



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería del Diseño

MODELADO DE CÁMARAS DE COMBUSTIÓN DE TURBINAS DE GAS MEDIANTE REDES DE REACTORES

TRABAJO FINAL DEL

Máster en Ingeniería Aeronáutica

REALIZADO POR

Elena Rodríguez Celaya

TUTORIZADO POR

José María García Oliver

CURSO ACADÉMICO: 2020/2021

RESUMEN

La predicción de la combustión en las cámaras de las turbinas de gas es un aspecto de gran importancia para el diseño de estos sistemas. Habitualmente dicho proceso se lleva a cabo mediante cálculos de dinámica de fluidos computacional, con un gran coste debido al elevado detalle espacial. Una alternativa que permite equilibrar los costes de cálculo con la capacidad predictiva del modelo es el uso de redes de reactores químicos, en los cuales la cámara de combustión se divide en un pequeño número de zonas, cada una de las cuales es tratada como un reactor químico, en el que el detalle de las reacciones permite obtener predicciones de la combustión y la formación de emisiones contaminantes.

El presente trabajo pretende aplicar el software libre *Cantera* para la construcción de este tipo de configuraciones que permita analizar las prestaciones de un motor turbina de gas en condiciones de operación realistas. La alumna construirá la red de reactores basándose en estudios de la literatura, y realizará simulaciones para evaluar la capacidad predictiva del modelo.

ABSTRACT

The prediction of combustion in gas turbine chambers is a very important aspect of gas turbine design. This process is usually carried out by computational fluid dynamics calculations, which are very costly due to the high spatial detail. An alternative to balance the computational costs with the predictive capability of the model is using chemical reactor networks, in which the combustion chamber is divided into a small number of zones, each of them is treated as a chemical reactor, where the detail of the reactions allows predictions of combustion and pollutant emission formation to be obtained.

The present work aims to apply the free software *Cantera* for the design of such configurations to analyse the performance of a gas turbine engine under realistic operating conditions. The student will build the reactor network based on literature studies, and perform simulations to evaluate the predictive capability of the model.

ÍNDICE

INDICE DE FIGURAS.....	I
INDICE DE TABLAS.....	III
1. INTRODUCCIÓN.....	1
2. OBJETIVOS.....	2
3. MARCO TEÓRICO	3
3.1. EMISIONES	3
3.1.1. Dióxido de carbono (CO ₂)	3
3.1.2. Monóxido de carbono (CO).....	4
3.1.3. Óxidos de nitrógeno (NO, NO ₂ , N ₂ O)	6
3.2. REDES DE REACTORES EN CANTERA	8
4. MODELO DE EMISIONES PARA CÁMARA DE COMBUSTIÓN	14
4.1. “MODELING STUDY OF GAS-TURBINE COMBUSTOR EMISSION”.....	14
4.2. PARÁMETROS	16
4.3. ARQUITECTURA DE LA RED	17
5. RESULTADOS	24
5.1. TEMPERATURAS.....	24
5.2. EMISIONES DE CO ₂	25
5.3. EMISIONES DE CO	27
5.4. EMISIONES DE NO _x	30
5.5. CONSIDERACIONES GLOBALES.....	34
6. CONCLUSIONES	36
7. PRESUPUESTO.....	37
7.1. METODOLOGÍA PRESUPUESTARIA	37
7.2. LICENCIAS DE SOFTWARE Y HARDWARE.....	37
7.3. COSTE DE PERSONAL.....	38
7.4. COSTE TOTAL Y PRECIO DE MERCADO.....	40
REFERENCIAS	41

INDICE DE FIGURAS

Figura 1. Distribución de las emisiones de CO ₂ por sectores, [6]	4
Figura 2. Influencia de la presión y la riqueza en el EICO, [4]	5
Figura 3. Evolución del EINO _x con el aumento en el tiempo de residencia.....	7
Figura 4. Software Cantera, [2]	9
Figura 5. Forma de implementar en Cantera con Python las conexiones entre reactores	11
Figura 6. Código para la inicialización de la integración temporal	12
Figura 7. Cámara CIAM-M con las zonas de Z uniforme, [1].....	14
Figura 8. Esquema de la red de reactores de la CIAM-M, [1].....	15
Figura 9. Esquema de los flujos de masa en la red de reactores para la CIAM-M.....	18
Figura 10. Ejemplo del cálculo de volúmenes (reactor 5, T _{air} = 660 K)	19
Figura 11. Ejemplo para establecer los flujos entrantes a un reactor con Python.....	21
Figura 12. Evolución temporal de los tiempos de residencia	21
Figura 13. Flujo másico respecto del tiempo de simulación, ejemplo para los reactores 2 y 3 en la simulación con T _{air} =660K.....	22
Figura 14. Masa respecto del tiempo de simulación, ejemplo para los reactores 2 y 3 en la simulación con T _{air} =660 K	22
Figura 15. Temperaturas finales de la mezcla aire/combustible para inicializar el reactor 1	23
Figura 16. Resultados obtenidos para la temperatura en cada reactor para el estudio con.....	25
Figura 17. Comparativa del EICO ₂ para los estudios con ambas temperaturas del aire de entrada	27
Figura 20. Influencia de la presión y de los dosados relativos en el EICO con Cantera	29
Figura 22. Índice de emisiones del CO [g/kg fuel] en cada reactor.....	30
Figura 23. Comparación de EINO _x para diferentes mecanismos de reacción, [1].....	32
Figura 24. Concentración másica de NO en ppm para cada reactor.	33

Figura 25. Índice de emisiones del NO_x [g/kg fuel] en cada reactor..... 34

INDICE DE TABLAS

Tabla 1. Principales contaminantes emitidos por las turbinas de gas, [4]	3
Tabla 2. Condiciones de operación	16
Tabla 3. Tiempos de residencia y fracción de mezcla en cada reactor	17
Tabla 4. Volúmenes y tiempos de residencia de cada reactor	19
Tabla 5. Distribución de cantidad de flujo másico entrante en cada reactor.....	20
Tabla 6. Temperaturas para cada uno de los estudios	23
Tabla 7. Comparativa de las temperaturas para la simulación $T_{\text{air}} = 600 \text{ K}$	24
Tabla 8. Comparación de EICO para el estudio a 600 y a 660 K.....	27
Tabla 9. Dosados relativos de cada reactor.....	28
Tabla 10. Comparación de E_{INO_x} para el estudio a 600 y a 660 K.....	30
Tabla 11. Comparación de $[\text{NO}_2]/[\text{NO}_x]$ para el estudio a 600 y a 660 K.....	31
Tabla 12. Coste de las licencias de software.....	38
Tabla 13. Coste del hardware.....	38
Tabla 14. Salario bruto de un ingeniero titulado.....	39
Tabla 15. Desglose de las actividades, tiempo y coste realizadas por la alumna.	39
Tabla 16. Costes finales de personal para el proyecto.	39
Tabla 17. Estimación de los costes totales del proyecto.....	40

1. INTRODUCCIÓN

Actualmente, se está experimentando un gran interés por reducir las emisiones de contaminantes en todos los sectores con el fin de reducir el impacto medioambiental. El caso que nos concierne corresponde con el sector aeronáutico por lo que el presente trabajo se centrará en el cálculo de las emisiones producidas en una cámara de combustión de un aeroreactor. Este interés ha provocado la necesidad de buscar una manera de calcular dichos contaminantes de una forma más rápida y sencilla de lo que se venía haciendo hasta ahora.

Generalmente el estudio de la combustión se realiza empleando una metodología CFD la cual se basa en una química simplificada debido a que la consideración de la gran cantidad de compuestos presentes en un proceso de combustión haría que los tiempos de cálculo fuesen extremadamente elevados. Por lo que este método se ha centrado más en la predicción de temperaturas, velocidades y condiciones de la reacción que en la predicción de las emisiones de los contaminantes.

Es por ello que, a lo largo del presente trabajo, se trata un método de predicción alternativo basado en una red de reactores químicos que a diferencia del CFD no requiere una discretización muy fina del espacio, lo que reduce considerablemente el coste computacional. Dichos reactores presentan una estructura muy sencilla (0D o 1D) y están directamente relacionados con el flujo y las propiedades químicas del mismo, es una discretización menos precisa, pero permite considerar al completo y de forma detallada los modelos químicos, los cuales pueden conformarse por cientos de reacciones dependiendo del tipo de combustible empleado.

Por tanto, ambos métodos se complementan ya que la utilización de una red de reactores calibrada inicialmente con un estudio CFD ofrece la posibilidad de predecir las emisiones de forma rápida y bastante precisa.

2. OBJETIVOS

El objetivo de este Trabajo Fin de Máster es desarrollar una red de reactores químicos capaz de calcular de forma fiable y rápida la emisión de contaminantes de una cámara de combustión.

Como base para determinar la validez del método se comparará con los resultados obtenidos en el estudio realizado por el “*Central Institute of Aviation Motors (CIAM)*” [1].

Dicho informe proporciona algunos datos necesarios, pero no los suficientes para desarrollar la red, por lo que será imprescindible realizar un proceso calibración y conseguir llevar a cabo un estudio similar para poder alcanzar unos resultados suficientemente próximos que permitan determinar que la red desarrollada funciona correctamente. De esta forma será posible emplearla en otro estudio con diferentes características, ya sea utilizando otro combustible o cambiando las propiedades de los reactores.

Para generar y simular dicha red se utilizará un software libre llamado *Cantera* [2], es un conjunto de herramientas de código abierto para problemas relacionados con la cinética química, la termodinámica y los procesos de transporte, cuyo código está basado en C++ y tiene interfaces para C++, Matlab y Python, en este caso la interfaz empleada es Python. Además de la red, hay que tener en cuenta qué mecanismos de reacción son empleados para simular la combustión, en este caso se emplea el mecanismo GRI-Mech 3.0, [3].

3. MARCO TEÓRICO

Con el fin de entender el objetivo y el funcionamiento del modelado mediante redes de reactores para calcular las emisiones de una cámara de combustión, es necesario saber cuáles son los procesos de formación de dichos compuestos, así como la influencia que tienen aquellos más abundantes en el medioambiente.

En este apartado también se explicará en mayor profundidad el informe realizado por el CIAM además del funcionamiento y las bases del software empleado.

3.1. EMISIONES

Como se ha comentado anteriormente, es de gran importancia tomar conciencia sobre la cantidad de contaminantes que se emiten a la atmósfera, especialmente en la industria de la aviación. Los principales agentes contaminantes que surgen de la combustión en los aeroreactores pueden separarse en dos grupos, por un lado se encuentran los compuestos carbonados entre los que se encuentran el CO, CO₂ y los hidrocarburos inquemados, mientras que por el otro lado se tienen a los compuestos nitrogenados entre los que predominan el NO y NO₂. Se agrupan en la siguiente tabla.

Tabla 1. Principales contaminantes emitidos por las turbinas de gas, [4]

Contaminante	Efecto
Monóxido de carbono (CO)	Tóxico
Hidrocarburos inquemados (UHC)	Tóxico
Partículas (C)	Visible
Óxidos de nitrógeno (NO _x)	Tóxico, destrucción de la capa de ozono
Óxidos de azufre (SO _x)	Tóxico, corrosivo

3.1.1. Dióxido de carbono (CO₂)

El dióxido de carbono es conocido por todos como el principal causante del calentamiento global. Pese a ello no siempre es considerado como contaminante ya que es un producto natural de la combustión, la reacción entre los combustibles fósiles y el oxígeno, fundamental en los motores térmicos. Puesto que dicha reacción es la principal manera de producir este gas, el sector del transporte es el responsable de un 30% de las emisiones.

Dentro de dicho sector, la aviación, según CLEAN SKY [5], produce un 2% de las emisiones totales a nivel mundial, no parece un porcentaje significativo, pero el hecho

de ser emitidas a altitudes elevadas junto con la generación de otros gases aumenta considerablemente su efecto en la atmósfera.

La mejor forma para disminuir el impacto este contaminante radica en reducir al máximo el consumo de combustible y tratar de conseguir reacciones completas para evitar la producción del resto de productos contaminantes que se tratarán a continuación, como son el monóxido de carbono o los óxidos de nitrógeno.

La reducción del consumo es uno de los factores más importantes en esta industria ya que puede llegar a ser hasta un 30% de los costes de una compañía, por lo que los fabricantes no cesan en buscar alternativas y tratar de aumentar la eficiencia de los motores de forma que cada vez consuman menos. Este interés económico, ha repercutido en gran medida a lo largo de los últimos años también en la contaminación, ya que dicha reducción de consumo equivale a una gran disminución de emisiones en los últimos años. Aun así, el constante aumento del sector hace que la tendencia de las emisiones de CO₂ siga en aumento.

