

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΕΓΧΥΣΗΣ ΚΑΥΣΙΜΟΥ ΚΑΙ ΚΑΥΣΗΣ ΣΕ ΝΑΥΤΙΚΟΥΣ ΚΙΝΗΤΗΡΕΣ

Παναγιώτης Ι. Κοντούλης, Δημήτριος Χ. Καζαγκάς, Ξενάκης Βούβακος & Λάμπρος Καϊκτσίης
Ηρώων Πολυτεχνείου 9, 15773, Ζωγράφου
Τομέας Ναυτικής Μηχανολογίας
Σχολή Ναυπηγών Μηχανολόγων Μηχανικών, Ε.Μ.Π.
kaiktsis@naval.ntua.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα εργασία παρουσιάζει πρόσφατα αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα της ερευνητικής ομάδας των συγγραφέων αναφορικά με την ανάπτυξη και τη χρήση μοντέλων και υπολογιστικών εργαλείων για την προσομοίωση και βελτιστοποίηση της ροής και καύσης σε εφαρμογές συμβατικών ναυτικών κινητήρων, καθώς επίσης και σε εφαρμογές ναυτικών κινητήρων διπλού καυσίμου. Η παρούσα ομάδα έχει αναπτύξει ένα εκτενές μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Η ακρίβεια του μοντέλου ελέγχθηκε με πειραματική ανάλυση δειγμάτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, καθώς και με υπολογισμούς της μη αντιδρώσας και της αντιδρώσας ροής spray σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου, και σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με αντίστοιχα πειραματικά. Στο πλαίσιο των τεχνικών μείωσης των εκπομπών οξειδίων του αζώτου (NO_x) σε συμβατικούς ναυτικούς κινητήρες Diesel, η ερευνητική ομάδα έχει αναπτύξει ένα θερμοδυναμικό μοντέλο για την, κατά το δυνατό, πληρέστερη αποτύπωση του πλήρους κύκλου ενός δίχρονου ναυτικού κινητήρα, με στόχο την ποσοτικοποίηση της επίδρασης της ανακυκλοφορίας καυσαερίου (EGR). Επιπροσθέτως, η μοντελοποίηση της καύσης του φυσικού αερίου και των μηχανισμών σχηματισμού ρύπων σε κινητήρες διπλού καυσίμου απαιτεί κατάλληλη, αξιόπιστη και υπολογιστικά αποδεκτή, αποτύπωση της χημείας της καύσης. Η παρούσα ερευνητική ομάδα ανέπτυξε μεθοδολογία δημιουργίας ενός σκελετικού μηχανισμού καύσης μεθανίου για εφαρμογή σε κώδικες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (CFD). Τέλος, τα επιμέρους μοντέλα που αναπτύσσονται συντίθενται στο πλαίσιο μελετών βελτιστοποίησης.

Λέξεις Κλειδιά: ναυτικοί κινητήρες, υπολογιστική ρευστοδυναμική, βαρύ καύσιμο, φυσικό αέριο, ανακυκλοφορία καυσαερίου, σκελετικός μηχανισμός, βελτιστοποίηση

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Οι νέοι κανονισμοί για τις εκπομπές αέριων ρύπων από τα πλοία θέτουν αυστηρά όρια για τις εκπομπές οξειδίων του αζώτου (NO_x) και οξειδίων του θείου (SO_x), που αποτελούν κύριους ρύπους των ναυτικών κινητήρων. Τα όρια είναι ιδιαίτερα αυστηρά στις ορισθείσες περιοχές ελέγχου των ρύπων (Emission Control Areas - ECAs). Οι κινητήρες διπλού καυσίμου αποτελούν μια ανταγωνιστική λύση συμμόρφωσης με τους κανονισμούς. Η λειτουργία των κινητήρων διπλού καυσίμου βασίζεται σε δύο διακριτούς κύκλους λειτουργίας. Ο ένας κύκλος αφορά στη χρήση συμβατικών υγρών καυσίμων, όπως το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Ο άλλος κύκλος βασίζεται στην καύση αέριων καυσίμων, όπως το φυσικό αέριο, με χρήση μικρής ποσότητας υγρού καυσίμου ως πηγή έναυσης. Στους συμβατικούς ναυτικούς κινητήρες Diesel (λειτουργία αποκλειστικά με υγρό καύσιμο), η τεχνολογία EGR αποτελεί μια ανταγωνιστική τεχνική για τη μείωση των εκπομπών NO_x. Σήμερα, η ανάπτυξη ναυτικών κινητήρων μπορεί να υποστηριχθεί στο πλαίσιο της χρήσης εργαλείων Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, σε συνδυασμό με μεθόδους βελτιστοποίησης. Στόχος είναι η συμμόρφωση με τους κανονισμούς για τις εκπομπές ρύπων, με ταυτόχρονη μείωση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου. Η παρούσα εργασία παρουσιάζει πρόσφατα αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα της ερευνητικής ομάδας των συγγραφέων αναφορικά με την ανάπτυξη και τη χρήση

μοντέλων και υπολογιστικών εργαλείων για την προσομοίωση και βελτιστοποίηση της ροής και καύσης σε εφαρμογές ναυτικών κινητήρων.

