



## SIMULAÇÃO DA EMISSÃO DE NO<sub>x</sub> BASEADA EM CINÉTICA QUÍMICA DETALHADA PARA TURBINAS A GÁS COM COMBUSTÃO ESTAGIADA

### Guilherme Motta Assis Lacerda

Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Divisão de Engenharia Aeronáutica  
Pça. Mal. Eduardo Gomes, 50, Vila das Acácias, São José dos Campos – SP  
motta@h8.ita.br

### Pedro Teixeira Lacava

Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Divisão de Engenharia Aeronáutica  
Pça. Mal. Eduardo Gomes, 50, Vila das Acácias, São José dos Campos – SP  
lacava@aer.ita.br

**Resumo.** Desde a década de sessenta, as emissões provenientes de turbinas a gás tem sido um assunto relevante para pesquisadores e engenheiros em razão de seus compostos poluentes, ou seja, hidrocarbonetos não queimados, óxidos de nitrogênio e carbono e fuligem, que diretamente ou indiretamente prejudicam o meio ambiente e a saúde humana. As exigências para preservação da camada de ozônio impuseram novas limitações para redução das emissões de NO<sub>x</sub> para as tecnologias convencionais de turbinas a gás usadas na indústria aeronáutica. Essas exigências motivam o desenvolvimento de novas tecnologias para o projeto de futuras câmaras de combustão para motores de baixa emissão. O processo de combustão estagiada é uma das tecnologias empregadas para controlar a formação de NO<sub>x</sub>. No presente trabalho esse processo é estudado empregando a química detalhada para prever a formação de poluentes e a câmara de combustão é aproximada como formada por uma série de reatores de mistura homogênea.

**Palavras-chave:** combustão, emissão de poluentes, turbinas a gás, NO<sub>x</sub>.

## 1. INTRODUÇÃO

Além de questões como o consumo de combustível, eficiência de operação e segurança, o estudo do processo de combustão em turbinas a gás enfocando o controle da emissão de poluentes, tornou-se um assunto extremamente importante nos dias atuais em virtude dos impactos da poluição atmosférica e, como consequência, das exigências cada vez mais estreitas dos órgãos controladores. Desde a década de sessenta pesquisadores e engenheiros buscam desenvolver novas tecnologias capazes de atender à essas exigências; no entanto, procurando manter as necessidades de desempenho dos motores.

Independente do tipo de câmara de combustão, três regiões são destacadas (Lefebvre, 1983). Na região primária desenvolve-se a maior parte das reações de combustão, sua função é manter a chama estável e prover tempo, temperatura e turbulência suficientes para atingir a completa oxidação do combustível. A zona secundária, ou intermediária, para os motores estacionários ou aeronáuticos operando em baixas altitudes serve como uma região onde as perdas por dissociação do fluxo gasoso podem ser recuperadas. Em altitudes elevadas, ou seja, baixa pressão, a zona intermediária serve principalmente como uma extensão da zona primária, uma vez que a taxa de reação diminui; conseqüentemente a combustão não se completará ao final desta região. A terceira região, ou de diluição, tem como função admitir o ar remanescente proveniente do compressor, diluir este com os gases quentes provenientes da zona intermediária, atender os requisitos de

resfriamento da parede e prover uma corrente de saída à baixa temperatura e com uma distribuição aceitável para a turbina.

Como a maior parte das reações de combustão ocorrem na região primária da câmara, é nesta região que se desenvolve os mecanismos reacionais de formação de poluentes e, como consequência, as medidas para combater-los através de alterações no processo de combustão também devem ser feitas nesta região. Desde a década de 70, passou-se a ter uma grande preocupação com as emissões de NO<sub>x</sub> (termo utilizado para designar a quantidade total de óxido de nitrogênio (NO) e dióxido de nitrogênio (NO<sub>2</sub>)) pois, além de, como o SO<sub>2</sub>, provocar a chuva ácida, é um componente importante das reações fotoquímicas que levam à formação de ozônio (O<sub>3</sub>). Desde então, há uma incessante busca de estratégias que visam conciliar as emissões de NO<sub>x</sub> com as dos compostos de oxidação parcial. As condições de queima afetam diretamente o mecanismo reacional de formação de cada poluente. No entanto, cada mecanismo responde de uma maneira particular, o que impede que uma simples modificações no processo consiga conciliar a redução da emissão de diversos poluentes. Um exemplo disso é o comportamento divergente da emissão de NO<sub>x</sub> em relação às emissões de CO e UHC, em função da razão de equivalência. A Fig. (1) apresenta o comportamento qualitativo típico das emissões de NO<sub>x</sub>, CO e UHC em turbinas a gás (Lefebvre, 1983).