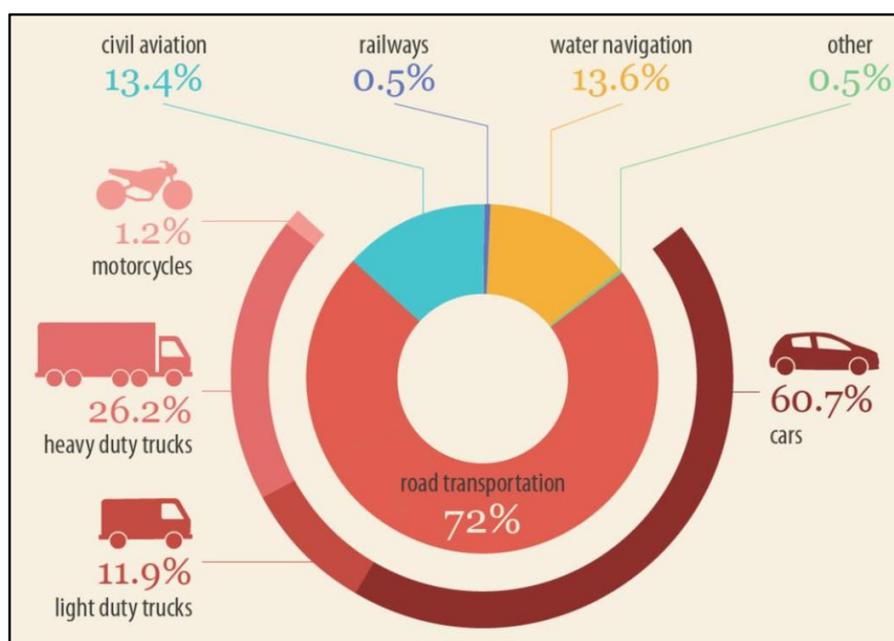


Figura 1. Distribución de las emisiones de CO₂ por sectores, [6]

3.1.2. Monóxido de carbono (CO)

Durante años han sido estudiados los efectos nocivos del monóxido de carbono para la salud. Es sabido que es un compuesto tóxico para el ser humano que en ocasiones puede llegar a provocar la muerte, pero se desconocen sus efectos a más largo plazo. En los últimos años se han realizado estudios que relacionan directamente una exposición a concentraciones de CO con efectos perjudiciales en los órganos que

presentan mayor consumo de oxígeno, como cerebro y corazón.

Pero además de los efectos que tiene en la salud también es uno de los contaminantes con mayor presencia en la atmósfera terrestre y cuya fuente principal son los motores que utilizan combustibles fósiles. Por ello, es uno de los productos de la combustión sobre el que hay que prestar especial atención para así, tratar de reducir su formación.

El monóxido de carbono es un compuesto que se obtiene por una combustión incompleta con exceso de combustible de forma que no hay oxígeno suficiente para terminar la reacción y producir CO_2 , así como en reacciones pobres debido a la disociación del CO_2 .

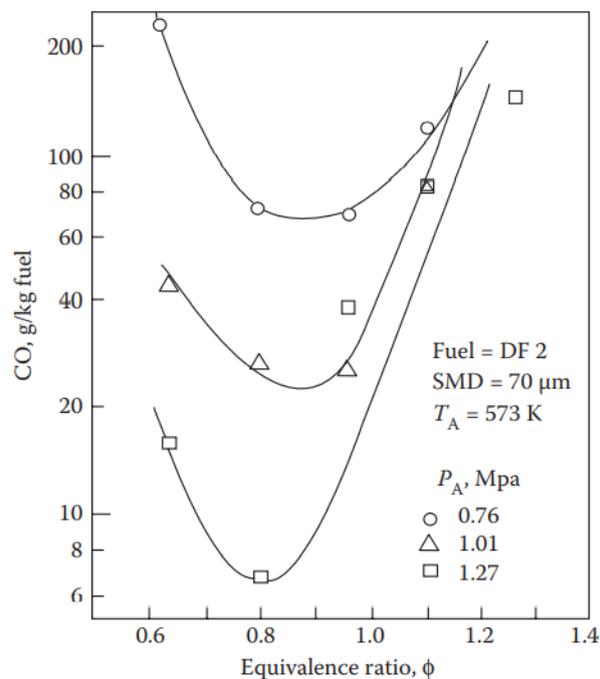


Figura 2. Influencia de la presión y la riqueza en el EICO, [4]

Observando la Figura 2, se puede contemplar la clara influencia de la riqueza de la mezcla en la formación del óxido de carbono, el cual se reduce con la disminución del dosado relativo (ϕ) hasta un valor mínimo de 0.8 y a partir de ahí, comienzan a subir de nuevo.

La falta de combustible hace que las reacciones de oxidación sean lentas y las temperaturas bajas lo que hace que la formación de CO aumente. Sin embargo, por otro lado, a altas temperaturas también comienza a ser significativa la formación de CO por disociación de CO_2

Por tanto, las concentraciones de CO y de hidrocarburos inquemados (UHC) disminuyen a medida que aumenta la potencia hasta el punto de alcanzar temperaturas

suficientemente elevadas.

Además de la riqueza de la mezcla y la temperatura de la cámara, otros factores que tienen gran influencia en la formación del CO pueden ser la presión de la cámara de combustión, la temperatura a la entrada y la pulverización del combustible. En cuanto a la presión, en la misma Figura 2, se observa que un aumento en la presión a la que se lleva a cabo el proceso de combustión se corresponde con una importante reducción en las emisiones del CO, aunque siguiendo la misma tendencia en cuanto a las riquezas para los diferentes valores de la misma.

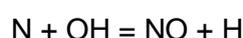
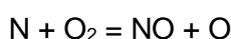
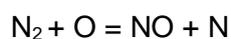
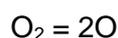
3.1.3. Óxidos de nitrógeno (NO, NO₂, N₂O)

Además de los compuestos orgánicos, en la combustión también se crean óxidos de nitrógeno debido al nitrógeno presente en el aire. Estos compuestos son algunos de los conocidos gases de efecto invernadero (GEI) junto con el CO₂ comentado anteriormente, que contribuyen en gran parte a la destrucción de la capa de ozono y el calentamiento global, así como en contacto con otras sustancias, la formación de HNO₃, causante de la lluvia ácida.

En la reacción de aire y combustible se forman principalmente NO, NO₂ y N₂O, aunque en el conjunto de los llamados NO_x solo se consideran el óxido y el dióxido de nitrógeno, aunque este último se suele formar posteriormente por la oxidación del NO a más bajas temperaturas.

Existen diferentes mecanismos de formación de NO_x, y cada uno puede contribuir más o menos dependiendo del mecanismo de reacción empleado y de las condiciones de cada reactor. Dichos mecanismos son [7]:

- Zel'dovich extendido: También llamados óxidos de nitrógeno térmico, se producen por la oxidación del nitrógeno presentes en la atmosfera en regiones con altas temperaturas de llama. Es un proceso endotérmico por lo que comienza a ser significativo a temperaturas superiores a los 1850 K, [4]. La mayoría de los procesos de formación de los NO térmicos se debe a que utilizan los mecanismos de Zel'dovich extendido, es decir:



La formación del NO surge de la competencia del nitrógeno y del combustible

por el oxígeno presente por lo que las mezclas relativamente pobres tienen mayores índices de formación de NO, ya que a pesar de que las temperaturas entorno a las zonas con mayor riqueza son mayores la gran presencia del hidrocarburo consume todo el oxígeno impidiendo la formación del óxido de nitrógeno.

A parte del dosado de la mezcla es de gran importancia la temperatura en el aire de entrada, con el aumento de la misma se obtiene un incremento en el índice de emisión del óxido de nitrógeno. También hay que tener en cuenta el tiempo de residencia ya que si este se incrementa lo hacen de igual forma las emisiones de NO_x excepto si se tienen en cuenta mezclas demasiado pobres ya que la velocidad de reacción sería tan pequeña que no se apreciaría apenas su influencia con el tiempo. Comprobando un caso de estudio en el que interviene un solo reactor, Figura 3, se observa que la tendencia del índice de emisión de los NO_x con el aumento del tiempo de residencia conlleva, al igual que en la teoría, a un aumento en dichas emisiones.

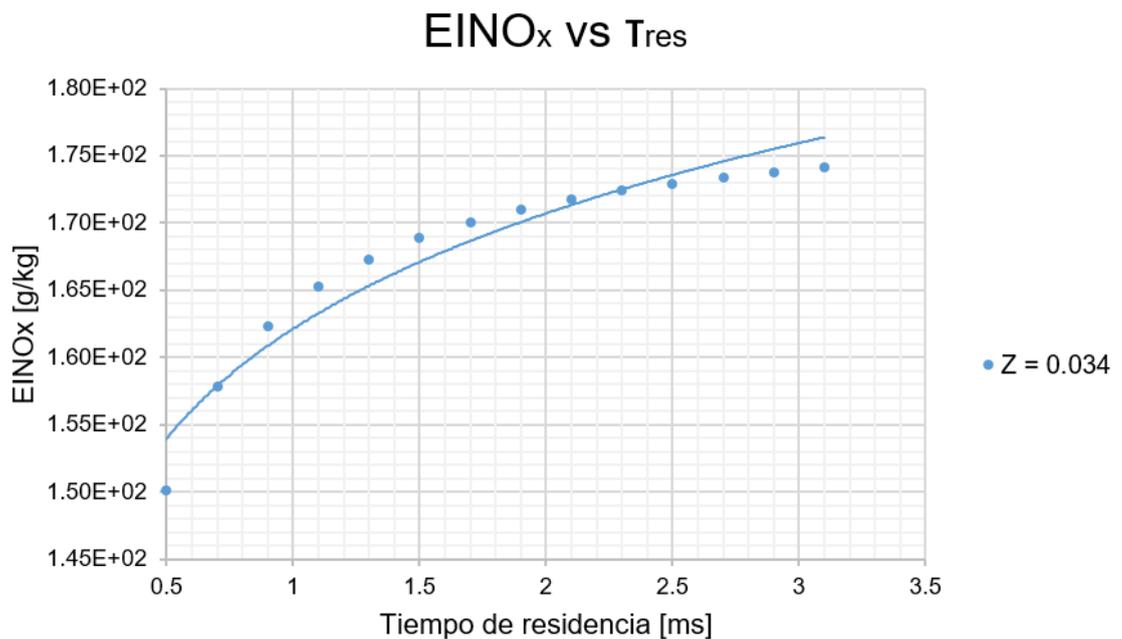


Figura 3. Evolución del EINO_x con el aumento en el tiempo de residencia

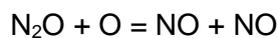
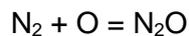
En base a todas estas consideraciones se pueden resumir las claves de la formación de los NO térmicos en que

1. La formación está muy determinada por la temperatura de llama, por debajo de los 1850K las cantidades de NO son muy pequeñas.

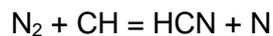
2. El índice de nitrógeno en los modelos de funcionamiento propios de las turbinas de gas aumenta linealmente con el tiempo de residencia.

3. Y, por último, para ϕ relativamente pequeños, la formación de dichos compuestos es independiente del tiempo.

- Mecanismo de formación desde el N_2O : Este tipo de mecanismo se inicializa con la reacción de formación del óxido nitroso, el cual se oxida y termina por convertirse en moléculas de NO. Las reacciones de estos mecanismos son las siguientes, respectivamente.

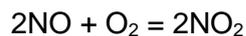


- Mecanismo “prompt NO”: este mecanismo consiste en que bajo ciertas condiciones se puede encontrar NO en el frente de llama y la reacción de que inicia este proceso es,



Los productos de dicha reacción se oxidan dando lugar a NO. El HCN se oxida pasando por una serie de reacciones y de compuestos diferentes hasta alcanzar finalmente, el NO. Por su parte el nitrógeno evoluciona por la segunda reacción del mecanismo de Zel'dovich.

- Mecanismo NO_2 : la reacción de formación de dicho mecanismo es



En este caso, el descenso de la temperatura favorecería la reacción por lo que la influencia de este mecanismo de formación se verá incrementada en las zonas frías, [8].

Teniendo en cuenta estos mecanismos de formación de NO_x se tratará de determinar cuál es más significativo en cada uno de los reactores en base a las propiedades de los mismos y la cantidad de NO_x que se produzcan.

3.2. REDES DE REACTORES EN CANTERA

Cantera, como se comenta al inicio de esta tesis, es un software libre de código abierto que sirve para resolver problemas de cinética química, termodinámica o procesos de transporte [2].



Figura 4. Software Cantera, [2]

El software utiliza conceptos orientados a objetos y los algoritmos están diseñados de forma que con simples cambios en el código principal se puedan obtener diferentes modelos de fase, también puede ser utilizado desde diferentes interfaces, en este caso se ha empleado Python.

El principal elemento para diseñar estas redes son los reactores que representan las reacciones químicas que se producen en un sistema de la forma más sencilla. Están gobernados por las ecuaciones de conservación de masa, energía y compuestos, así como por el volumen. Para poder simular los procesos químicos que surgen dentro de la cámara de combustión, es decir, en cada reactor, es necesario tener definidas las diferentes fases por las que pasa la materia que se emplea. Para ello, se implementan unos modelos desarrollados previamente que poseen las propiedades termodinámicas, de transporte y las tasas de reacción, así como todos los elementos y compuestos que aparecen durante todo el proceso.

Todas estas características aparecen en archivos con extensión “.cti” o “.yaml” (en el caso de *Cantera*) que presentan una sintaxis específica lo que permite que dicho software lo interprete de la manera correcta para realizar la simulación. Estos conjuntos de datos son llamados mecanismos y el propio software *Cantera* posee algunos mecanismos ya implementados dentro de sus librerías.

En este caso, el mecanismo utilizado es el GRI-Mech 3.0, [3] como se ha comentado en el apartado anterior, ya que es el único sobre el cual se tiene información y es posible comparar los resultados para afirmar la validez de la red.

El mecanismo GRI-Mech 3.0 es uno de los mecanismos químicos más recientes y ha sido desarrollado por el GRI (*Gas Research Institute*) para modelar la combustión del gas natural incluyendo todos los mecanismos de formación de NO_x. Es una recopilación de 325 reacciones químicas elementales y los parámetros termodinámicos asociados para los 53 compuestos que intervienen en ellas. La mejora de este mecanismo frente a los anteriores es que ha sido optimizado para la combustión de metano y gas natural, pero, es recomendable no emplear este mecanismo para combustibles puros como el metanol, propano, etileno y acetileno.