2. ΜΟΝΤΕΛΟ ΘΕΡΜΟΦΥΣΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΒΑΡΕΟΣ ΚΑΥΣΙΜΟΥ

2.1 Ανάπτυξη του μοντέλου

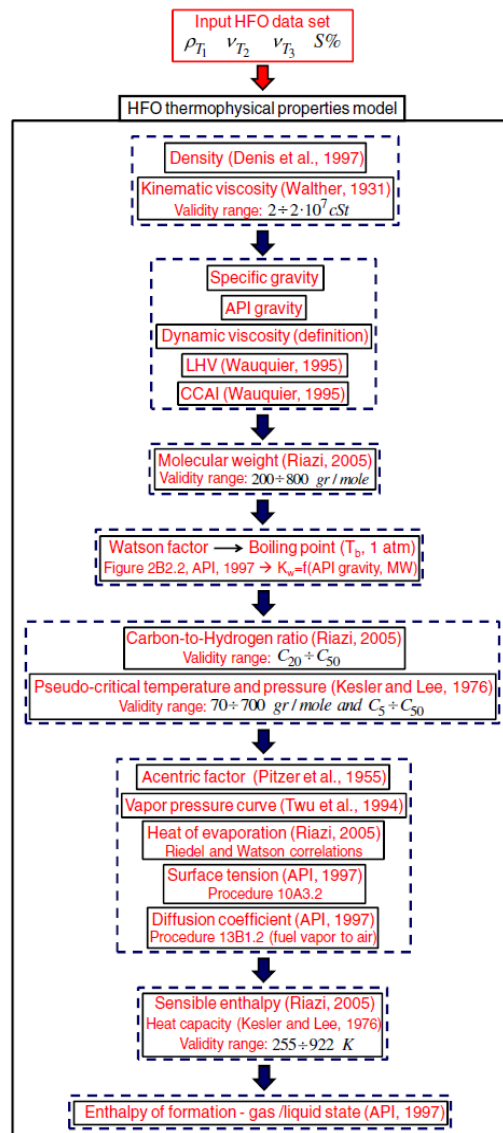
Το βαρύ καύσιμο αποτελεί το κύριο καύσιμο της ναυτιλίας. Για την προσομοίωση της ροής του spray και της καύσης διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος καυσίμου με χρήση CFD, απαιτούνται οι τιμές των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του καυσίμου, σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Για τον λόγο αυτόν, αναπτύχθηκε από την παρούσα ερευνητική ομάδα ένα εκτενές μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου (Kontoulis et al., 2018). Στην Εικόνα 1 παρουσιάζεται μια σχηματική απεικόνιση του μοντέλου. Το μοντέλο κάνει χρήση της παραδοχής μονοσυστατικού υγρού, απαιτεί δε ως είσοδο τέσσερις τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων, οι οποίες είναι διαθέσιμες από την ανάλυση λαμβανόμενου κατά την πετρέλωση δείγματος, συγκεκριμένα την τιμή της πυκνότητας σε μια θερμοκρασία, δύο τιμές του κινηματικού ιξώδους (σε δύο διαφορετικές θερμοκρασίες), καθώς και την επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα σε θείο. Το αναπτυχθέν μοντέλο υπολογίζει τις τιμές ενός ευρέος φάσματος θερμοφυσικών ιδιοτήτων, συμπεριλαμβανόμενης της θερμοκρασιακής εξάρτησης αυτών. Συγκεκριμένα, το μοντέλο υπολογίζει το μέσο μοριακό βάρος, το κανονικοποιημένο σημείο εξάτμισης, τον λόγο C-H, τις ψευδο-κρίσιμες τιμές πίεσης και θερμοκρασίας, την κατώτερη θερμογόνο ικανότητα, την ενθαλπία σχηματισμού, την ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση, τον δείκτη αρωματικότητας, τον συντελεστή Watson και τον παράγοντα μη-σφαιρικότητας των μορίων (acentric factor). Το κύριο πλεονέκτημα του παρόντος μοντέλου είναι ο υπολογισμός της πλήρους θερμοκρασιακής εξάρτησης της πυκνότητας, του κινηματικού και δυναμικού ιξώδους, της τάσης ατμών, της ενθαλπίας εξάτμισης, της επιφανειακής τάσης, του συντελεστή διάχυσης καυσίμου σε αέρα και της αισθητής ενθαλπίας. Για την πιστοποίηση του μοντέλου πραγματοποιήθηκαν εργαστηριακές μετρήσεις διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Στην Εικόνα 2(α) απεικονίζεται, αντιπροσωπευτικά, η θερμοκρασιακή εξάρτηση του κινηματικού ιξώδους για διάφορες ποιότητες του βαρέος καυσίμου, σε σύγκριση με αυτήν του δεκατετρανίου ($C_{14}H_{30}$), που είναι ένας υδρογονάνθρακας αντιπροσωπευτικός των ελαφριών ναυτιλιακών καυσίμων (Marine Diesel Oil - MDO). Στην Εικόνα 2(α) αποτυπώνεται η πολύ καλή σύγκριση των αποτελεσμάτων του μοντέλου με τις αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις. Η Εικόνα 2(α) καταδεικνύει τη δραστική μείωση του ιξώδους του βαρέος καυσίμου με τη θέρμανσή του, καθώς επίσης και τα αισθητά υψηλότερα επίπεδα τιμών του ιξώδους σε σύγκριση με ένα αντιπροσωπευτικό ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Συνολικά, το παρόν μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων αναπαράγει με ακρίβεια τις θερμοφυσικές ιδιότητες οποιασδήποτε ποιότητας βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, και μπορεί να αποτελέσει τη βάση για λεπτομερείς υπολογισμούς της ροής και καύσης βαρέος καυσίμου σε εφαρμογές ναυτικών κινητήρων.