O NO<sub>x</sub> emitido durante a combustão depende da composição do combustível, do modo de operação e do projeto dos queimadores e da câmara de combustão. Cada um desses parâmetros são significativos em relação ao nível final de NO<sub>x</sub> emitido. A formação deste poluente é atribuída a duas fontes distintas, O NO<sub>x</sub> atmosférico e o NO<sub>x</sub> do combustível (Wood, 1994). O NO<sub>x</sub> atmosférico é formado a partir da oxidação do N<sub>2</sub> do ar atmosférico, seguindo principalmente dois mecanismos de formação: o NO<sub>x</sub> térmico, sendo seu esquema reacional proposto inicialmente por Zeldovich e colaboradores (1947) e o "prompt" NO<sub>x</sub>, formado na região de frente de chama, cujo esquema reacional foi proposto por Fenimore (1971). O NO<sub>x</sub> do combustível é formado a partir da quebra das ligações do nitrogênio presente no combustível e reação com oxigênio. Em geral, o maior meio de formação do NO<sub>x</sub> é através do mecanismo térmico, chegando a representar até 70% do NO<sub>x</sub> total, principalmente quando o combustível está livre de nitrogênio. A taxa de formação de NO é dada pela Eq. (1), onde nota-se a sua dependência com a temperatura, com o tempo e, de forma menos intensa, com as concentrações de O<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>.

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = 1,3 \cdot 10^5 \cdot \exp(-67650/T) \cdot [\text{O}_2]^{1/2} \cdot [\text{N}_2] \quad (1)$$

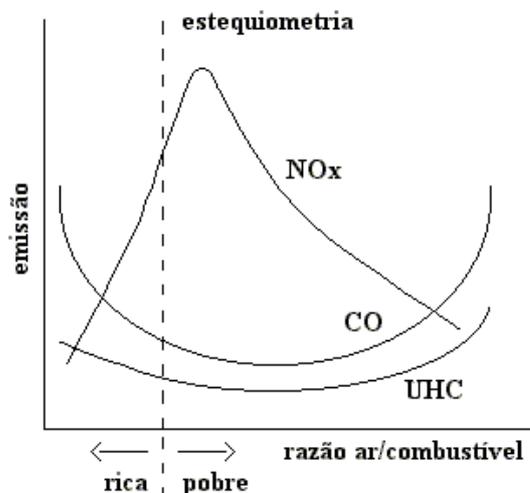


Figura 1. Comportamento qualitativo entre as emissões de NO<sub>x</sub>, CO e UHC.

Desta forma, fica evidente que a melhor maneira de se controlar a formação do NO térmico é evitar picos de temperatura na região primária da câmara. A importância da temperatura elevada

para formação do NO, acima de 1500°C, decorre do fato da reação que inicia o mecanismo de Zeldovich, possuir elevada energia de ativação, conforme Miller e Bowman (1989). Uma maneira de se controlar a presença de picos de temperatura na câmara é promover uma combustão estagiada, ou seja, injeção gradativa de um dos reagentes, diminuindo o tempo que os gases permanecem em temperatura elevada. Se o ar for adicionado gradativamente, inicialmente a combustão será rica em combustível, com temperatura mais baixa; portanto, com baixa formação de NO, mas formando produtos de oxidação parcial como CO e UHC. À medida que o ar vai atingindo a região de queima, esses compostos de oxidação parcial vão reagindo mas sem que a temperatura atinja valores suficientes para formação de NO em grande escala. A Fig. (2) representa esse processo e as regiões da câmara de combustão.



Figura 2. Esquema de uma câmara de combustão evidenciando a zona primária com múltiplos estágios.

O presente trabalho apresenta uma avaliação teórica empregando a química detalhada para prever a formação de poluentes e a câmara de combustão é aproximada como formada por uma série de reatores de mistura homogênea. Nesse modelo, considera-se que o nível de turbulência da câmara elevado tal que os reagentes são perfeitamente misturados e o tempo de desenvolvimento dos processos químicos é bem maior que o tempo de desenvolvimento dos processos mecânicos, ou seja, os processos químicos é que controlam o desenvolvimento da combustão.

## 2. MODELO DO REATOR DE MISTURA HOMOGÊNEA

Para estudos de emissão de poluentes, em razão da complexidade dos mecanismos reacionais envolvidos, faz-se necessário utilizar um modelo baseado cinética química. O presente estudo foi realizado utilizando o programa computacional CHEMKIN II (Kee et al., 1992), associado a subrotina PSR (Glarborg et al., 1992) que simula reatores de mistura homogênea (“Perfectly Stirred Reactor” na língua inglesa). O mecanismo utilizado para combustão do hidrocarboneto foi o de Glarborg e Hading (1991).