El GRI-Mech 3.0 puede considerarse uno de los mejores mecanismos a emplear cuando se trata de un estudio con metano como combustible para obtener las emisiones de NO_x.

Una vez considerado el mecanismo a utilizar hay que indicar la composición inicial y las condiciones de presión y temperatura del gas. Tras definir todas sus propiedades, se lleva al equilibrio y con ello, se inicializan cada uno de los reactores presentes en la red. Estos reactores pueden conectarse con otros para formar la llamada red de reactores, dichas conexiones se realizan mediante “*FlowControllers*”.

- *MassFlowController()*: objeto encargado de mantener un cierto flujo de masa específico entre un reactor aguas arriba y otro aguas abajo, independientemente de sus propiedades. Gracias a este tipo de controlador de flujo se puede controlar los dosados de cada reactor añadiendo la cantidad de aire correspondiente. La ecuación que define dicho flujo se corresponde con

$$\dot{m} = m_0 g(t)$$

En este caso las funciones que definen el flujo másico en la entrada de los reactores tienen formas un poco más complejas como se comentará en el capítulo 4.3. ARQUITECTURA DE LA RED, pero siguiendo la misma forma. Lo que sería la función variable con el tiempo ($g(t)$) se corresponde con la masa del reactor y lo equivalente a la constante (m_0) será una relación entre los dosados de los reactores implicados en cada controlador.

- *PressureController()*: este objeto trabaja en base a un controlador de masa pero añade un ajuste por las diferencias de presiones. Suele situarse aguas abajo de los reactores ya que depende de un controlador master que suele ser el que está conectado aguas arriba para que el flujo de entrada y salida sea el mismo, simplemente añadiendo una pequeña corrección por diferencia de presiones

$$\dot{m} = \dot{m}_{master} + K_v f(P_1 - P_2)$$

Donde K_v es una constante de proporcionalidad y $f(P)$ una función de la diferencia de presiones. Si $\dot{m} < 0$, se hará igual a cero ya que no está permitida la existencia de un flujo que circule en la dirección inversa al sentido de la corriente general de la red.

- *Valve()*: la válvula tiene un flujo másico que es función de una pérdida de presión, que se define mediante la expresión

$$\dot{m} = K_v g(t) f(P_1 - P_2)$$

Siendo K_v una constante de proporcionalidad, $g(t)$ una función del tiempo y $f(P)$ una función de la presión. Dicha diferencia de presiones nunca puede ser negativa de forma que el flujo vaya de adelante hacia atrás.

Este objeto suele situarse aguas abajo del último reactor para conectar la red con el *outlet*, el cual almacena las propiedades del flujo a la salida de la red.

```

184 # -----
185 # -----CONTROLLERS-----
186 # MIX-R1
187 mfc_1 = ct.MassFlowController(inlet_mix, r1, mdot = mdot_ref)
188
189 # R1-R2, R1-R3, R1-R4
190 mfc_12 = ct.MassFlowController(r1, r2, mdot = mdot_12)
191 mfc_13 = ct.MassFlowController(r1, r3, mdot = mdot_13)
192 mfc_14 = ct.MassFlowController(r1, r4, mdot = mdot_14)
193
194 # Corrientes de aire a R2, R3 y R4
195 mfc_A2 = ct.MassFlowController(inlet_air, r2, mdot = mdot_A2)
196 mfc_A3 = ct.MassFlowController(inlet_air, r3, mdot = mdot_A3)
197 mfc_A4 = ct.MassFlowController(inlet_air, r4, mdot = mdot_A4)
198
199 # R2-R5, R3-R5, R3-R6
200 pfc_25 = ct.PressureController(r2, r5, master=mfc_12,K=1.e-4)
201 pfc_35 = ct.PressureController(r3, r5, master=mfc_13,K=1.e-4)
202 mfc_36 = ct.MassFlowController(r3, r6, mdot = mdot_36)
203
204 # Corriente de aire a R5 y R6
205 mfc_A5 = ct.MassFlowController(inlet_air, r5, mdot = mdot_A5)
206 mfc_A6 = ct.MassFlowController(inlet_air, r6, mdot = mdot_A6)
207
208 # R4-Mixer, R5-Mixer, R6-Mixer
209 pfc_47 = ct.PressureController(r4,r7, master=mfc_14,K=1.e-4)
210 pfc_57 = ct.PressureController(r5,r7, master=mfc_12,K=1.e-4)
211 pfc_67 = ct.PressureController(r6,r7, master=mfc_13,K=1.e-4)

```

Figura 5. Forma de implementar en Cantera con Python las conexiones entre reactores

Además de los reactores como tal, existen otros llamados *Reservoir()*, los cuales tienen unas condiciones constantes por lo que son los utilizados como fuentes de suministro del aire que entra a los reactores. Estos también se conectan mediante controladores de masa.

A ambos tipos de conectores hay que especificarles el reactor que se encuentra aguas arriba (*upstream*), el que está aguas abajo (*downstream*) y la función que define el flujo másico (*mdot*). La forma de hacerlo se muestra en la Figura 5, la posición de los argumentos indica de qué elemento se trata.

Tras diseñar la red se lleva a cabo la simulación temporal, la cual es resuelta en *Cantera* por medio de “*CVODES solver*” procedente del paquete “*SUNDIALS*”, el cual es un solucionador de sistemas ODE rígidos y no rígidos (problema de valor inicial) dados en

forma explícita $y' = f(t, y, p)$ con capacidades de análisis de sensibilidad, [9].

La integración temporal empieza en un estado inicial y puede avanzar en el tiempo mediante diferentes métodos.

- *step()*: No se puede especificar el salto temporal ya que solo actualiza el estado del sistema cuando aparecen ciertos cambios dentro de unas tolerancias absolutas y relativas.

- *advance()*: Con este método es el usuario el encargado de especificar el paso temporal entre un estado y el siguiente, de esta forma se guardan todos los estados del sistema para todos los tiempos deseados entre el estado inicial y el tiempo máximo de la simulación.

- *advance to steady state()*: Este método calcula únicamente el estado final estacionario del sistema, es decir cuando las diferencias entre un estado y el siguiente sean menores que unos ciertos valores límite impuestos.

Puesto que se han realizado y tenido en cuenta cálculos transitorios, se ha empleado el comando *advance()* para poder observar qué ocurre en cada momento considerando los tiempos de residencia de los reactores y de esta forma poder comprobar cómo evolucionan algunas variables como pueden ser la cantidad de flujo que entra a los reactores o el valor de las concentraciones de algunos de los compuestos.

Por su parte, podría ser de interés el comando *advance_to_steady_state()*, ya que solo calcula y almacena el estado final del sistema por lo que el coste computacional sería menor, pero en redes de cierta complejidad terminan apareciendo errores de integración ya que alcanza el número máximo de pasos antes de llegar a la solución estacionaria. Es posible evitar este problema estableciendo un límite de valor residual bastante elevado lo que provoca que los resultados finalmente obtenidos terminen por ser menos precisos que los obtenidos con *advance()*.

```
232 # -----SIMULATION-----
233 sim = ct.ReactorNet([r1,r2,r3,r4,r5,r6,r7])
234
235 # Inicialización de la integración temporal
236 time = 0.0 # Variable temporal (s)
237 dt = 1e-4 # Incremento de tiempo (s)
238 tmax = 600 # Pasos totales
239 for n in range(int(tmax)):
240     time += dt
241     sim.advance(time)
```

Figura 6. Código para la inicialización de la integración temporal

Para comenzar la simulación es necesario especificar qué reactores conforman la red, empleando el comando *ReactorNet()* y definir las variables de integración. Se establece el número máximo de pasos (*tmax*) y el intervalo que ocupa cada uno de ellos (*dt*). A continuación, en un bucle *for* se comienza a avanzar paso a paso y realizar los cálculos para cada uno de dichos pasos aplicándole a la red de reactores (*sim*) el comando *advance()*.

4. MODELO DE EMISIONES PARA CÁMARA DE COMBUSTIÓN

En esta sección se recopila toda la información proporcionada por el paper del CIAM [1], y aquella deducida, así como la metodología para diseñar la red de reactores.

4.1. “MODELING STUDY OF GAS-TURBINE COMBUSTOR EMISSION”

El presente Trabajo Fin de Máster trata de crear, como se ha comentado anteriormente, una red de reactores para predecir las emisiones de contaminantes. Como base para poder concluir la fiabilidad de la red, se ha fijado el estudio realizado por el CIAM (*Cental Institute of Aviation Motors*), [1]. Dicho estudio presenta la descripción de una red de reactores diseñada para la cámara de combustión CIAM-M similar a la empleada en el motor PC-90A, utilizando metano como combustible.

A lo largo del estudio se ofrecen algunos datos a partir de los cuales se han tenido que deducir el resto de parámetros necesarios para el diseño de la red, como son las condiciones de operación o los dosados (Z) y tiempos de residencia para cada reactor. El esquema de reactores se basa en la existencia de zonas reales en la cámara de combustión que presentan valores de Z uniformes, lo que permite separar el volumen total en pequeños dominios, es decir, reactores.

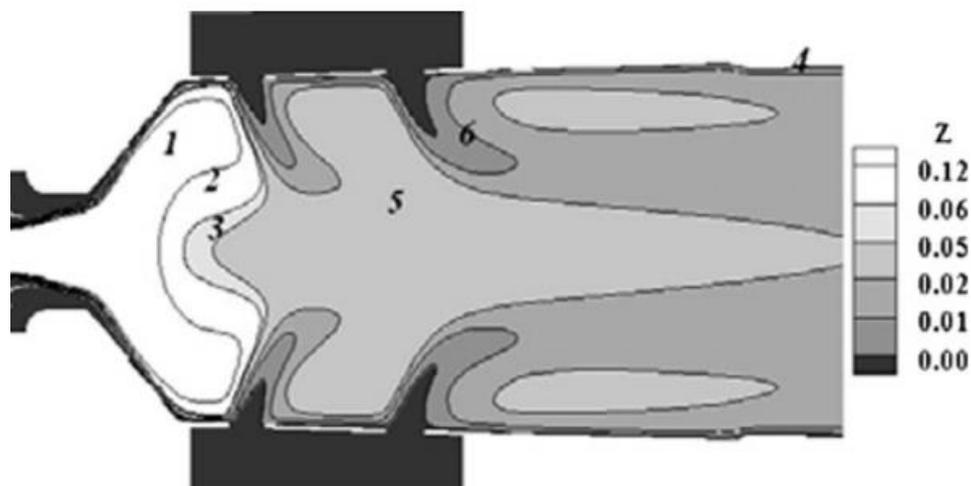


Figura 7. Cámara CIAM-M con las zonas de Z uniforme, [1]

En la Figura 7 se pueden observar las distintas zonas. La zona 1 se corresponde con la zona más próxima al inyector por lo que presenta el dosado más elevado ($Z_1 = 0.12$), esta corriente se divide en dos simulando el frente de llama y en un tercero próximo a la

pared. Los reactores 2 y 3 se sitúan aguas arriba y abajo, respectivamente, del frente de llama para simular la combustión en esa zona, el reactor 2 se encuentra aguas arriba con un dosado más rico ($Z_2 = 0.065$) y el 3, aguas abajo, con una mezcla más pobre ($Z_3 = 0.045$). Además, los volúmenes y tiempos de residencia de estos dos reactores han de ser pequeños. Para estimar estos tiempos de residencia, se ha utilizado el “flamelet model”, dando finalmente lugar a un $\tau_{res} = 0.4$ ms. La mezcla procedente del reactor 2 y 3 entra al reactor 5 ($Z_5 = 0.022$), donde se mezclan ambas corrientes con un tiempo de residencia más elevado de 3.6 ms.

Por último, se encuentran los reactores 4 y 6, utilizados para simular la zona de refrigeración próxima a las paredes. El flujo entrante a 4 procede del reactor 1 y representa una zona muy pobre de combustible ($Z_4 = 0.002$) y el entrante a 6 ($Z_6 = 0.01$) es una parte de la mezcla del reactor 3. Los tiempos de residencia para estos últimos reactores, a diferencia de los reactores 2 y 3, se han obtenido mediante cálculos CFD y los dosados son los más pobres de la red.

A continuación, se muestra el esquema empleado por el CIAM para representar esta red descrita.

