1088/0963-0252/1/3/011>