A descrição do processo que ocorre num reator de mistura homogênea (PSR) é obtida relacionando-se a conservação da massa e energia com a geração líquida das espécies químicas no volume do reator. A Fig. (3) representa esquematicamente em reator de mistura homogênea. As equações de conservação das espécies e da energia são dadas, respectivamente, por:

$$\dot{m}(Y_k - Y_k^*) - \dot{\omega}_k W_k V = 0 \quad (2)$$

$$\dot{m} \sum_{k=1}^K (Y_k h_k - Y_k^* h_k^*) + Q = 0 \quad (3)$$

onde:  $Y_k$  é a fração de massa da  $k$ -ésima espécie (num total de  $K$  espécies),  $W_k$  é o peso molecular da  $k$ -ésima espécie,  $V$  é o volume do reator,  $\dot{\omega}_k$  é a taxa molar de produção através de reação química da  $k$ -ésima espécie por unidade de volume,  $h_k$  é a entalpia específica da  $k$ -ésima espécie,  $Q$

é o calor perdido do reator e o sobrescrito \* indica as condições na entrada. O tempo de residência nominal é relacionado com o volume do reator V e o fluxo de massa por:

$$\tau = \frac{\rho V}{\dot{m}} \quad (4)$$

onde a densidade específica  $\rho$  é calculada da equação de estado dos gases ideais. O tempo de residência normalmente é usado como um parâmetro característico do reator no lugar do fluxo de massa. A taxa líquida de produção química  $\dot{\omega}_k$  de cada espécie resulta de uma competição entre todas as reações químicas que envolvem tais espécies. As Eq.'s (2) e (3) formam um conjunto de K+1 equações algébricas não-lineares cuja solução traz a temperatura e as frações em massa.

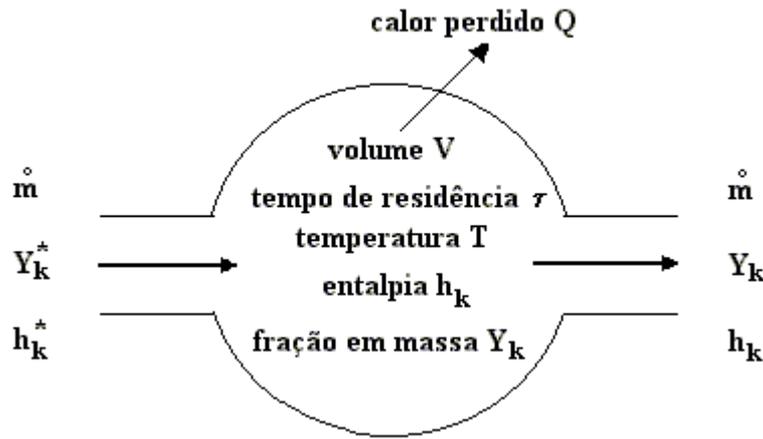


Figura 3. Representação esquemática de um reator de mistura homogênea.

Mesmo que se procure soluções em regime estacionário das equações descritas, o algoritmo computacional sempre requer uma solução parcial para o problema transiente relacionado. A equação análoga dependente do tempo para a conservação da massa de cada espécie é:

$$\rho V \frac{dY_k}{dt} = -\dot{m}(Y_k - Y_k^*) + \dot{\omega}_k W_k V \quad (5)$$

Através de um balanço de energia procede-se chega-se à forma da equação transiente da energia, para qual existe solução:

$$c_p \frac{dT}{dt} = \frac{1}{\tau} \sum_{k=1}^K Y_k^* (h_k^* - h_k) - \sum_{k=1}^K \frac{h_k \dot{\omega}_k W_k}{\rho} - \frac{Q}{\rho V} \quad (6)$$

onde  $c_p$  é o calor específico médio. O problema transiente é um problema de valor inicial para uma equação diferencial ordinária não-linear. As soluções desta e das equações em regime permanente são obtidas através de método numérico (no caso do PSR foi empregado o algoritmo de Newton).

### 3. RESULTADOS

#### 3.1. Influência da Razão de Equivalência e Tempo de Residência

Nas simulações considerou-se o processo como adiabático, apesar do modelo contemplar a troca de calor através da fronteira do volume de controle, pressão na câmara igual a 35atm,

temperatura do ar na entrada da câmara igual 500K e o combustível como sendo  $C_{12}H_{26}$ . Os resultados das frações molares dos compostos de interesse são apresentadas em função do tempo de residência do(s) reator(s). Inicialmente a câmara de combustão foi simulada como sendo apenas um reator e variou-se o tempo de residência e a razão de equivalência ( $F_i$ ) dos reagentes. O intuito dessas simulações foi verificar a influência dos parâmetros variados nas formações de NO e CO. As Fig.s (4) e (5) mostram as frações molares de CO e NO, respectivamente, em função do tempo de residência para diversas razões de equivalência.