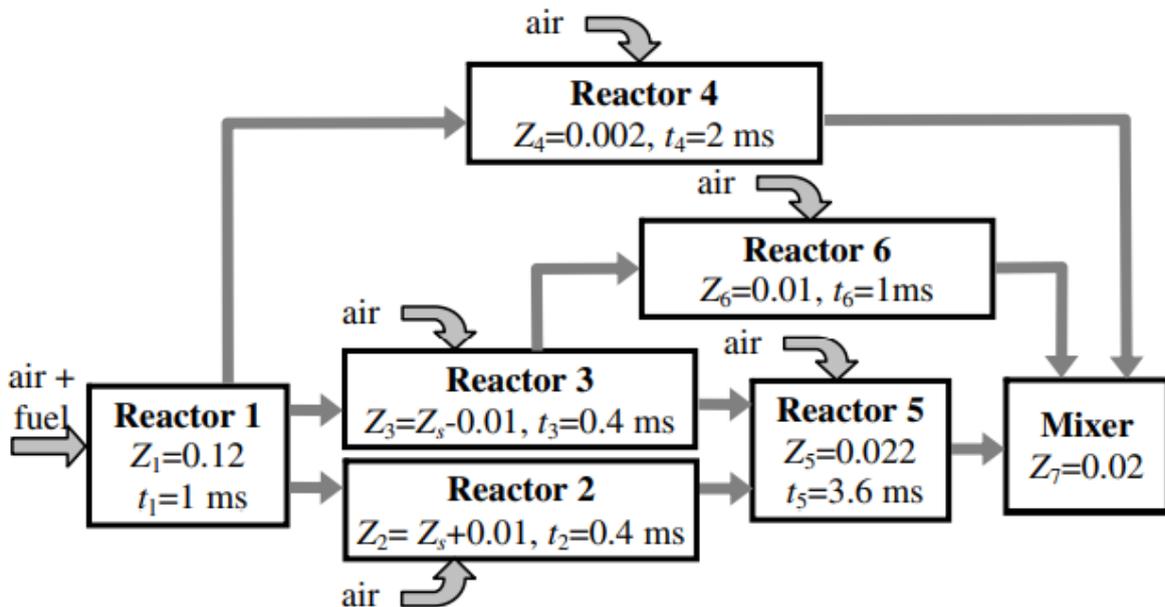


Figura 8. Esquema de la red de reactores de la CIAM-M, [1]

El objetivo final es poder predecir las emisiones de los contaminantes mencionados en el apartado anterior. Dichos contaminantes se miden a partir del índice de emisión (EI) en g/kg de combustible.

$$EI_i = G_i/G_f \cdot 1000 \text{ [g/kg]}$$

Donde G_i y G_f , son el flujo másico del compuesto a calcular y del combustible, respectivamente. En el caso de los NO_x , puesto que parte del NO se acaba oxidando a NO_2 , el flujo másico correspondiente se calcula como:

$$G_{\text{NO}_x} = G_{\text{NO}} \cdot \mu_{\text{NO}_2} / \mu_{\text{NO}} + G_{\text{NO}_2}$$

Es decir, teniendo en cuenta una ponderación en base a sus masas molares.

En nuestro caso, se ha empleado el mecanismo GRI-Mech 3.0 para realizar los cálculos de la combustión, pero en el informe del CIAM han hecho comparación con otros mecanismos como el mecanismo DS y el mecanismo de Knnov. Tras realizar esta comparativa, se obtiene que el mecanismo GRI-Mech 3.0 subestima la producción de NO_x lo que se debe a que considera como principal mecanismo de formación de NO el Zel'dovich, mientras que el DS considera que el "prompt NO" tiene un mayor efecto. De ahí surgen algunas de las diferencias existentes entre los resultados finales obtenidos.

4.2. PARÁMETROS

Para diseñar la red y llevar a cabo la simulación es importante tener en cuenta ciertos parámetros y condiciones iniciales que permitan que la solución converja y alcanzar los resultados óptimos.

En primer lugar, se consideran las condiciones de operación como son la presión y temperatura a la que se inicializan los cálculos, son los mostrados en la Tabla 2.

Tabla 2. Condiciones de operación

Parámetro	Unidades	Valor
Presión, P	MPa	1
Temperatura aire, T_{air}	K	600 - 660
Temperatura metano, T_f	K	300
Tiempo residencia, τ_{res}	ms	6.7

Se realizan dos estudios, uno con la temperatura del aire de entrada de 600 K y otro con temperatura igual a 660 K para determinar que ocurre con los contaminantes al aumentar la temperatura, lo que puede simularse como aumento de la potencia o del régimen de vuelo.

Además de estas condiciones, en el artículo también proporcionan las fracciones de mezcla y los tiempos de residencia de cada reactor. La fracción de mezcla se define mediante la ecuación,

$$Z = \frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{fuel} + \dot{m}_{air}}$$

Tabla 3. *Tiempos de residencia y fracción de mezcla en cada reactor*

	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7
τ_{res} [ms]	1	0.4	0.4	2	3.6	1	3.7
Z [-]	0.12	0.065	0.045	0.002	0.022	0.01	0.02

Estos son los datos que proporciona el informe [1], pero además sería necesario poseer cierta información adicional sobre cómo y con qué elementos se monta la red. Dichas características del estudio han sido deducidas tras diferentes pruebas y cálculos con los cuales se han alcanzado las soluciones esperadas, siempre con un pequeño error debido a las posibles diferencias en el planteamiento del problema o en la resolución debidas a la falta de información para llevarlo a cabo.

Las variables respecto las cuales se han realizado los procesos de calibración han sido aquellas como los volúmenes, los flujos entrantes a los reactores tanto de mezcla como de aire o las temperaturas a las que inicializar la mezcla para las diferentes simulaciones.

Aun así, no se aprecian grandes discrepancias por lo que la metodología a la hora de diseñar la red puede considerarse óptima y continuar con el análisis de los resultados para posteriormente emplear este cálculo en otros estudios.

4.3. ARQUITECTURA DE LA RED

A continuación, se explicará con detalle el diseño de la red de reactores empleada, dicha red es la misma utilizada por el CIAM por lo que el significado físico de cada reactor se ha explicado en el apartado anterior.

Una vez determinado qué riquezas y qué tiempos de residencia han de tener cada uno de los reactores, junto con las condiciones de operación proporcionadas en el paper [1], se ha montado la red empleando los diferentes controladores de flujo para ajustarse a los requisitos y poder obtener los resultados esperados.

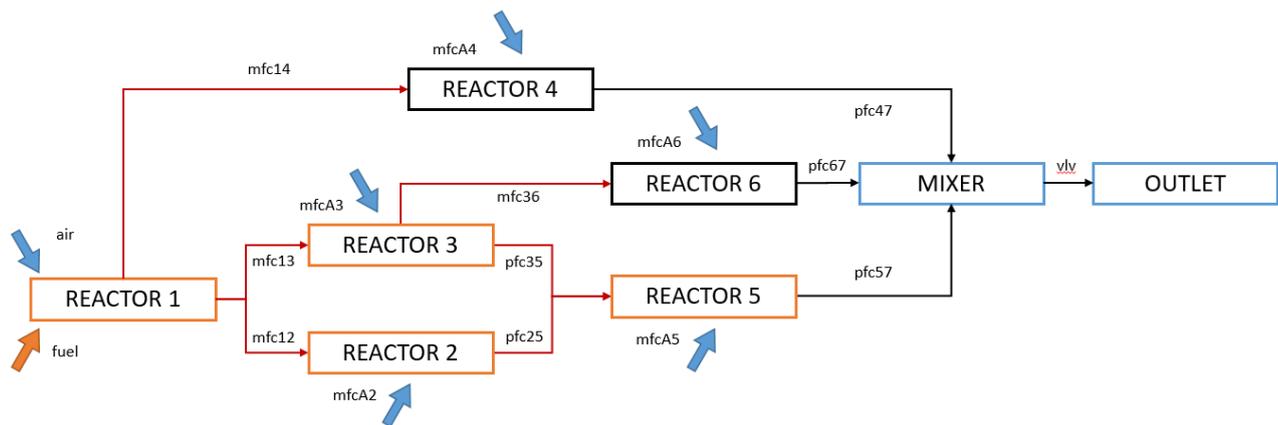


Figura 9. Esquema de los flujos de masa en la red de reactores para la CIAM-M

Los nombres mfc y pfc hacen referencia a “*MassFlowController()*” y “*PressureController()*”, respectivamente, y las flechas azules hacen referencia a las entradas de aire exterior a los reactores. Este es el aire encargado de ajustar los dosados de la mezcla en relación a la cantidad de flujo que entra desde el reactor inmediatamente aguas arriba del reactor en cuestión.

Para simular estos reactores, se ha empleado el objeto “*IdealGasReactor()*”, es decir, reactores a volumen constante y para mezclas de gas ideal. Los argumentos de dicho objeto o variables a establecer son el gas que contienen y el volumen que ocupan.

Puesto que el parámetro que interesa es el tiempo de residencia, ha sido necesario comprobar qué relación existe entre éste y el volumen del reactor, ya que es la única condición que podemos variar para conseguir el tiempo especificado.

Tras realizar varias pruebas alterando los volúmenes de cada uno de los reactores y observando qué ocurre con el tiempo de residencia se observa la existencia de una relación totalmente lineal, por lo que sabiendo el tiempo deseado es muy sencillo calcular el valor específico del volumen que tiene que tener cada reactor para ajustar el tiempo de residencia al especificado en el informe.

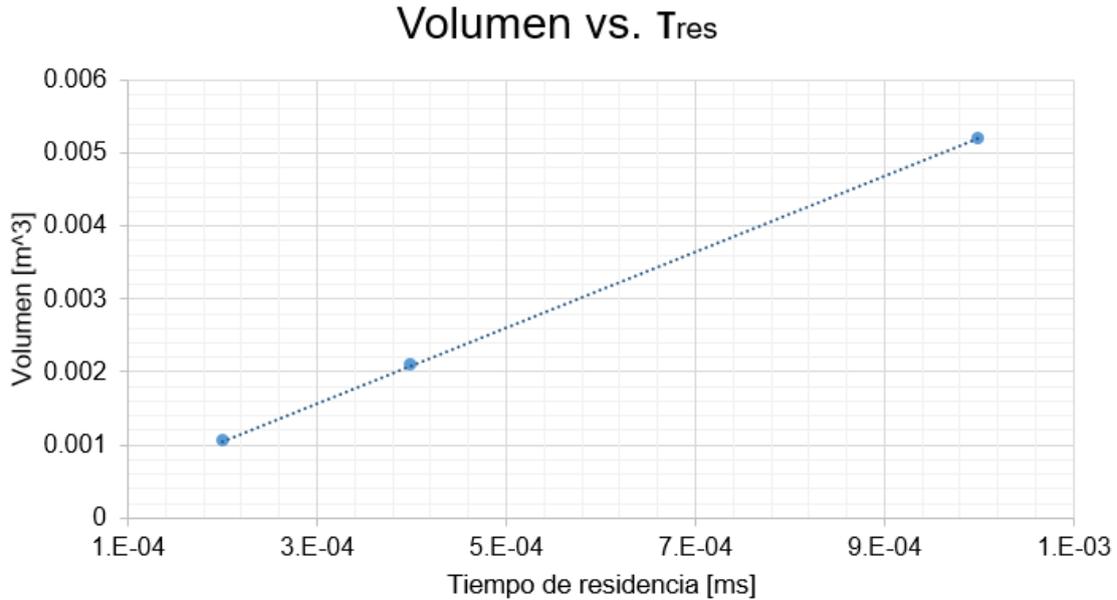


Figura 10. Ejemplo del cálculo de volúmenes (reactor 5, $T_{air} = 660\text{ K}$)

Finalmente, los volúmenes obtenidos para cada uno de los reactores tanto en el estudio con $T_{air} = 600\text{ K}$ como a 660 K , se agrupan en la Tabla 4.

Tabla 4. Volúmenes y tiempos de residencia de cada reactor

	Volumen [m ³]	τ_{res} [s]
Reactor 1	$1.00 \cdot 10^{-4}$	1
Reactor 2	$3.97 \cdot 10^{-5}$	0.4
Reactor 3	$5.81 \cdot 10^{-6}$	0.4
Reactor 4	$1.79 \cdot 10^{-5}$	2
Reactor 5	$6.90 \cdot 10^{-4}$	3.6
Reactor 6	$2.66 \cdot 10^{-6}$	1
Reactor 7	$7.60 \cdot 10^{-4}$	3.7

Una vez establecido el tamaño de los reactores, se procede a ajustar el dosado de la mezcla, la siguiente variable sobre la que se posee información. Para ello, hay que jugar con la cantidad de aire que se va añadiendo a cada reactor en relación a la cantidad de mezcla que va entrando procedente de los reactores anteriores.

La parte que entra correspondiente al reactor anterior se ha establecido de forma que la fracción de mezcla del *mixer* (Z_7) tiene un valor dependiente de los porcentajes de la cantidad de flujo que se separan de la corriente principal hacia cada reactor.

Tabla 5. Distribución de cantidad de flujo másico entrante en cada reactor

1-2	1-3	1-4	3-5	3-6
89 %	10 %	1 %	91 %	9 %

Gracias a esta distribución se puede comprobar que a los reactores 4 y 6, correspondientes con la zona próxima a la pared donde las mezclas son más pobres además de representar la zona de refrigeración, es a las que les llega menor cantidad de mezcla de aire/combustible y a las que hay que añadir mayor cantidad de aire en comparación.

Una vez establecida esta distribución de flujos, hay que determinar cuál es la cantidad de aire que es necesario añadir en cada reactor para conseguir el dosado indicado. Para los reactores 2, 3, 4 y 5, dicha relación es sencilla puesto que solo reciben mezcla de un reactor. La relación es la siguiente,

$$\dot{m}_{Ai} = \dot{m}_{i-1,i} \left(\frac{Z_{i-1}}{Z_i} - 1 \right)$$

Donde i se refiere al reactor en cuestión y el subíndice $i-1$ es aquel conectado aguas arriba del mismo. Y $\dot{m}_{i-1,i}$ es el flujo entrante desde el reactor $i-1$ al i , es decir, considerando al distribución indicada en la Tabla 5.