2.2 Προσομοίωση ροής spray καυσίμου σε θάλαμο σταθερού όγκου

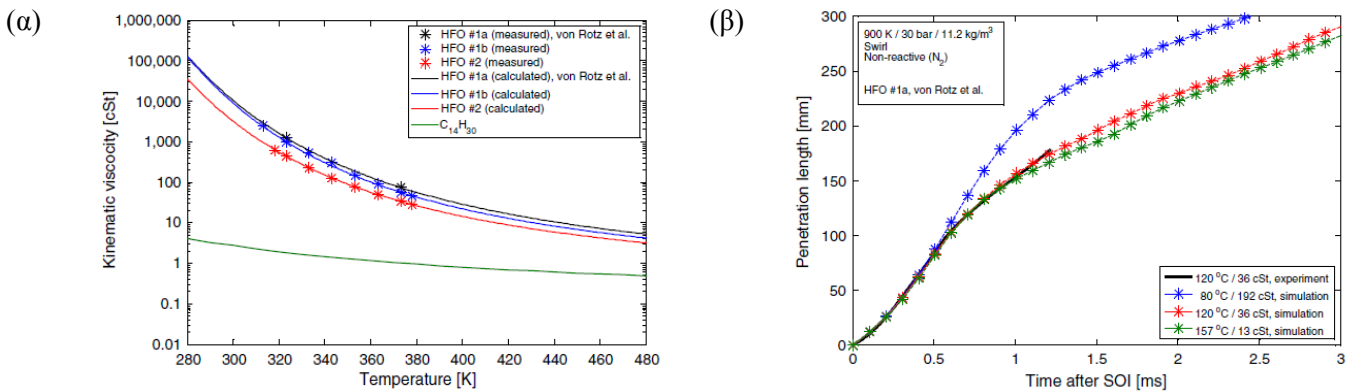
Το αναπτυχθέν μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος καυσίμου εισήχθη στον κώδικα CFD KIVA3 (Amsden et al., 1993), και χρησιμοποιήθηκε για υπολογισμούς της μη αντιδρώσας και της αντιδρώσας ροής spray βαρέος καυσίμου σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου. Στο πλαίσιο της περαιτέρω ανάπτυξης του κώδικα από την παρούσα ομάδα, έχουν προστεθεί υπολογιστικά μοντέλα, κατάλληλα για την περιγραφή της διάσπασης δέσμης καυσίμου, της έναυσης, της καύσης, του σχηματισμού οξειδίων του αζώτου (NO_x), καθώς και της παραγωγής και οξειδωσης των σωματιδίων αιθάλης (Stratsianis et al., 2016, Kontoulis et al., 2018). Η ακρίβεια του παρόντος μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων ελέγχθηκε σε συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας αντίστοιχες με αυτές δίχρονων ναυτικών κινητήρων, μέσω σύγκρισης με διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα, με ικανοποιητικά αποτελέσματα. Επίσης, μελετήθηκε η επίδραση της μεταβολής αρχικών συνθηκών, όπως η θερμοκρασία προθέρμανσης του βαρέος καυσίμου, στη δυναμική του spray, επιβεβαιώνοντας την καλή απόκριση του μοντέλου, αναφορικά με τη διάσπαση και την εξάτμιση του spray καυσίμου. Στην Εικόνα 2(β) παρουσιάζεται το υπολογισθέν μήκος διείδυσης ενός spray καυσίμου συναρτήσει του χρόνου, για τρεις τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης, και αποτυπώνεται η αυξημένη διείδυση για χαμηλά επίπεδα προθέρμανσης. Η Εικόνα 3 καταδεικνύει την ενίσχυση της διάσπασης και εξάτμισης του spray για αυξημένες τιμές της αρχικής θερμοκρασίας του καυσίμου.

2.3 Βελτιστοποίηση προφίλ έγχυσης βαρέος καυσίμου σε ναυτικό κινητήρα

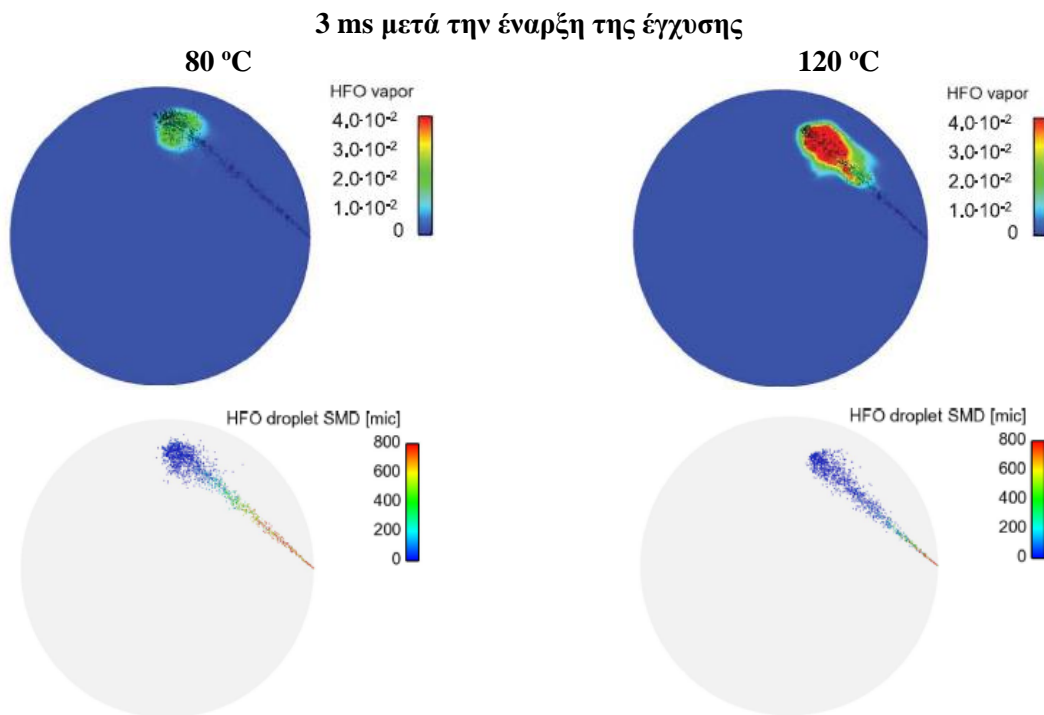
Στην παρούσα εργασία, παρουσιάζονται αποτελέσματα πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης του προφίλ έγχυσης βαρέος καυσίμου σε δίχρονο ναυτικό κινητήρα Diesel στην περιοχή του πλήρους φορτίου, με στόχο την ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση των εκπομπών ρύπων και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου. Στο πλαίσιο αυτό, γίνεται σύζευξη του κώδικα KIVA3 με το λογισμικό βελτιστοποίησης EASY (Kampolis & Giannakoglou, 2008), το οποίο κάνει χρήση εξελικτικών αλγορίθμων. Εδώ, η διατύπωση του προβλήματος βελτιστοποίησης γίνεται για προφίλ έγχυσης με τρεις παλμούς (προέγχυση, κύρια έγχυση, μετέγχυση). Στην Εικόνα 4(α) παρουσιάζεται το σύνολο των βέλτιστων λύσεων (μέτωπο Pareto) ως προς την ειδική κατανάλωση καυσίμου και την τελική συγκέντρωση των εκπομπών NO_x. Η βέλτιστη λύση (προφίλ έγχυσης) που αντιστοιχεί σε μείωση 15% των εκπομπών NO_x, χωρίς μεταβολή της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, παρουσιάζεται στην Εικόνα 4(β). Η συγκεκριμένη βέλτιστη λύση επιτυγχάνει τα ίδια επίπεδα μέγιστης πίεσης με αυτά της περίπτωσης αναφοράς (Εικόνα 5(α)). Η χρονική ιστορία παραγωγής NO_x αποτυπώνεται στην Εικόνα 5(β), και καταδεικνύει ότι η καύση της ποσότητας του βαρέος καυσίμου που αντιστοιχεί στην προέγχυση δεν συνεισφέρει στην παραγωγή NO_x. Στο σημείο αυτό σημειώνεται ότι η παρουσία της μετέγχυσης συνεισφέρει στην ταυτόχρονη μείωση της τελικής συγκέντρωσης σωματιδίων αιθάλης (soot) κατά 11%, σε σύγκριση με την περίπτωση αναφοράς.