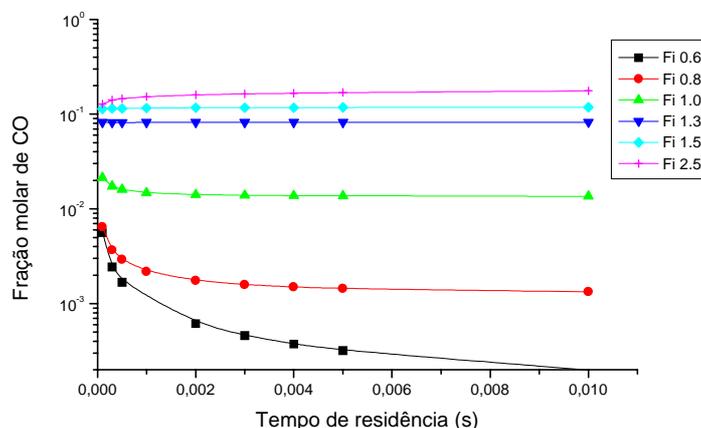


Figura 4. Emissão de CO (fração molar) em função do tempo de residência para diversas razões de equivalência.

Conforme mostram as curvas da Fig. (4), para valores de  $F_i$  entre 0,6 e 1,0 rapidamente o CO atinge sua concentração de pico, em função das reações iniciais de quebra do combustível em CO,  $H_2$  e hidrocarbonetos mais leves ( $CH_4$ ,  $C_3H_6$ , etc.). Na sequência parte do CO é convertido a  $CO_2$ , até atingir sua concentração de equilíbrio. Quanto mais pobre for a combustão ( $F_i = 0,6$ ) maior será o tempo necessário para que a concentração de equilíbrio seja atingida, pois as velocidades das reações de conversão do CO em  $CO_2$  diminuem com a redução da temperatura, em virtude do excesso de oxidante. Para valores de  $F_i$  acima de 1,0, ou seja, combustão rica, a concentração de CO atinge valores extremamente elevados em função de escassez de oxidante. Por outro lado, as curvas da Fig. (5) mostram que para as condições de combustão extremamente ricas ocorrem as menores frações molares de NO. Para valores de  $F_i$  abaixo do estequiométrico, combustão pobre, o mecanismo predominante de formação do NO é o de Zeldovich (térmico), altamente dependente da temperatura, em razão da elevada energia de ativação requerida pela sua reação inicial. Por outro lado, para a combustão rica, o mecanismo predominante de formação é o “prompt”, muito menos dependente da temperatura do que o mecanismo térmico. No entanto, apesar da menor dependência do mecanismo “prompt” com a temperatura, para condições excessivamente ricas,  $F_i > 1,5$ , a limitação da formação de NO é devido à baixa concentração de oxigênio.

Para as condições de combustão pobre e próxima à estequiometria, quanto maior for o tempo de residência, maior será o NO formado. Tal fato ocorre em razão das reações químicas do mecanismo de Zeldovich serem lentas quando comparadas com as reações de combustão. Por outro lado, na situação de combustão rica, para  $\phi > 1,5$  o tempo de residência é favorável à redução do NO. Em chamadas ricas, o NO pode ser convertido em  $N_2$  através da reação intermediária  $CH + NO \rightarrow HCN + O$ , que converte o NO em HCN, sendo este último finalmente reduzido a  $N_2$ . Spliethoff et al. (1996) também relataram que o aumento de temperatura em regiões ricas, acima de 1400K, acelera a taxa de decomposição dos compostos nitrogenados, diminuindo a emissão de  $NO_x$ . Os resultados apresentados nessa seção sobre a emissão de CO e  $NO_x$  mostram que o tempo de residência é um parâmetro fundamental no projeto de câmaras de combustão de motores a jato com baixa emissão de poluentes.

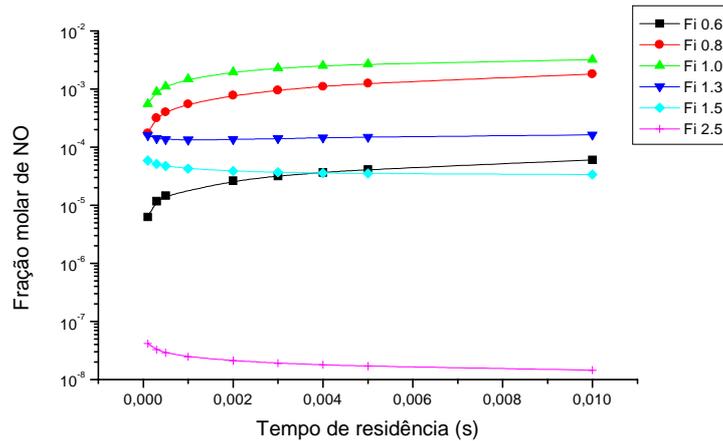


Figura 5. Emissão de NO (fração molar) em função do tempo de residência para diversas razões de equivalência.