Sin embargo, el reactor 5 recibe mezcla tanto del reactor 2 como del reactor 3 en este caso la relación pasa a ser,

$$\dot{m}_{A5} = \frac{\dot{m}_{2,5} Z_2 + \dot{m}_{3,5} Z_3}{Z_5} - (\dot{m}_{2,5} + \dot{m}_{3,5})$$

Donde $\dot{m}_{2,5}$ y $\dot{m}_{3,5}$, son respectivamente, el flujo que sale de 2 y de 3 (suma de la mezcla procedente de 1 más el aire añadido) además en el caso del reactor 3 multiplicado por la parte correspondiente para el reactor 5 ya que este flujo se divide en dos partes.

```

127 # -----
128 # -----MASS FLOW-----
129 mdot_rel_12 = 0.89
130 mdot_rel_13 = 0.1
131 mdot_rel_14 = 0.01
132
133 mdot_rel_35 = 0.91
134 mdot_rel_36 = 0.09
135
136 #inlet 1 (A+F)
137 def mdot_ref(t):
138     return r1.mass / tres_1
139
140 #flow 1-2 (A+F)
141 def mdot_12(t):
142     return mdot_ref(t) * mdot_rel_12
143
144 #air 2 (A)
145 def mdot_A2(t):
146     return mdot_12(t) * (Z_1/Z_2 - 1)

```

Figura 11. Ejemplo para establecer los flujos entrantes a un reactor con Python

Finalmente, las tres corrientes resultantes se mezclan en el reactor 7 o *mixer*, y es ahí donde se puede comprobar que se han distribuido bien las cantidades de flujo y la adición de aire en cada reactor ya que la fracción de mezcla es la indicada en el esquema de la red. Esta última conexión, puesto que no hay ninguna otra indicación se realiza mediante controladores de presión, de forma que entra todo el flujo de los tres reactores de forma que no aparezcan grandes diferencias de presión.

Todos estos flujos másicos, debido a las conexiones establecidas son constantes a lo largo de la simulación temporal y, el resto de parámetros como el tiempo de residencia se va ajustando hasta mantenerse constante en el valor indicado, lo que se puede considerar como el momento en el que se alcanza la solución de equilibrio y a partir del cual se pueden tomar los datos para comparar resultados.

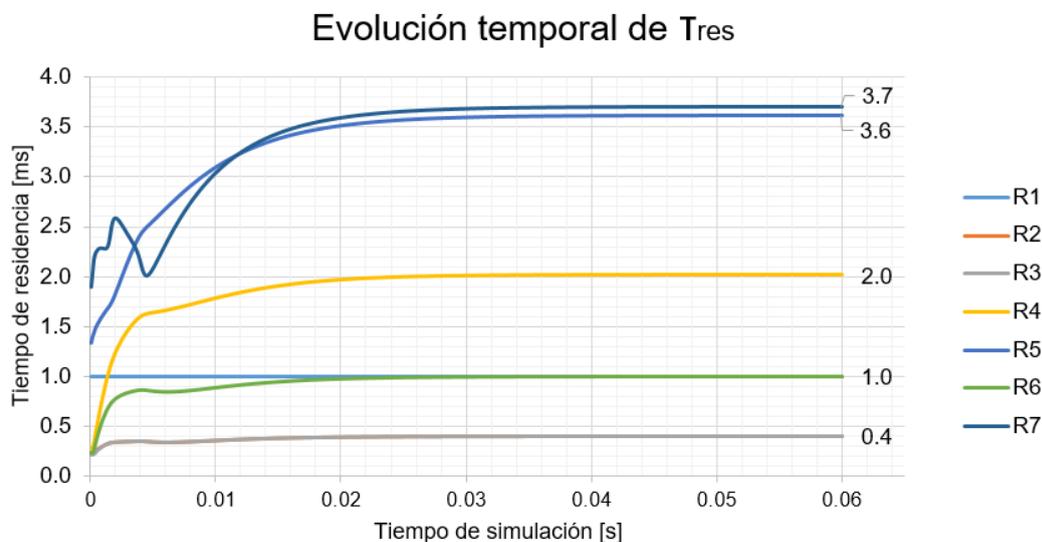


Figura 12. Evolución temporal de los tiempos de residencia

En la Figura 12, se muestra la evolución del tiempo de residencia para cada uno de los reactores, definido como,

$$\tau_{res,i} = \frac{m_i}{\dot{m}_{in,i}}$$

y se comprueba que finalmente el tiempo de residencia de cada uno es el necesario y que, la simulación puede considerarse estacionaria a partir de los 0.05s.

Puesto que el tiempo de residencia responde a la relación entre la masa del reactor y el flujo másico entrante, se ha representado lo que ocurre con dichas variables a lo largo de la simulación, para que el tiempo de residencia varíe hasta hacerse estable, el flujo másico debe ser constante mientras que la masa evoluciona siguiendo una tendencia similar a la τ . Las gráficas han sido realizadas para los reactores 2 y 3 de forma que se puedan apreciar dichas variaciones.

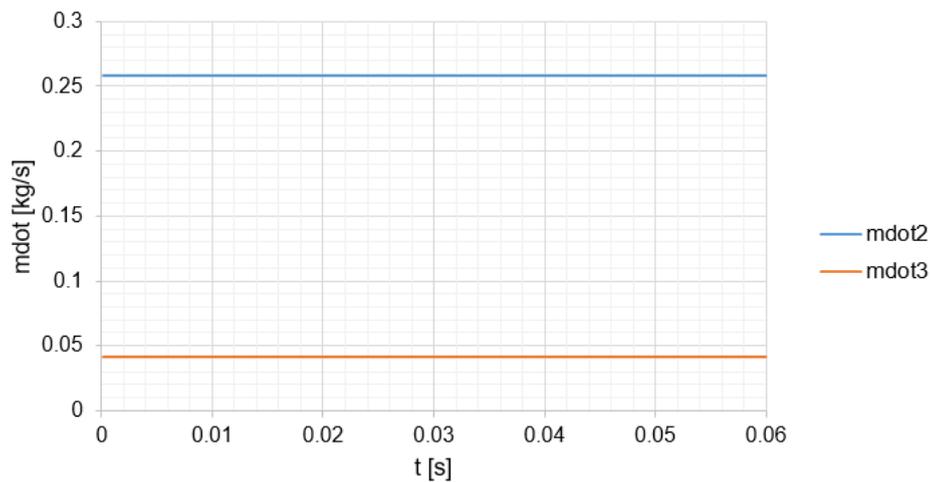


Figura 13. Flujo másico respecto del tiempo de simulación, ejemplo para los reactores 2 y 3 en la simulación con $T_{air}=660K$

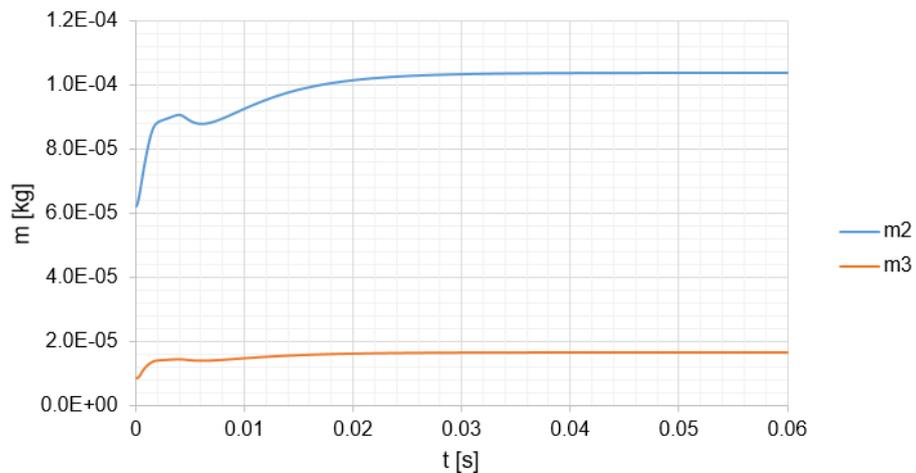


Figura 14. Masa respecto del tiempo de simulación, ejemplo para los reactores 2 y 3 en la simulación con $T_{air}=660 K$

Una vez diseñada la red de forma genérica hay que tener en cuenta que se van a realizar dos estudios, uno con una temperatura del aire de entrada igual a 600 K y otra a 660K.

En primer lugar, es necesario explicar cómo afecta a la inicialización de la red las temperaturas del combustible y del aire de entrada, ya que en el informe dan la temperatura de ambas corrientes por separado, pero no de la temperatura inicial de la mezcla con la que se rellena el reactor 1 para comenzar la simulación.

Para saber la temperatura real de la mezcla aire/combustible se ha desarrollado otro script con un único reactor al que se le introducen las dos corrientes de forma independiente tal que la riqueza final de dicha mezcla sea la misma que la supuesta en el inicio de la red.

Los dos *Reservoir()*, uno con aire y otro con combustible se conectan al reactor mediante dos controladores de masa. Se lleva al equilibrio y se comienza la simulación. Una vez se alcance el estacionario se comprueba qué temperatura se ha alcanzado y de esta forma se obtiene cuál sería la temperatura de la mezcla que llega al reactor 1 una vez mezclado.

Tabla 6. Temperaturas para cada uno de los estudios

	T_{fuel} [K]	T_{air} [K]	T_{total} [K]
Estudio 1	300	600	641.29
Estudio 2	300	660	687.73

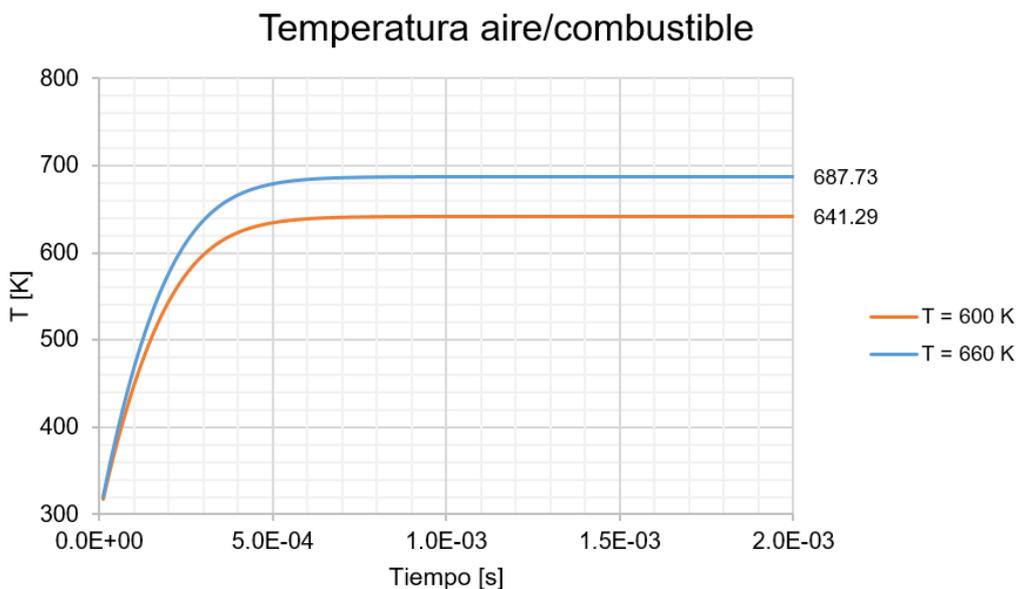


Figura 15. Temperaturas finales de la mezcla aire/combustible para inicializar el reactor 1

5. RESULTADOS

Se han simulado dos escenarios, uno con la temperatura del aire igual a 600 K y otro a 660 K, ya que son dos de los estudios realizados en el informe del CIAM y con lo cual será posible comparar si los resultados se ajustan o no a lo esperado.

5.1. TEMPERATURAS

En primer lugar, la comparación más sencilla de realizar radica en las temperaturas ya que el informe [1] indica aproximadamente el valor de las temperaturas en cuatro de los reactores para la simulación de $T_{\text{air}} = 600$ K. Dichos valores se recogen y se comparan en la Tabla 7.

Tabla 7. Comparativa de las temperaturas para la simulación $T_{\text{air}} = 600$ K

	REACTOR 1	REACTOR 2	REACTOR 3	REACTOR 5
Temperaturas [K]	1800	2300	2200	1500
T obtenidas [K]	1747.74	2360.51	2238.13	1501.87
Error [%]	2.90	2.63	2.73	0.12

En base a esta comparativa, se puede comprobar que ninguno de los valores supera el 3% de error relativo por lo que puede suponerse como válidos respecto al informe del CIAM. Por otro lado, tras mostrar el valor de las temperaturas ahora en todos los reactores, se puede observar con claridad que, como cabe esperar, las zonas donde se alcanzan las temperaturas más elevadas son aquellas que simulan el frente de llama mientras que las que poseen valores más bajos, son los reactores 4 y 6, es decir, los que simulan la zona de la pared.

Las temperaturas es un factor importante a tener en cuenta a la hora de comprobar qué contaminantes se producen en cada reactor ya que su formación está íntimamente ligada, entre otras cosas, a ellas.

Por su parte, se ha llevado a cabo el estudio correspondiente con una $T_{\text{air}} = 660$ K. Al aumentar la temperatura del aire de entrada, la mezcla inicial se encuentra más caliente, a unos 687.73 K, lo que produce un aumento general en las temperaturas del sistema.

Cabe destacar, que en el reactor 4 y 6 apenas se aprecia un cambio en el valor de temperatura entre ambos estudios, Figura 16. Esto se debe a que ambos se corresponden con la zona de refrigeración por lo que no entran grandes cantidades de flujo por lo que la influencia de la temperatura de la mezcla inicial no afecta en gran

medida.