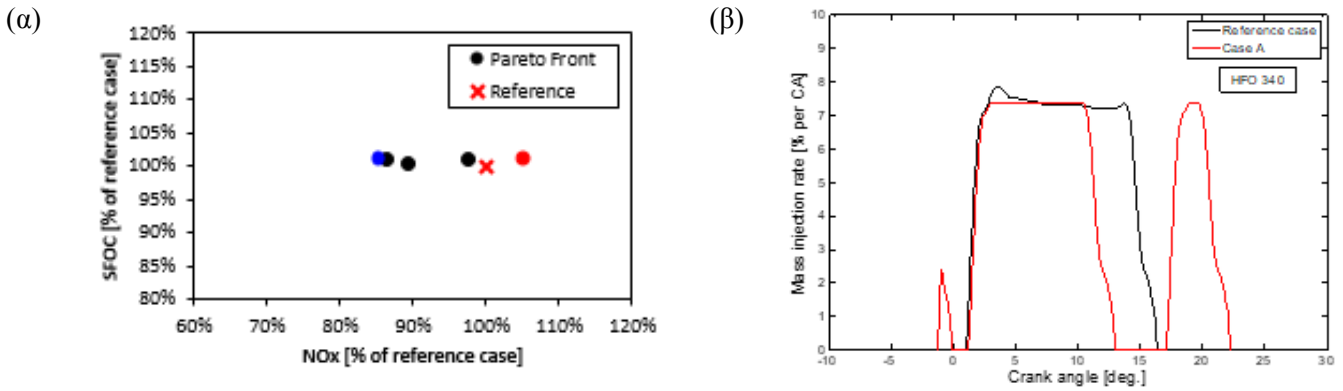
Εικόνα 1: Μοντέλο υπολογισμού θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος καυσίμου, όπως αναπτύχθηκε από την παρούσα ερευνητική ομάδα.



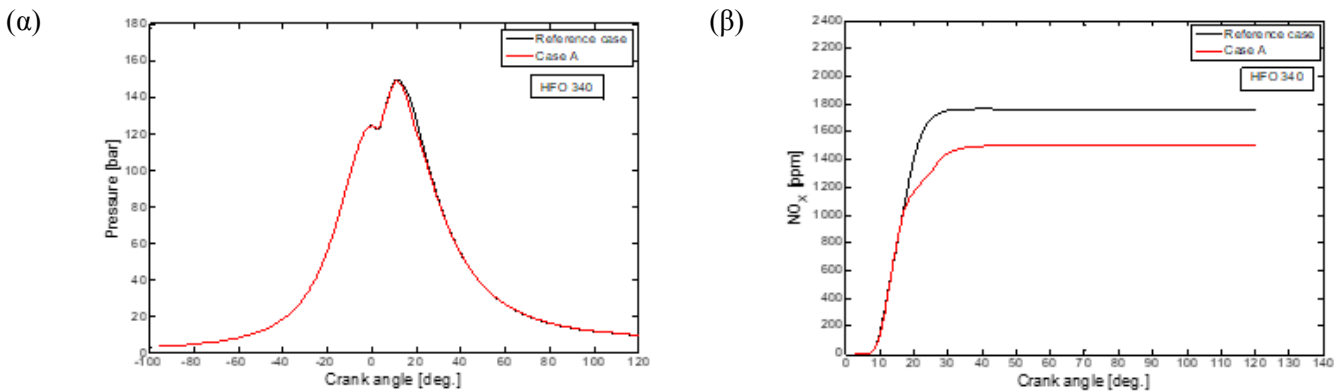
Εικόνα 2: (α) Υπολογισθείσες τιμές του κινηματικού ιξώδους συναρτήσει της θερμοκρασίας, όπως προέκυψαν από τη χρήση του αναπτυχθέντος μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων, και αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις, για διάφορες ποιότητες βαρέος καυσίμου. Στο διάγραμμα περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀), για σύγκριση. (β) Υπολογισθείσα χρονική μεταβολή του μήκους διείσδυσης spray βαρέος καυσίμου σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου, για διαφορετικές τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης του καυσίμου. Στο διάγραμμα περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη πειραματική καμπύλη για θερμοκρασία προθέρμανσης 120 °C.