### 3.2. Combustão Estagiada

Conforme comentado anteriormente, a zona primária da câmara de combustão é responsável pela maior parte das reações químicas, conseqüentemente também corresponde a região de maior formação de poluentes. Assim, para o presente trabalho o modelo de reator de mistura homogênea contemplou apenas a zona primária da câmara. Além disso, normalmente a razão de equivalência global da zona primária das câmaras de combustão de turbinas a gás tem valor igual ao estequiométrico ( $F_i = 1$ ), para que taxa das reações seja alta e que elas se finalizem ainda nessa região. Desta forma, os resultados apresentados nesta seção são para situação onde o ar é gradativamente adicionado à zona primária da câmara, de tal forma que o total de ar adicionado ao final dessa região corresponda ao valor estequiométrico.

Considerando os resultados obtidos na seção anterior, constatou-se que a menores emissões de NO ocorrem para combustão onde a mistura empregada é rica, ou seja, há excesso de combustível. Desta forma, deu-se ênfase para combustão rica ao longo do estagiamento, ou seja, adição estagiada de ar. A simulação foi feita para a zona primária de uma câmara com cinco estágios de adição de ar; tal número foi escolhido por se tratar de um valor adequado para avaliar os efeitos da temperatura e do tempo de residência à medida que o oxidante é injetado. A estratégia utilizada para a análise foi a seguinte: no primeiro estágio variou-se razão de equivalência, enquanto que para os demais estágios a vazão mássica de oxidante foi igualmente distribuída até que o total de ar adicionado nos cinco estágios fosse o estequiométrico. Novamente, a pressão na câmara e a temperatura do ar adicionado foram admitidos como sendo 35atm e 500K, respectivamente, valores compatíveis com as das câmaras de combustão dos motores reais.

Além dos dados iniciais de temperatura, pressão e frações molares dos reagentes, o modelo ainda necessita de mais dois parâmetros de entrada, que podem ser a vazão mássica de reagentes e o tempo de residência ( $\tau$ ) ou a vazão mássica de reagentes e o volume do reator. Se vazão e tempo são os parâmetros escolhidos o próprio programa irá calcular o volume do reator, caso seja vazão e volume o cálculo será do tempo. No presente trabalho pretendeu-se que os resultados alcançados pudessem ser generalizados para motores de qualquer porte; desta forma, os resultados foram apresentados em função do tempo de residência, pois de um motor para outro a vazão de reagentes e o volume da câmara variam com a potência, mas a combinação desses dois parâmetros, mais temperatura e pressão, acabam mantendo o tempo de residência na mesma ordem. Mas como é necessário a vazão mássica de reagentes como parâmetro de entrada no programa, utilizou-se os dados de vazão do motor PRATT & WHITNEY – PT6A-67; no entanto, como já comentado, os resultados são apresentados em função do tempo de residência e podem ser generalizados para outros motores.

A Fig. (6) apresenta o perfil da temperatura na zona primária da câmara ao longo dos estágios de adição do ar, em função da razão de equivalência no primeiro estágio. Quando  $Fi = 1$  significa que todo ar é adicionado no primeiro estágio, ou seja, é a situação de combustão não estagiada. Nota-se que, quanto menor for o valor de  $Fi$  para o primeiro estágio, os gases estarão expostos a um perfil de temperatura mais baixo ao longo dessa região da câmara. Esse resultado terá um papel importante no total de NO formado.

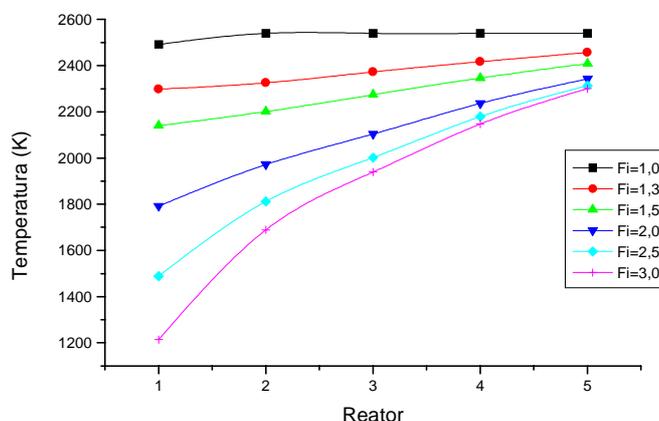


Figura 6. Perfil de temperatura ao longo dos reatores para diversos valores de razão de equivalência no primeiro reator.