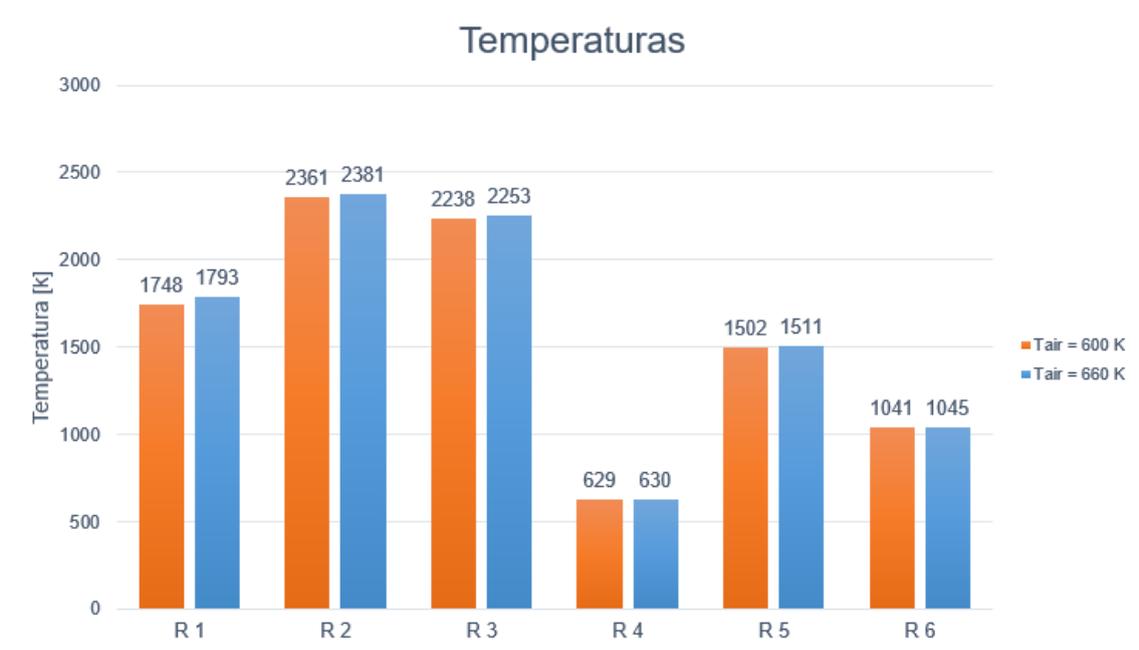


Figura 16. Resultados obtenidos para la temperatura en cada reactor para el estudio con $T_{air} = 600\text{ K}$ y $T_{air} = 660\text{ K}$

5.2. EMISIONES DE CO₂

El CO₂ es un producto natural de la combustión de los hidrocarburos, por lo que su formación depende, esencialmente, de si la reacción se completa o no. Para ello, hay que tener en cuenta, principalmente, el dosado de la mezcla ya que, para mezclas extremadamente pobres o ricas, existirá un exceso o un déficit de oxígeno que impedirá que la reacción se complete formando dicho producto.

En la Figura 17 se muestra un gráfico de barras que representa el índice de emisión (EI) del dióxido de carbono para cada uno de los reactores. Teniendo en cuenta las condiciones de formación del CO₂, cabe suponer que los reactores 1 y 4 presentarán los valores más bajos de EI CO₂ ya que están formados por las mezclas más rica y pobre, respectivamente.

En cuanto a los reactores 2 y 3, cuyas mezclas presentan dosados próximos al estequiométrico, ambos poseen valores altos de emisión. Sin embargo, se puede observar una importante diferencia entre ambos lo que se debe a que el reactor 2 es ligeramente más rico lo que hace que no haya suficiente oxígeno y se genere mayor cantidad de CO que de CO₂.

Por último, los reactores 5 y 6, los cuales presentan los valores más elevados. Si solo

se tiene en cuenta el valor de las riquezas podría no tener sentido ya que son mezclas cuyos dosados relativos se encuentran por debajo de $\phi = 1$. Lo que ocurre aquí, es que además de esto también toman importancia el valor de las temperaturas y de los tiempos de residencia ya que, para zonas con temperaturas no muy elevadas, el principal producto de la combustión es el CO_2 , mientras que si estas temperaturas comienzan a aumentar parte de este CO_2 se disocia en CO y el EICO_2 disminuiría. Así como, el aumento de los tiempos de residencia de los reactores hará que la reacción tenga más tiempo para completarse lo que aumentaría las emisiones del CO_2 . Es por ello, que los reactores 5 y 6 con temperaturas intermedias y tiempos de residencia altos poseen los mayores índices de emisión para el dióxido de carbono.

En general, estas emisiones no se tratan como residuo ya que es un producto intrínseco de la reacción por lo que el único método para reducir su impacto es reducir la quema de combustible.

Por su parte, se comprueba lo que ocurre con el estudio para la $T_{\text{air}} = 660 \text{ K}$ y, como cabe esperar, la tendencia en cada reactor es la misma con pequeños cambios en los valores específicos.

No se aprecian a penas cambios en la producción de CO_2 con el aumento de la temperatura del aire (Figura 17), esto se debe a que se mantienen los dosados de las mezclas y las zonas en las que antes se encontraban las temperaturas más altas siguen siendo las mismas por lo que en general, la reacción de combustión sigue manteniendo las mismas condiciones y puesto que el dióxido de carbono es un producto natural de la misma, el aumento de la temperatura en el sistema completo no afecta mucho a la cantidad de CO_2 que se emite.

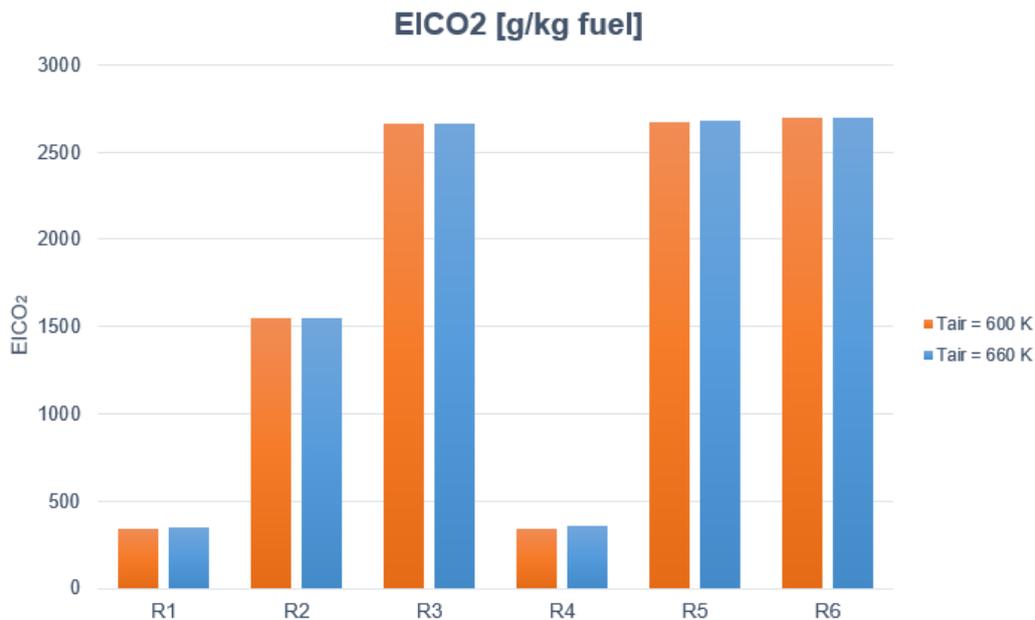


Figura 17. Comparativa del EICO₂ para los estudios con ambas temperaturas del aire de entrada

5.3. EMISIONES DE CO

A continuación, se comprueba qué ocurre con el índice de emisiones del CO, otro de los resultados proporcionados por el estudio del CIAM. El índice de emisiones (EI) como se ha comentado en el capítulo 4.1. “MODELING STUDY OF GAS-TURBINE COMBUSTOR EMISSION”, se mide en g/kg de combustible

Tabla 8. Comparación de EICO para el estudio a 600 y a 660 K

	CIAM [1]	OBTENIDO
T _{air} = 600 K	13.17	14.03
T _{air} = 660 K	13.59	11.76

Una vez comparado el índice de emisión con el obtenido por el CIAM a la salida de la red, se observa que no existen grandes diferencias entre ellos, pero aun así, la diferencia que existe se debe principalmente a que los resultados ofrecidos en el informe se corresponden con cálculos hechos empleando el mecanismo DS en vez del GRI-Mech.

Como se comenta en el apartado 3.1. EMISIONES de emisiones, la principal causa de la formación de CO se debe a reacciones con exceso de combustible reduciéndose hasta un valor mínimo de $\phi = 0.8$.

Según [4], las tres principales causas de la formación de los óxidos de carbono son

1. Mezclas demasiado pobres y/o tiempos de residencia insuficientes.

2. Zonas excesivamente ricas en las que pueden aparecer grandes concentraciones locales de CO.
3. Una adición excesiva de aire y las zonas de refrigeración.

Para llevar a cabo la explicación se recogen, a continuación, los dosados relativos de cada uno de los reactores.

Tabla 9. Dosados relativos de cada reactor

	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7
ϕ [-]	2.345	1.195	0.810	0.034	0.387	0.173	0.347

Como se puede observar en la Figura 19, el primer reactor que posee un dosado rico tiene un índice de emisión de CO elevado ya que no hay suficiente oxígeno como para oxidarlo y convertirlo en CO₂.

A continuación, los reactores 2 y 3, ambos próximos al estequiométrico, poseen valores con grandes diferencias entre sí. En el caso del reactor 3 presenta un valor de EICO muy pequeño ya que tiene un $\phi \approx 0.8$ (valor en el que se situaría el mínimo [4]). Sin embargo, el reactor 2, por su parte, aunque también posee un dosado relativo próximo a 0.8, tiene un índice de emisión elevado. Esto puede ser debido al punto 2, en las zonas ricas próximas al estequiométrico aparecen altas concentraciones locales de CO.

Teniendo en cuenta que el mínimo se alcanza generalmente para $\phi = 0.8$ y que aumenta a medida que te alejas hacia cualquiera de los lados, cabe esperar que el reactor 4, cuya mezcla es muy pobre, aparezca un pico de CO.

Para comprobar que en el caso de nuestro combustible la tendencia a disminuir el EICO con el dosado es igualmente válida, se ha simulado una red diferente con un solo reactor y representado los índices de emisión variando los dosados relativos de la mezcla y para tres valores de presión cuyos resultados se muestran en la Figura 18 finalmente se tiene una imagen similar a la Figura 2 extraída de [4].

EICO vs. phi

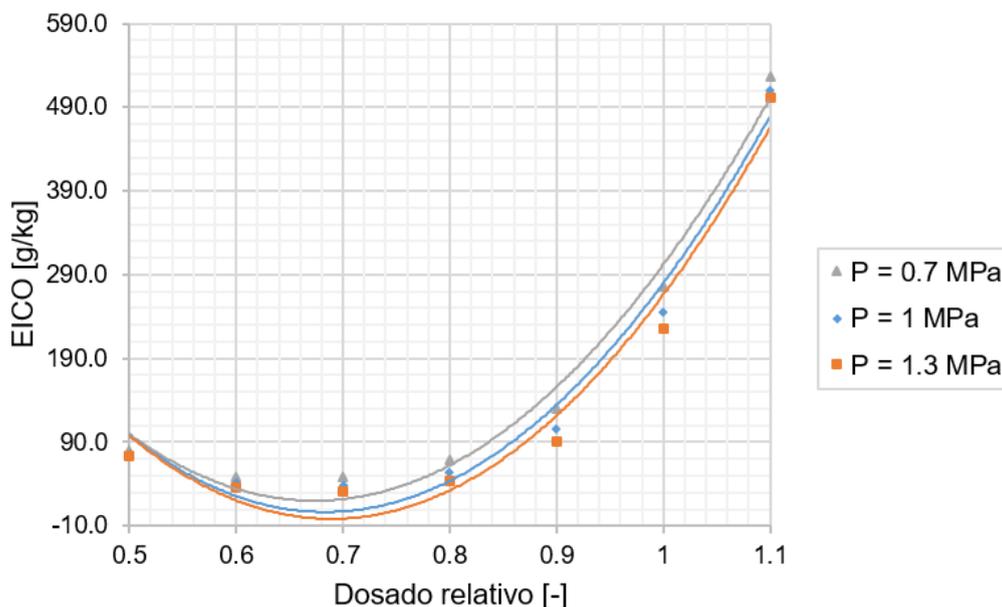


Figura 18. Influencia de la presión y de los dosados relativos en el EICO con Cantera

Con estos cálculos la tendencia es similar pero en este caso, el mínimo se alcanza un poco antes, para un $\phi \approx 0.7$, aproximadamente. Y de igual forma, a medida que aumenta la presión, la emisión de óxidos de carbono se reduce.

Y, por último, se encuentran los reactores 5 y 6, que a pesar de tener dosados relativos menores de 0.8 tienen índices de emisión incluso más pequeños que el reactor 3. Como indica el tercer punto mencionado en el libro *Gas Turbine Combustion* [4], la adición de grandes cantidades de aire hace que se reduzcan mucho las cantidades de CO por dilución, esto se puede comprobar en el reactor 5, en el cual se ha añadido el mayor flujo de aire exterior para conseguir el dosado indicado en la red de reactores (Figura 8) y consecuentemente uno de los valores más bajos en EICO.

Así mismo, el reactor 6, por ser una zona de refrigeración próximo a la pared, también posee un reducido índice de emisión.

En la formación de todos estos componentes influyen diferentes factores, y no tienen siempre todos el mismo grado de influencia, por ello en ocasiones pesa más la riqueza de la mezcla y, en otras, por ejemplo la temperatura a la que se encuentra el reactor. La única forma de comprobar qué está ocurriendo y cómo afecta eso a la formación de los contaminantes es observando donde se forman y qué razones pueden ser las causantes.