Εικόνα 3: Έγχυση βαρέος καυσίμου σε θάλαμο καύσης σταθερού όγκου: οπτικοποίηση της δομής του spray και ισούνηεις καμπύλες του κλάσματος μάζας του εξατμισθέντος καυσίμου και της μέσης διαμέτρου σταγόνας στο οριζόντιο επίπεδο στο ύψος του εγχυτήρα, για τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης 80 °C και 120 °C, σε χρονική στιγμή 3 ms μετά την έναρξη της έγχυσης.



Εικόνα 4: Αποτελέσματα βελτιστοποίησης προφίλ έγχυσης βαρέος καυσίμου με τρεις παλμούς σε δίχρονο ναυτικό κινητήρα: (α) Σύνολο βέλτιστων λύσεων (μέτωπο Pareto) ως προς την ειδική κατανάλωση καυσίμου και τις εκπομπές NO_x. (β) Βέλτιστο προφίλ έγχυσης βαρέος καυσίμου που επιφέρει μείωση των εκπομπών NO_x κατά 15% (Περίπτωση Α). Στο διάγραμμα περιλαμβάνεται και το συνεχές προφίλ έγχυσης της περίπτωσης αναφοράς.



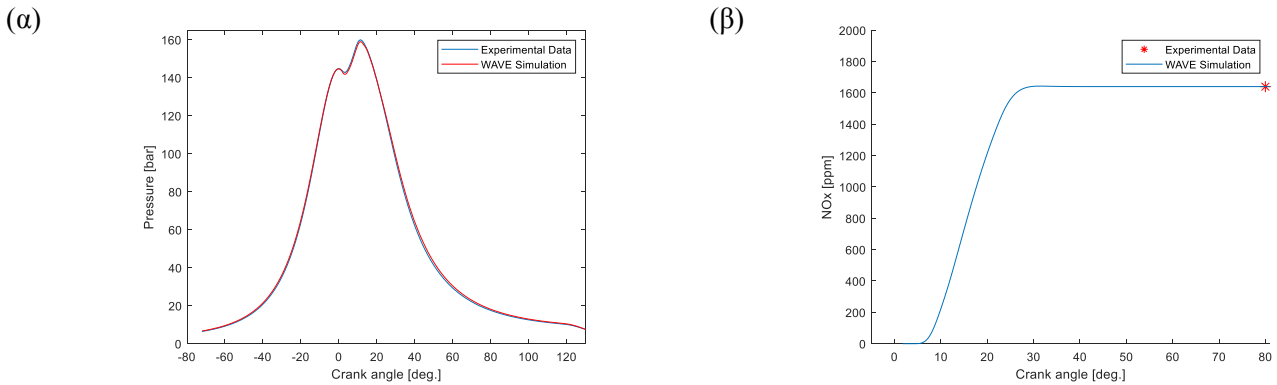
Εικόνα 5: Χρονική ιστορία της πίεσης στον κύλινδρο (α), και της μέσης συγκέντρωσης NO_x (β), για την Περίπτωση Α (βέλτιστη λύση) και την περίπτωση αναφοράς.

3. ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ ΔΙΧΡΟΝΟΥ ΝΑΥΤΙΚΟΥ ΚΙΝΗΤΗΡΑ ΜΕ ΑΝΑΚΥΚΛΟΦΟΡΙΑ ΚΑΥΣΑΕΡΙΟΥ

Η επίδραση της ανακυκλοφορίας καυσαερίου (Exhaust Gas Recirculation - EGR) στη μείωση των εκπομπών NO_x μελετάται από την παρούσα ερευνητική ομάδα με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής. Για την, κατά το δυνατό, πληρέστερη αποτύπωση του πλήρους κύκλου ενός δίχρονου ναυτικού κινητήρα, αναπτύχθηκε, σε πρώτο επίπεδο, πλήρες θερμοδυναμικό μοντέλο του κινητήρα με χρήση του κώδικα WAVE (Ricardo 2016), σε συνεργασία με τους διεθνείς κατασκευαστικούς οίκους Ricardo και Winterthur Gas & Diesel (Lion et al. 2018). Το βασικό μοντέλο του κινητήρα έχει πιστοποιηθεί με χρήση πειραματικών δεδομένων, στο πλήρες φορτίο. Η πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των πειραματικών δεδομένων και των αποτελεσμάτων της θερμοδυναμικής μοντελοποίησης αποτυπώνεται στον Πίνακα 1 (παράμετροι επίδοσης), στην Εικόνα 6(α) (χρονική μεταβολή της πίεσης εντός του κυλίνδρου), και στην Εικόνα 6(β) (χρονική μεταβολή της μέσης συγκέντρωσης NO_x).

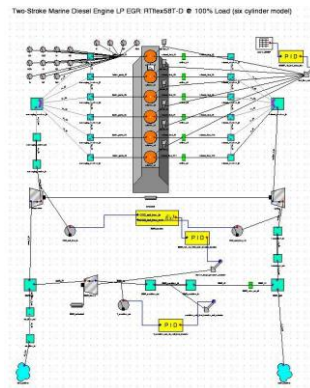
Πίνακας 1: Παράμετροι επίδοσης δίχρονου ναυτικού κινητήρα σε πλήρες φορτίο: πειραματικά δεδομένα επίδοσης και αποτελέσματα θερμοδυναμικής προσομοίωσης.