As Fig.s (7) e (8) apresentam as frações molares de CO e NO, respectivamente, em função do tempo ao longo da zona primária, mantendo o tempo de residência ( $\tau$ ) em cada reator igual 0,001s, para diferentes valores de razão de equivalência no primeiro reator. As curvas da Fig. (7) mostram que quando mais rica for a situação de combustão nos primeiros estágios maior será a concentração de CO nestes estágios, mas a medida que o ar vai sendo adicionado nos estágios seguintes, o CO vai sofrendo o processo de oxidação de tal forma que até  $Fi = 2,0$  não há alteração da fração molar de CO na saída da zona primária, ou seja, até esse valor de  $Fi$  o estagiamento não alterou a emissão de CO em comparação a situação de combustão não estagiada. Para a emissão de NO, Fig. (8), nota-se que ela segue um comportamento semelhante ao da temperatura apresentado na Figura (6). Assim, a medida que o ar vai sendo adicionado a câmara a temperatura aumenta e, como consequência, a formação de NO também. No entanto, observa-se que quanto menor for a razão de equivalência no primeiro reator, menor será a emissão de NO na saída da zona primária.

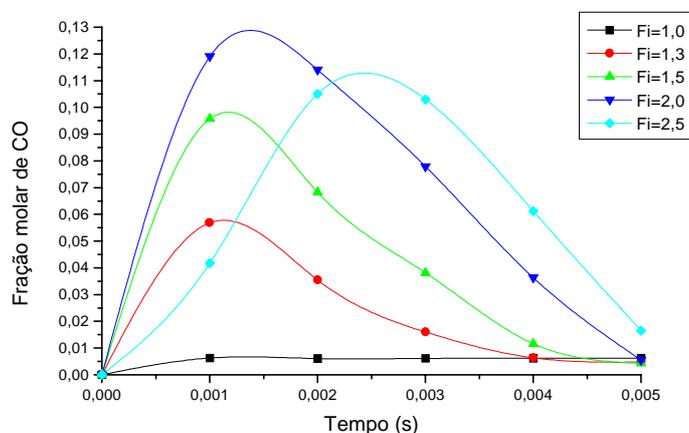


Figura 7. Emissão de CO em função do tempo, para o tempo de residência em cada reator ( $\tau$ ) igual 0,001s e diversas razões de equivalência no primeiro reator.

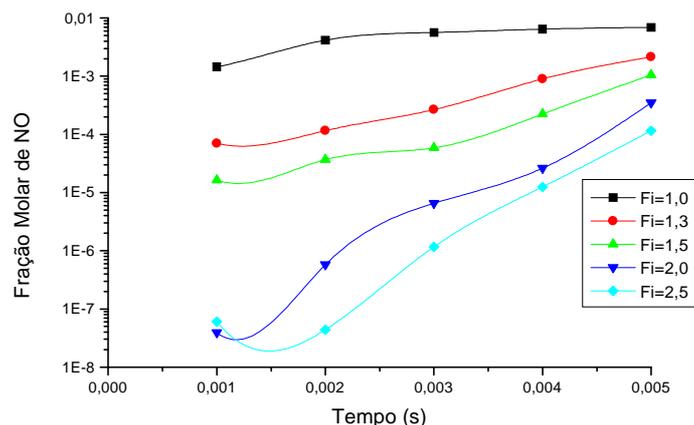


Figura 8. Emissão de NO em função do tempo, para o tempo de residência em cada reator ( $\tau$ ) igual 0,001s e diversas razões de equivalência no primeiro reator.

As Fig.s (7) e (8) apresentam os resultados apenas para o tempo de residência em cada reator ( $\tau$ ) igual a 0,001s. Outras simulações foram feitas para outros valores de  $\tau$ , os resultados apresentam comportamentos qualitativos semelhantes aos das Fig.s (7) e (8). No entanto, como observado anteriormente, o tempo de residência é um fator importante tanto para as emissões de espécies de oxidação parcial, como o CO, como para o NO. Assim, as Fig.s (9) e (10) apresentam as emissões de CO e NO, respectivamente, em função do tempo de residência total da zona primária da câmara (soma do tempo de residência dos cinco reatores), para diversos valores de razão de equivalência no primeiro reator.

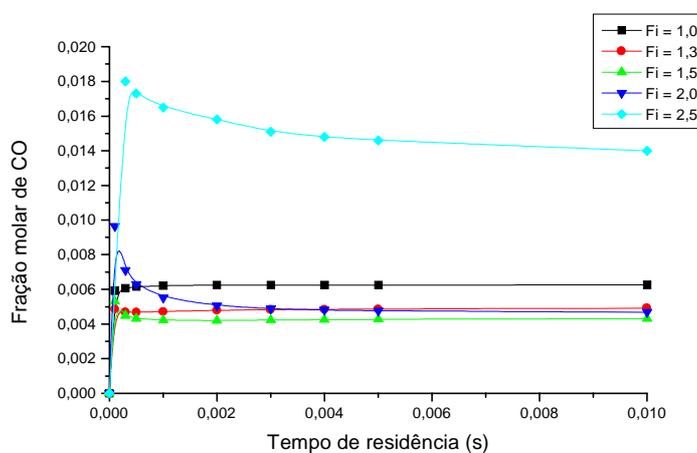


Figura 9. Emissão de CO na saída do quinto reator (final da zona primária) em função do tempo de residência total, para diversos valores de  $F_i$  no primeiro reator.