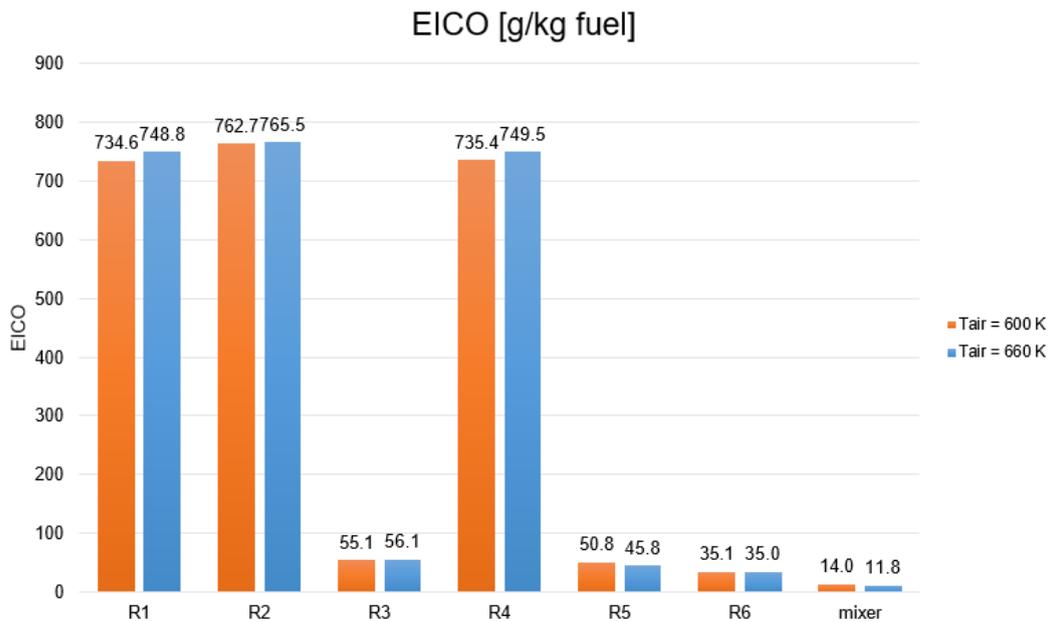


Figura 19. Índice de emisiones del CO [g/kg fuel] en cada reactor para el estudio con $T_{air}=600\text{ K}$ y $T_{air}=660\text{ K}$.

En el estudio con temperatura de aire igual a 660 K, la tendencia del EICO es similar, se encuentran los valores máximos y mínimos en los mismos reactores simplemente con algunas alteraciones en sus valores, pero en ningún caso son demasiado elevadas.

5.4. EMISIONES DE NO_x

Por último, se procede a realizar el análisis de los NO_x, uno de los contaminantes más peligrosos producidos por las turbinas de gas. Al igual que en el caso del CO y el CO₂, es posible realizar una comparación entre los resultados obtenidos a lo largo del presente estudio, llevado a cabo con *Cantera*, con los obtenidos por el CIAM. Algunos de los valores proporcionados en el informe se agrupan en las siguientes tablas. Corresponden con el índice de emisiones de los NO_x (Tabla 10) y de la relación entre las concentraciones de NO con las de NO_x totales (Tabla 11).

Tabla 10. Comparación de EINO_x para el estudio a 600 y a 660 K.

	CIAM [1]	OBTENIDO
T _{air} = 600 K	7	6.52
T _{air} = 660 K	8.8	7.05

Las diferencias obtenidas entre ambos resultados no son muy elevadas para ninguno de los dos casos, de todas formas, existe una breve explicación de por qué los valores calculados son algo inferiores que los proporcionados en el informe. Dicha explicación se llevará a cabo más adelante.

Además del índice de emisión también se proporciona la relación $[\text{NO}_2]/[\text{NO}_x]$, es decir, la relación entre la concentración molar del dióxido de nitrógeno y la de los NO_x totales.

Tabla 11. Comparación de $[\text{NO}_2]/[\text{NO}_x]$ para el estudio a 600 y a 660 K.

	CIAM [1]	OBTENIDO
$T_{\text{air}} = 600 \text{ K}$	0.24	0.20
$T_{\text{air}} = 660 \text{ K}$	0.27	0.22

En este dato la diferencia entre unos y otros es más elevada que en los comparados anteriormente debido a las discrepancias en el mecanismo de reacción empleado en uno y en otro estudio. Por otro lado, también especifican que para las turbinas de gas modernas esta relación se encuentra entre el 0.05 y el 0.25, por lo que el resultado pese a no ser exactamente el mismo que el obtenido por el CIAM, se encuentra entre los límites genéricos.

Por su parte, en cuanto a estos resultados, cabe destacar que en el informe del CIAM hacen hincapié en el empleo de diferentes mecanismos de reacción ya que los datos obtenidos, sobre todo en el caso de los NO_x , dependen en gran medida del mecanismo de reacción empleado. Dichos mecanismos han sido nombrados durante la descripción del estudio, pero a continuación se explicará con mayor detalle las diferencias y la importancia que pueda tener cada uno de ellos.

Todos ellos han sido evaluados en perfiles de diferentes especies en un reactor de mezcla perfecta, tiempos de retraso a la ignición tras ondas de choque reflejadas y velocidad de propagación de llama laminar [1], pero para el caso de las cámaras de combustión empleadas en aviación su aplicación aún no está del todo clara.

El CIAM ha estudiado los resultados para el índice de emisiones de los NO_x con cada uno de los mecanismos y los ha comparado con los resultados obtenidos de forma experimental.

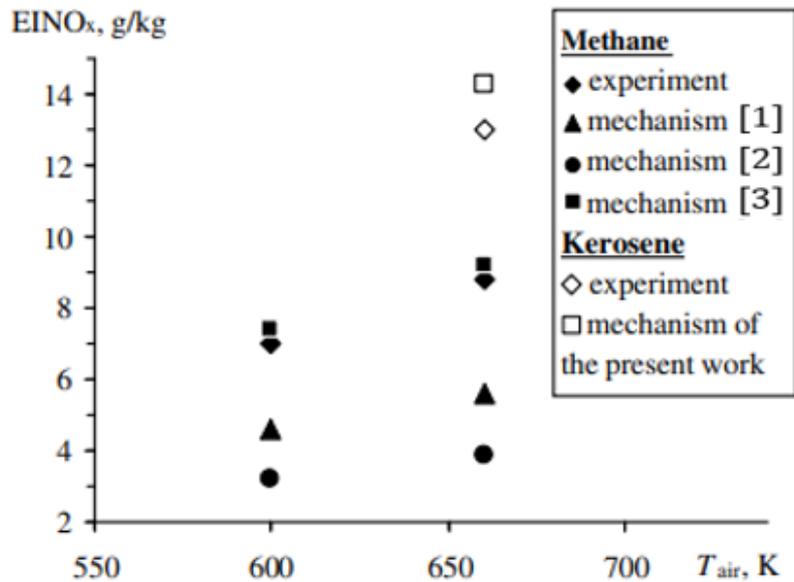


Figura 20. Comparación de $EINO_x$ para diferentes mecanismos de reacción, [1]

En la Figura 20, aparecen diferentes mecanismos que son:

- [1]: Mecanismo de Knnov
- [2]: GRI-Mech 3.0
- [3]: Mecanismo DS, desarrollado por Dautov y Starik

El mecanismo que más se aproxima al resultado experimental es el mecanismo DS, mientras que los otros dos subestiman los valores del $EINO_x$. Para llevar a cabo este estudio empleando el software *Cantera* solo se disponía del mecanismo implementado GRI-Mech 3.0, por lo que se ha de tener en cuenta que los valores que se obtengan, para estos tipos de compuestos, se encontrarán por debajo de los resultados esperados representados en las Tabla 10 y Tabla 11.

Teniendo en cuenta los procesos de formación explicados en el apartado de emisiones, uno de los principales factores que intervienen en la producción de los NO_x es la temperatura, aunque también tienen relevancia otros factores como el tiempo de residencia o la concentración de oxígeno, también de estos parámetros depende qué mecanismo es más relevante.

En el informe del CIAM, tratan un experimento realizado a parte con el fin de comprobar que mecanismo de formación se encarga de producir los NO_x en mayor medida y por qué aparecen discrepancias entre ellos. Lo que cabe destacar de este estudio en relación con el análisis que se lleva a cabo en este trabajo radica en que para el reactor 2, el cual representa la zona aguas abajo del frente de llama, se observa que el principal

mecanismo de formación de NO es el Zel'dovich debido a la elevada temperatura. Puede observarse, que en nuestro caso en el reactor 2 se encuentra la mayor concentración de NO como se muestra en la siguiente grafica de barras (Figura 21) donde se representa la concentración final del óxido de nitrógeno en cada uno de los reactores, debido a las condiciones presentes en este reactor encaja la hipótesis de que el mecanismo aquí presente en mayor medida sea igualmente el Zel'dovich.

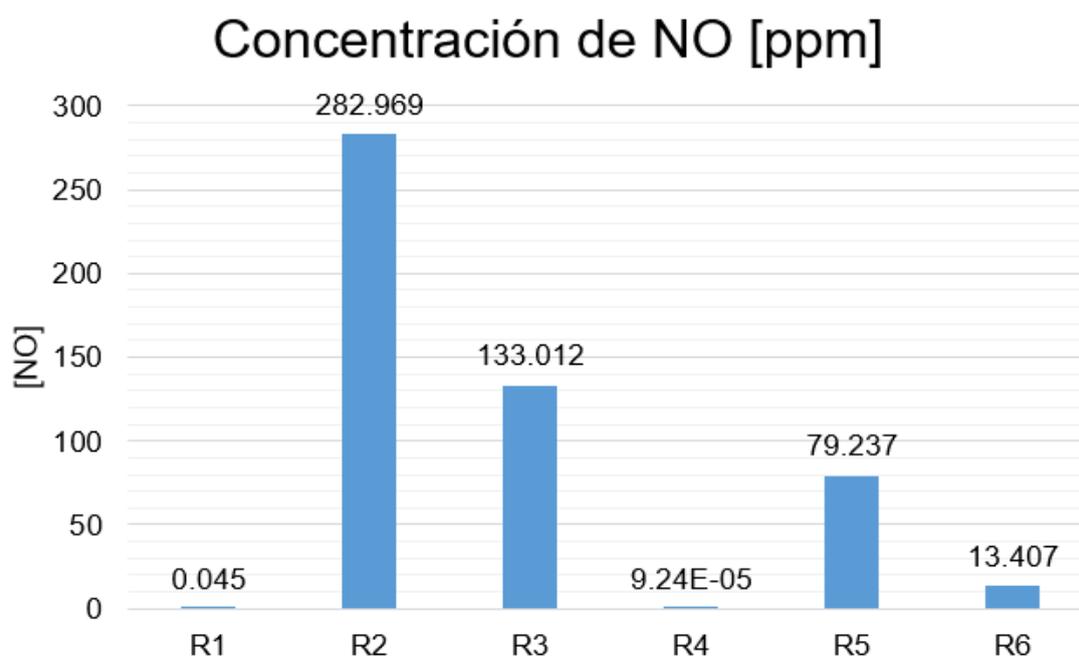


Figura 21. Concentración másica de NO en ppm para cada reactor.

Una vez comparados los resultados y explicado el porqué de ciertas discrepancias que no afectan a la validez del método, se desarrollará una descripción de lo que ocurre con el índice de emisiones de los NO_x en cada uno de los reactores.

El primer reactor por ser muy rico tiene un índice de emisión de NO prácticamente nulo ya que casi todo el oxígeno disponible ha reaccionado con el carbono dando lugar al óxido de carbono.

A continuación, aparecen las zonas con temperaturas más elevadas, correspondientes con los reactores 2 y 3, próximos a la estequiometría. En ellos se encuentran grandes índices de emisión, siendo mayor en el reactor 2 ya que tiene una mezcla mayor riqueza y por consecuente su temperatura también es superior.

Mientras que en los reactores 5 y 6, pese a tener unas temperaturas más bajas, presentan una alta adición de aire además de poseer ambos unas mezclas relativamente pobres junto con un tiempo de residencia elevados de 3.6 y 1 ms, respectivamente (de ahí que aparezca un pico más elevado en el reactor 5) por lo que

vuelve a surgir un aumento en el índice de emisiones de NO_x.

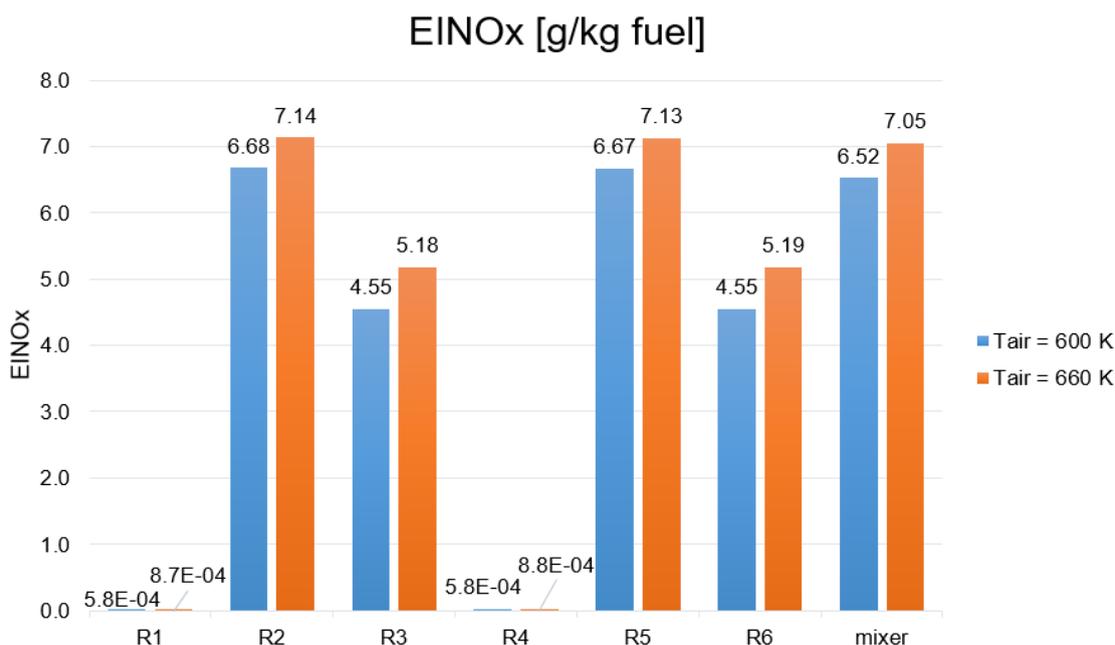


Figura 22. Índice de emisiones del NO_x [g/kg fuel] en cada reactor para el estudio con T_{air}= 600 K y T_{air}= 660 K.