Επίδοση κινητήρα σε πλήρες φορτίο	Πειραματικά δεδομένα	Αποτελέσματα προσομοίωσης
Ισχύς πέδησης (kW)	13560	13544.4
Μέση ενδεικνύμενη πίεση (bar)	20.23	20.21



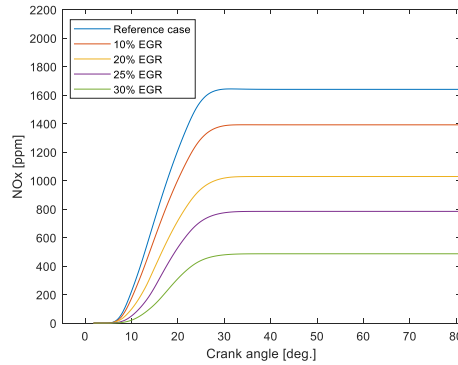
Εικόνα 6: Σύγκριση θερμοδυναμικής μοντελοποίησης και πειραματικών δεδομένων: (α) Χρονική μεταβολή της πίεσης εντός του κυλίνδρου. (β) Χρονική μεταβολή της μέσης συγκέντρωσης NO_x .

Η ανακυκλοφορία καυσαερίων στους συμβατικούς ναυτικούς κινητήρες Diesel αποτελεί τεχνολογία αιχμής για τη μείωση των εκπομπών NO_x . Συγκεκριμένα, επανεισάγοντας στον θάλαμο καύσης ποσοστό της παροχής των καυσαερίων, αυξάνεται η μέση θερμοχωρητικότητα του αέριου μίγματος, ενώ μειώνεται η συγκέντρωση μοριακού οξυγόνου, με αποτέλεσμα τη μείωση της θερμοκρασίας των καυσαερίων, και κατά συνέπεια των εκπομπών NO_x . Η τεχνική EGR μπορεί να εφαρμοστεί είτε στο πλαίσιο της ανακυκλοφορίας υψηλής πίεσης (ψύξη των καυσαερίων από τον αυλό της εξαγωγής και ανακυκλοφορία στην εισαγωγή του κινητήρα) είτε στο πλαίσιο της ανακυκλοφορίας χαμηλής πίεσης (ψύξη των καυσαερίων μετά τον στρόβιλο του στροβιλοσυμπιεστή και ανακυκλοφορία στην είσοδο του συμπιεστή). Στην Εικόνα 7 παρουσιάζεται σχηματικά το μοντέλο δίχρονου ναυτικού κινητήρα Diesel με χρήση ανακυκλοφορίας χαμηλής πίεσης.



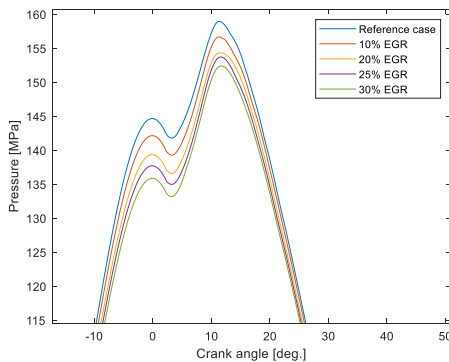
Εικόνα 7: Σχηματική απεικόνιση θερμοδυναμικού μοντέλου δίχρονου ναυτικού κινητήρα Diesel με χρήση ανακυκλοφορίας χαμηλής πίεσης.

Στην παρούσα εργασία παρουσιάζονται υπολογιστικά αποτελέσματα από τη χρήση EGR σε ποσοστό 0% (Περίπτωση αναφοράς), 10%, 20%, 25% και 30%. Όπως αποτυπώνεται στην Εικόνα 8 (χρονική μεταβολή της μέσης συγκέντρωσης NO_x), για ποσοστό EGR 30% επιτυγχάνεται μείωση των εκπομπών NO_x πέραν του 70%, μείωση η οποία καλύπτει τα όρια των νέων αυστηρών κανονισμών για τις εκπομπές NO_x στις περιοχές ελέγχου των ρύπων (ECAs). Στην Εικόνα 9(α) παρουσιάζεται η χρονική ιστορία της πίεσης στον θάλαμο καύσης, πιστοποιώντας τη μείωση της πίεσης, τόσο κατά το στάδιο της συμπίεσης όσο και κατά το στάδιο της εκτόνωσης, με την αύξηση του ποσοστού EGR. Η μείωση του συνολικού ωφέλιμου έργου έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση του ειδικής κατανάλωσης καυσίμου έως 2% (Εικόνα 9(β)).

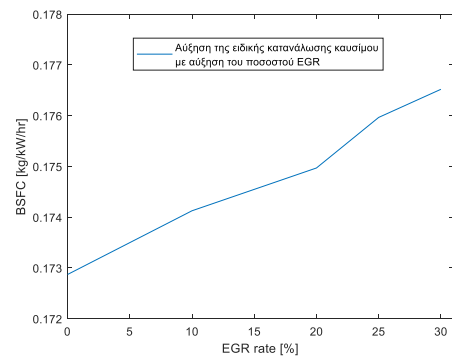


Εικόνα 8: Χρονική μεταβολή της υπολογισθείσας μέσης συγκέντρωσης NO_x , για χρήση EGR σε ποσοστό 0%, 10%, 20%, 25% και 30%.