#### 4. CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS

No presente trabalho foram apresentados os resultados de diversas simulações computacionais para combustão com injeção de ar estagiado na zona primária da câmara de combustão de motores a jato, com intuito de estudar a formação de poluentes, sobretudo NO e CO. Para isso foi utilizado um modelo que trata a região de combustão como uma sucessão de reatores de mistura homogênea, acoplado a um mecanismo reacional com química detalhada. O resultado para o perfil de temperatura apresentado na Fig. (6) mostra que em razão da condição de combustão com o ar injetado de forma estagiada, pode haver uma redução de temperatura considerável nos primeiros reatores. Essa queda de temperatura com estagiamento do ar é favorável à inibição da formação de NO.

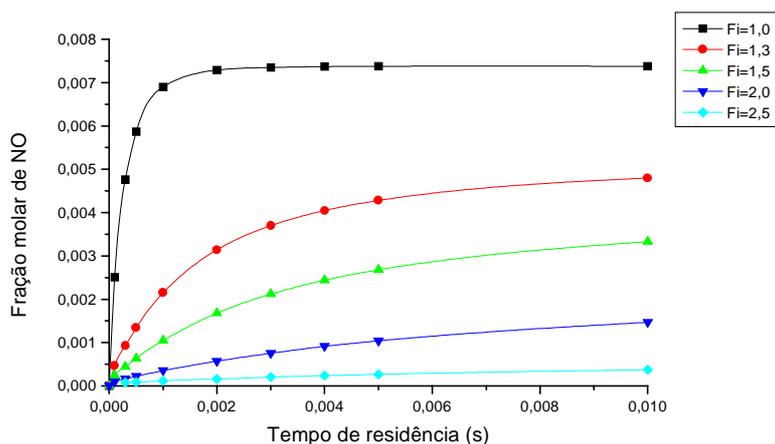


Figura 10. Emissão de NO na saída do quinto reator (final da zona primária) em função do tempo de residência total, para diversos valores de  $F_i$  no primeiro reator.

Como o perfil de temperatura para cada  $F_i$  não se alterou com a variação do tempo de residência de cada reator ( $\tau$ ), ou seja, para qualquer tempo simulado a temperatura de equilíbrio é atingida em cada reator; sendo assim, o tempo que a mistura gasosa permanece em uma determinada temperatura acaba sendo um fator importante na composição final da mistura de cada reator. Para  $\tau$  igual 0,0001s (Fig. 10) a redução da emissão total de NO chega a 30 vezes quando  $F_i$  atinge o valor 2,0, em comparação com  $F_i$  igual a 1,0, ou seja, sem estagiamento. Por outro lado, essa redução é de apenas 5,3 vezes quando  $\tau$  é igual a 0,01s (Fig. 10).

Quanto a emissão de monóxido de carbono (CO), nota-se que a falta de oxigênio no primeiro reator devido ao estagiamento, aumenta substancialmente a concentração desse poluente nesse reator inicial; no entanto, com adição sucessiva de oxigênio nos reatores seguintes, o CO tende a ser oxidado e a formar  $\text{CO}_2$ , sendo que até  $F_i$  igual 2,0 a concentração de CO na saída do último reator é muito próxima a da situação sem estagiamento. Contudo, para  $F_i$  acima de 2,0 a concentração de CO na saída do quinto reator (ou da zona primária) é maior do que para a situação sem estagiamento, isso ocorre em virtude do perfil de temperatura (Fig. 6) apresentar valores mais baixos e suficientes para que a velocidade das reações de oxidação do CO diminua, somando o fato da concentração de CO ser mais elevada na mistura. Esse comportamento foi observado para qualquer tempo de residência. Como observado, tempo de residência não alterou o comportamento qualitativo da emissão de CO, ou seja, até  $F_i$  igual a 2,0 a concentração de CO na saída do quinto reator é praticamente a mesma para as situações estagiadas como para situação sem estagiamento. Contudo, o tempo de residência acaba influenciando quantitativamente a emissão de CO. A Fig. (9) mostra que o aumento do tempo de residência favorece a menor emissão de CO, independente se a combustão na zona primária da câmara é estagiada ou não. Tal fato ocorre em virtude das reações de oxidação do CO serem relativamente lentas, em comparação com as demais reações do mecanismo de combustão dos hidrocarbonetos. Ainda abordando o aspecto tempo de residência, é notório que quanto maior o seu valor maior é a quantidade de NO e menor a quantidade de CO ao final da zona primária. Em função disso, o projeto de uma câmara de combustão estagiada deve ser uma solução de compromisso entre as emissões de NO, CO e a temperatura de saída da câmara de combustão, que é tanto menor quanto mais rica for a mistura. No entanto, os resultados aqui apresentados mostra que através do estagiamento é possível conciliar tais fatores.