En cuanto al estudio realizado para un aumento de la temperatura del aire de la entrada, los índices de emisión, al igual que en el resto de contaminantes estudiados, mantienen sus valores más elevados y los menos en las mismas zonas del motor. Sin embargo, en este caso, el aumento de dicha temperatura provoca un aumento en la temperatura inicial de la mezcla, simulando así un aumento en la potencia por lo que se obtiene un aumento general también en las emisiones de los NO_x.

5.5. CONSIDERACIONES GLOBALES

A lo largo de la teoría, se explica continuamente que un aumento de potencia conlleva a la reducción del CO y al aumento de los NO_x. Observando los resultados del informe del CIAM, el valor final de los EINO_x sí que es como se supone, mayor para el caso de la T_{air} = 660 K. Sin embargo, en el caso del CO dicho valor del índice de emisión es más elevado cuando según la teoría debería ser menor. En este caso, los cálculos realizados mediante la red de reactores sí que proporciona un valor de EICO menor para el estudio realizado con la temperatura del aire igual a 660 K.

El mecanismo GRI-Mech 3.0 está optimizado para el cálculo de metano y gas natural, y el informe del CIAM proporciona unos resultados obtenidos mediante el mecanismo DS, el cual es más preciso para el cálculo de los NO_x. Es posible que la diferencia entre unos resultados y otros radique en el tipo de mecanismo empleado de forma que los datos obtenidos por la red de reactores con el mecanismo GRI-Mech 3.0 sean más precisos

en la estimación del EICO que del EINO_x, mientras que en el caso del CIAM sea al contrario por emplear el mecanismo DS. En cualquier caso, es importante tener en cuenta esta consideración a la hora de establecer los resultados y el grado de fiabilidad de los métodos y mecanismos utilizados.

Por otro lado, puesto que un aumento en la potencia en las turbinas de gas conlleva a generar mayores emisiones de estos contaminantes (hecho que ha ocurrido empleando cualquier tipo de mecanismo), se buscan continuamente mejoras en los motores con el fin de poder mantener regímenes de potencia elevados empleando la menor cantidad de combustible y además reduciendo al máximo las emisiones.

Es de vital importancia, hoy en día, poder reducir las emisiones de contaminantes sin tener que reducir las capacidades del motor y poder aprovechar al máximo su rendimiento.

6. CONCLUSIONES

A lo largo del presente trabajo se ha explicado la necesidad de buscar nuevas formas para la estimación de contaminantes en las cámaras de combustión y se ha descrito en profundidad el diseño de una red de reactores que permite obtener de forma sencilla un orden de magnitud real para los índices de emisión de los diferentes contaminantes a tener en cuenta.

Se trata de una red bastante simple que considera un total de 6 zonas del motor con características diferenciadas que son la zona próxima al inyector, las zonas aguas arriba y aguas abajo del frente de llama, las zonas próximas a la pared y una zona de mezcla donde confluyen la corriente principal con las de refrigeración.

En primer lugar, a grandes rasgos la principal conclusión que se obtiene tras realizar estos estudios es que el aumento de la temperatura del aire a la entrada de la red se traduce en un aumento general de las emisiones de los NO_x, mientras que, por el contrario, en el caso del CO aparece una reducción en su índice de emisión.

Por otro lado, observando lo que ocurre en cada reactor de forma individual en cuanto a la formación de los contaminantes puede extraerse la gran influencia que tiene sobre ellos el dosado de la mezcla y las temperaturas tan elevadas a las que se encuentran.

Con estos estudios se pretende controlar las zonas en las que aparecen mayores emisiones para que así los fabricantes puedan investigar en mejoras que consigan reducirlas, ya sea empleando otros materiales, otros sistemas de refrigeración o de pulverización de los combustibles. De esta forma se reducirían las temperaturas y se puede llegar a extraer el máximo rendimiento de los combustibles de forma que se pueda reducir la cantidad del mismo empleado para alcanzar los niveles de potencia requeridos, es decir, poder aprovechar al máximo las prestaciones de los motores, pero reduciendo las emisiones y, consecuentemente, los gastos en combustible.

Con la red diseñada se han conseguido resultados esperados en base a la teoría y el informe comparado por lo que puede concluirse que es un método válido y que puede ser perfectamente utilizado en un futuro para realizar estimaciones sobre las emisiones producidas por otra cámara de combustión cuyos reactores asociados puedan presentar diferentes dosados, volúmenes o tiempos de residencia, así como empleando otro tipo de combustible o realizando las estimaciones utilizando otros mecanismos. Todo ello es posible llevarlo a cabo con simples cambios en las primeras líneas del código, y se espera que los resultados sean igualmente fiables.

7. PRESUPUESTO

A lo largo de esta sección se llevará a cabo un estudio presupuestario del desarrollo del proyecto ya que, en un futuro, una vez comprobada su viabilidad, será posible emplear esta metodología para el cálculo de emisiones en otra cámara de combustión y con otras condiciones. Esto puede ser útil para fabricantes de motores a la hora de saber en qué zonas se producen mayores contaminantes y qué mejoras incluir para reducirlas.

7.1. METODOLOGÍA PRESUPUESTARIA

El presupuesto total de un proyecto se divide en diferentes presupuestos parciales que cubren los gastos correspondientes a cada una de las partes concretas de dicho proyecto.

A continuación, se desglosan todas las partes que han intervenido en el desarrollo del trabajo para así tener una idea general de qué partes son las que conllevan mayores inversiones y plantear un presupuesto sencillo que permita hacerse una idea del coste total del proyecto. Los principales costes se dividen en:

- Licencias de software y hardware
- Coste relacionado con el personal

7.2. LICENCIAS DE SOFTWARE Y HARDWARE

La totalidad de este proyecto se realiza empleando un sistema informático, por lo que es fundamental establecer el coste que tiene tanto el hardware como los softwares necesarios para llevar a cabo los estudios.

Por un lado, las licencias de los softwares, en este caso el software *Cantera* utilizado para realizar todos los cálculos químicos es un software libre por lo que no tiene costes, así como su interfaz de *Python*. De todas formas, si para estudios posteriores se requiere el empleo de otros mecanismos para poder tener en cuenta otros combustibles, por ejemplo, es posible que sean de pago por lo que habría que tener en cuenta un porcentaje de los costes extra para posibles alteraciones en el presupuesto inicial estimado.

Sin embargo, se requiere del paquete office para extraer los resultados y dibujar las gráficas con Excel, además del Word para escribir el informe final. Puesto que para este fin el software se ha utilizado solo durante un periodo de 3 meses se aplica el coste de amortización con el coeficiente proporcionado por la agencia tributaria bajo el nombre de "Sistemas y programas informáticos", [10]. El coste total del software se encuentra

desglosado en la Tabla 12.

Tabla 12. Coste de las licencias de software.

Cantidad	Elemento	Precio [€]	Tiempo	Coef. Amort.	Total [€]
1	Paquete Office	149.00	4 meses	0.33	16.39

Por otro lado, también hay que tener en cuenta el coste que requieren los elementos físicos del sistema informático. Estos costes no supondrán un esfuerzo económico demasiado alto aun así se tendrán en cuenta a la hora de realizar esta estimación. Puesto que dicho ordenador solo se empleará para este proyecto una cantidad determinada de tiempo no se tiene en cuenta el coste total del hardware, sino que se consideran los costes de amortización del mismo propuestos por la Agencia Tributaria [10], al igual que en el caso anterior, pero esta vez en el apartado de “Equipos para procesos de información”. Dichos gastos se incluyen en la Tabla 13.

Tabla 13. Coste del hardware.

Cantidad	Elemento	Precio [€]	Tiempo	Coef. Amort.	Total [€]
1	ASUS Zenbook 14	799.99	4 meses	0.25	66.66

7.3. COSTE DE PERSONAL

El coste de personal es aquel referido a las retribuciones de los trabajadores encargadas de llevar a cabo el proyecto en cuestión. En primer lugar, hay que tener en cuenta el tiempo empleado por cada una de las personas implicadas y el coste por hora de ese tiempo trabajado.

El desarrollo del proyecto se ha extendido a lo largo de aproximadamente 4 meses en los que la autora del mismo ha dedicado unas 6 horas al día. Además de la autora, también hay que tener en cuenta las horas dedicadas por el profesor encargado de tutorizar el Trabajo Fin de Máster. En la Tabla 15 se recogen todas las actividades realizadas por la alumna a lo largo de estos 4 meses de trabajo, pero además se consideran las horas relativas a las tutorías en las que ha intervenido el profesor, las revisiones del código y la revisión final del informe. Se considera la realización de reuniones prácticamente cada semana desde el inicio del proyecto de una media de una hora y media cada una de ellas, por lo que finalmente se estima un total de unas 18 horas empleadas por el tutor en reuniones junto con otras 8 con el fin de corregir tanto el código como el informe final antes de la entrega del trabajo.

Por un lado, la alumna se considera trabajando bajo un contrato de prácticas con un salario mensual de unos 800 €/mes y considerando una jornada de 40 horas semanales.

$$800\text{€}/160 \text{ horas} = 13.3 \text{ €/hora}$$

Por otro lado, se desglosa el sueldo de un ingeniero titulado, correspondiente con el sueldo del tutor del proyecto.

Tabla 14. Salario bruto de un ingeniero titulado

	Coste [€]
Salario anual (12 pagas)	48000
Pagas extra (x2)	8000
Seguridad Social (23.6 %)	11328
Coste anual para la empresa	67328

A continuación, es necesario saber el coste por hora

$$67328\text{€}/12 \text{ meses}/160 \text{ horas} = 35.06 \text{ €/hora}$$

Tabla 15. Desglose de las actividades, tiempo y coste realizadas por la alumna.

Etapa	Tiempo [h]	Coste [€/hora]	Total [€]
Investigación	120	13.3	1596
Programación del código	250	13.3	3325
Obtención y comparación de resultados	120	13.3	1596
Redacción del informe	38	13.3	505.4
TOTAL	528		7022.4

Tabla 16. Costes finales de personal para el proyecto.

Categoría	Tiempo [h]	Coste [€/hora]	Total [€]
Alumna	528	13.3	7022.4
Profesor	26	35.06	911.56
	TOTAL		7933.96

7.4. COSTE TOTAL Y PRECIO DE MERCADO

El coste total es la suma de todos los gastos especificados en los apartados anteriores junto con un porcentaje para posibles gastos a mayores además de incluir el 21% de IVA.

Tabla 17. Estimación de los costes totales del proyecto.

Concepto	Total [€]
Software	16.39
Hardware	66.66
Personal	7933.96
TOTAL	8017.01
Beneficio industrial (10%)	801.70
TOTAL con margen	8818.71
IVA (21%)	1851.93
COSTE FINAL	10670.64

REFERENCIAS

- [1] A. B. Lebedev, A. N. Secundov, A. M. Starik, N. S. Titova, and A. M. Schepin, "Modeling study of gas-turbine combustor emission," *Proc. Combust. Inst.*, vol. 32 II, no. 2, pp. 2941–2947, 2009, doi: 10.1016/j.proci.2008.05.015.
- [2] "Cantera Documentation | Cantera." <https://www.cantera.org/documentation/index.html> (accessed Aug. 31, 2021).
- [3] "GRI-Mech 3.0." <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html> (accessed Aug. 31, 2021).
- [4] D. Lefebvre H., Arthur; Ballal R., *Gas Turbine Combustion*. 2014.
- [5] "Aviation | Clean Sky." <https://www.cleansky.eu/aviation-0> (accessed Aug. 31, 2021).
- [6] "CO2 emissions from cars: facts and figures (infographics) | News | European Parliament." <https://www.europarl.europa.eu/news/en/headlines/society/20190313STO31218/co2-emissions-from-cars-facts-and-figures-infographics> (accessed Aug. 31, 2021).
- [7] Is. Prieto, "Reducción de emisiones de óxidos de nitrógeno," no. 1, pp. 6–8, 2003, [Online]. Available: http://ocw.uniovi.es/pluginfile.php/1015/mod_resource/content/1/1C_C12757_0910/04_GT17_Reduccin_de_NOX_en_humos.pdf.
- [8] H. Watanabe, J. ichiro Yamamoto, and K. Okazaki, "NOx formation and reduction mechanisms in staged O2/CO2 combustion," *Combust. Flame*, vol. 158, no. 7, pp. 1255–1263, 2011, doi: 10.1016/j.combustflame.2010.11.006.
- [9] "CVODES | Computing." <https://computing.llnl.gov/projects/sundials/cvodes> (accessed Aug. 31, 2021).
- [10] "Tabla de coeficientes de amortización lineal. - Agencia Tributaria." https://www.agenciatributaria.es/AEAT.internet/Inicio/_Segmentos_/Empresas_y_profesionales/Empresas/Impuesto_sobre_Sociedades/Periodos_impositivos_a_partir_de_1_1_2015/Base_imponible/Amortizacion/Tabla_de_coeficientes_de_amortizacion_lineal_.shtml (accessed Aug. 31, 2021).