(α)



(β)



Εικόνα 9: Υπολογιστικά αποτελέσματα χ για χρήση EGR σε ποσοστό 0%, 10%, 20%, 25% και 30%: (α) Χρονική μεταβολή της πίεσης εντός του κυλίνδρου. (β) Ειδική κατανάλωση καυσίμου.

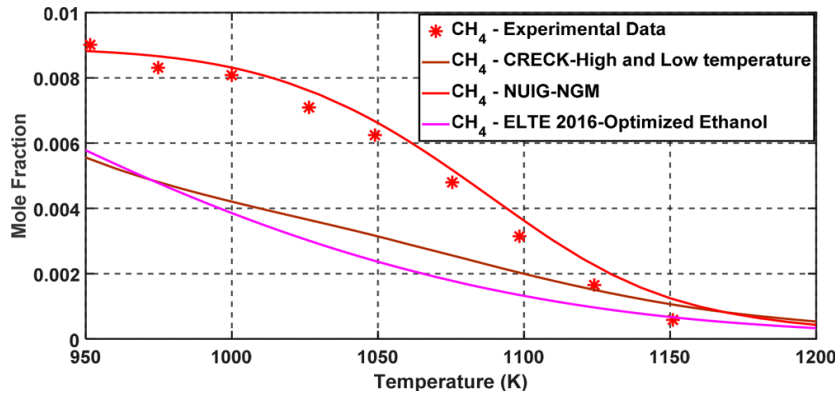
4. ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΠΑΡΑΓΩΓΗ ΒΕΛΤΙΣΤΟΥ ΣΚΕΛΕΤΙΚΟΥ ΜΗΧΑΝΙΣΜΟΥ ΚΑΥΣΗΣ ΜΕΘΑΝΙΟΥ

Η μοντελοποίηση της καύσης του φυσικού αερίου μπορεί να επιτευχθεί με την ανάπτυξη κατάλληλων σκελετικών μηχανισμών χημικής κινητικής που περιγράφουν την καύση του μεθανίου, το οποίο αποτελεί το βασικό συστατικό (σε ποσοστό έως 98%) του φυσικού αερίου. Η δημιουργία ενός βελτιστοποιημένου σκελετικού μηχανισμού κάνει χρήση μεθοδολογίας που αναπτύχθηκε πρόσφατα από την παρούσα ερευνητική ομάδα, και συνίσταται στα ακόλουθα βήματα (Fokas et al. 2018):

(α) Αξιολόγηση τριών ευρέως αποδεκτών λεπτομερών μηχανισμών καύσης μεθανίου (βλ. Πίνακα 2), με σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με «έμμεσα» πειραματικά δεδομένα (ταχύτητα στρωτής φλόγας προανάμιξης, χρόνος καθυστέρησης έναυσης, τιμές συγκεντρώσεων των βασικών προϊόντων σε αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης (Jet Stirred Reactor - JSR)). Στην Εικόνα 10 παρουσιάζονται τα προφίλ γραμμομοριακού κλάσματος (mole fraction) μεθανίου (CH_4) συναρτήσει της θερμοκρασίας, σε αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης, σε πίεση $P = 10.0 \text{ atm}$, και λόγο ισοδυναμίας καυσίμου αέρα $\phi = 0.3$. Η κατ' όγκον σύνθεση του μίγματος είναι 1% CH_4 , 6.67% O_2 , και 92.33% N_2 . Τα αποτελέσματα του λεπτομερούς μηχανισμού NUIG-NGM προσεγγίζουν με μεγαλύτερη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα (Le Cong et al. 2008) για την καύση μεθανίου σε αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης. Σε αντίθεση, οι λεπτομερείς μηχανισμοί CRECK και ELTE υποεκτιμούν την κατανάλωση του μεθανίου σε θερμοκρασίες μικρότερες των 1100 K. Επίσης, σημειώνεται ότι ο λεπτομερής μηχανισμός NUIG-NGM αναπαράγει το σύνολο των «έμμεσων» πειραματικών δεδομένων με μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με τους άλλους δύο λεπτομερείς μηχανισμούς, και για τον λόγο αυτόν επιλέγεται ως βάση για τη δημιουργία του σκελετικού μηχανισμού.

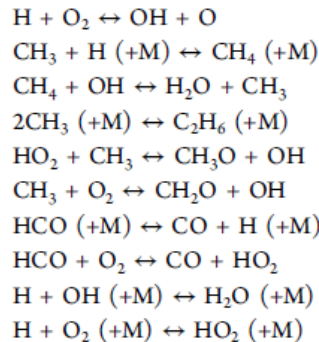
Πίνακας 2: Αριθμός χημικών ενώσεων και στοιχειωδών αντιδράσεων που περιλαμβάνονται στους τρεις χρησιμοποιούμενους λεπτομερείς μηχανισμούς (Ranzi et al. 2012, Ranzi et al. 2015, Donato et al. 2010, Healy et al. 2010, Olm et al. 2016).

Λεπτομερής Μηχανισμός	Αριθμός Χημικών Ενώσεων	Αριθμός Αντιδράσεων
CRECK high and low temperature	107	2642
NUIG-NGM	293	1593
ELTE 2016 optimized ethanol	47	251