Apesar dos resultados encontrados, é preciso ter em mente que em um reator de mistura homogênea o desenvolvimento do mecanismo reacional é o parâmetro controlador do processo. Na prática, os processos de combustão, sobretudo quanto a formação de poluentes, podem não ser apenas controlados pelo desenvolvimento do mecanismo reacional, mas também pela taxa de mistura entre os reagentes, nível de turbulência, processos de transferência de calor, entre outros

fatores. No entanto, os resultados, mesmo que qualitativamente, descrevem as tendências das situações de combustão e dos parâmetros envolvidos. Assim, este tipo de “ferramenta”, apesar de limitado, mostrou ser bastante útil em uma primeira análise sobre a estratégia de um desenvolvimento de câmara de combustão com objetivo de minimizar as emissões de poluentes.

## 5. REFERÊNCIAS

- Fenimore, C. P., 1971, “Formation of Nitric Oxide in Prmixed Hydrocarbon Flames”, 13<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, p.373-380.
- Glarborg, P.; Hadvig, S., 1991, “Development and Test of a Kinetic Model for a Natural Gas Combustion”, Report of Nordic Gas Technology Center.
- Glarborg, P.; Kee, R. J., Grcar, J. F.; Miller, J. A., 1992, “A Fortran Program for Modeling Well-Stirred Reactors”, Sandia National Laboratories Report SAND86-8209.
- Glarborg, P., 1993, “NO<sub>x</sub> Chemistry in Pulse Combustion”, Proc. of the Workshop in Pulsating Combustion and Its Applications, Keynote Lecture C, Lund Institute of Technology, Sweden, August 2-5.
- Kee, R. J.; Rupley, F. M.; Miller, J. A., 1992, “Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics”, Sandia National Laboratories Report SAND89-8009B.
- Lefebvre, A.H., 1983, “Gas Turbine Combustion”, Taylor & Francis.
- Miller, J.A.; Bowman, C.T., 1989, “Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion”, Progress in Energy and Combustion Science, 15:287-338.
- Splithoff, H.; Greul, U.; Rudiger, H.; Hein, K.R.G., 1996, “Basic Effects on NO<sub>x</sub> Emissions in Air Staging and Reburning at a Bench – Scale Test Facility”, *Fuel*, 75(5):560-564.
- Wood, S.C., 1994, “NO<sub>x</sub> Control”, Chemical Engineering Progress, 90(1):31-38.
- Zeldovich, Ya. B.; Sadovnikov, P. Ya.; Frank-Kamenetskii, D. A., 1947, “Oxidation of Nitrogen in Combustion” (transl. by M. Shelef), Academy of Sciences of USSR, Institute of Chemical Physics, Moscow-Leningrad.

## CHEMICAL KINETIC SIMULATION FOR NO<sub>x</sub> EMISSION IN GAS TURBINE WITH STAGED COMBUSTION

### Guilherme Motta Assis Lacerda

Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Divisão de Engenharia Aeronáutica  
Pça. Mal. Eduardo Gomes, 50, Vila das Acácias, São José dos Campos – SP, motta@h8.ita.br

### Pedro Teixeira Lacava

Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Divisão de Engenharia Aeronáutica  
Pça. Mal. Eduardo Gomes, 50, Vila das Acácias, São José dos Campos – SP, lacava@aer.ita.br

**Abstract.** Exhaust emissions from gas turbine engines have been a relevant issue for researchers and engineers since the 60's because of their pollutant compounds, namely unburned hydrocarbons, nitric and carbon oxides and smoke, which can directly or indirectly harm environment and human health. The demands for preservation of the ozone layer have imposed new limitations in terms of reduction of NO<sub>x</sub> emissions of gas turbine conventional technology used by aeronautical industry and power stations. This demand has motivated the development of new technologies for the design of future combustion chamber for low-emissions engines. The staged combustion process is one of these technologies employed to control NO<sub>x</sub> formation. In the present work this process is studied employing detailed chemistry to predict pollutants formation and the combustion chamber is approximated as formed by a series of well-stirred reactor.

**Keywords.** combustion, pollutant emissions, gas turbine, NO<sub>x</sub>.