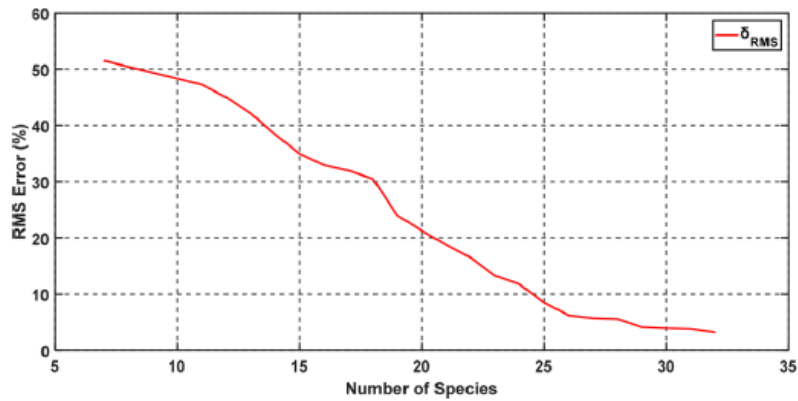
Εικόνα 10: Προφίλ γραμμομοριακού κλάσματος (mole fraction) μεθανίου (CH₄) συναρτήσει της θερμοκρασίας σε αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης (Jet Stirred Reactor - JSR) σε πίεση P = 10.0 atm και λόγο ισοδυναμίας καυσίμου αέρα φ = 0.3. Η κατ' όγκον σύνθεση του μίγματος είναι 1% CH₄, 6.67% O₂, και 92.33% N₂. Οι πειραματικές τιμές αναφέρονται στους Le Cong et al. 2008.

(β) Ανάλυση ευαισθησίας, για τον προσδιορισμό των σημαντικών στοιχειωδών χημικών αντιδράσεων καθενός πλήρους μηχανισμού. Στην Εικόνα 11 αποτυπώνονται οι σημαντικές στοιχειώδεις χημικές αντιδράσεις που προέκυψαν για την καύση μεθανίου (CH₄). Οι αντιδράσεις αυτές χρησιμοποιήθηκαν για τον προσδιορισμό των σημαντικών χημικών ενώσεων που συνιστούν μια πρώτη εκτίμηση προς τη δημιουργία του τελικού σκελετικού μηχανισμού με τη μέθοδο SEM-CM.



Εικόνα 11: Σημαντικές στοιχειώδεις χημικές αντιδράσεις για την καύση μεθανίου (CH₄), όπως προέκυψαν από τη διαδικασία της ανάλυσης ευαισθησίας.

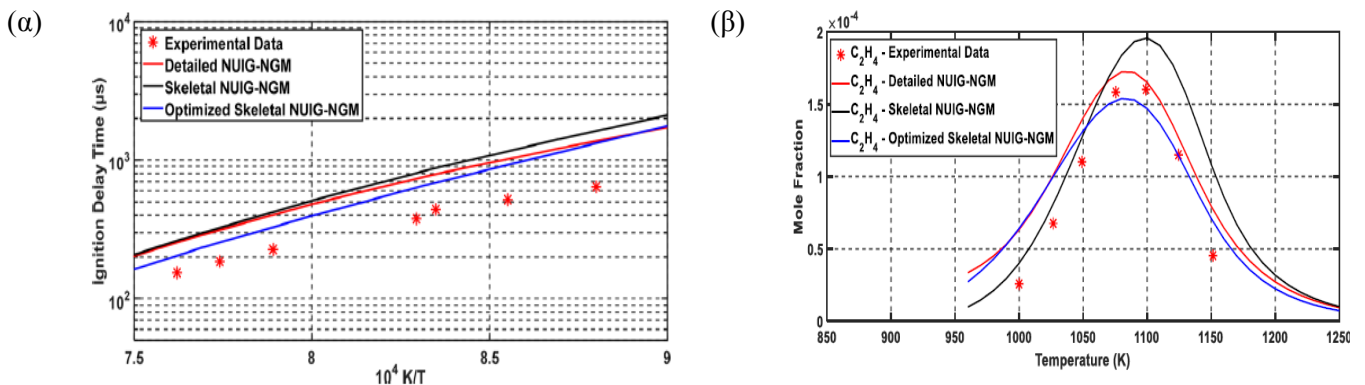
(γ) Παραγωγή ενός σκελετικού μηχανισμού με χρήση της μεθόδου SEM-CM (Simulation Error Minimization - Connectivity Method). Στην Εικόνα 12 παρουσιάζεται η μεταβολή της τιμής RMS της συνάρτησης σφάλματος ως προς τον αριθμό των χημικών ενώσεων. Η συνάρτηση σφάλματος αποτελεί τη διαφορά των συγκεντρώσεων των χημικών ενώσεων που προκύπτουν από τη χρήση του λεπτομερούς μηχανισμού και του σκελετικού μηχανισμού. Λαμβάνοντας υπόψη ότι η συνάρτηση σφάλματος δεν μεταβάλλεται αισθητά για αριθμό χημικών ενώσεων μεγαλύτερο των 28, ο τελικός σκελετικός μηχανισμός που προέκυψε στην παρούσα εργασία αποτελείται από 28 χημικές ενώσεις και 119 στοιχειώδεις χημικές αντιδράσεις.



Εικόνα 12: Σφάλμα δ_{RMS} , όπως προέκυψε κατά τη μείωση του λεπτομερούς μηχανισμού NUIG-NGM, ως συνάρτηση του συνολικού αριθμού χημικών ενώσεων του παραγόμενου σκελετικού μηχανισμού.

(δ) Ανάλυση αβεβαιότητας για τον προσδιορισμό των ορίων αβεβαιότητας που αποτελούν τα φυσικά όρια για τις ειδικές σταθερές των σημαντικών στοιχειωδών χημικών αντιδράσεων. Τα εν λόγω φυσικά όρια αποτελούν τους περιορισμούς του προβλήματος βελτιστοποίησης.

(ε) Μονοκριτηριακή βελτιστοποίηση του σκελετικού μηχανισμού ως προς τις παραμέτρους των ειδικών σταθερών των σημαντικών στοιχειωδών χημικών αντιδράσεων. Η βελτιστοποίηση πραγματοποιήθηκε με χρήση του κώδικα Optima++ σε συνδυασμό με τον κώδικα χημικής κινητικής Flamemaster (Fokas et al. 2018, και περιλαμβανόμενες βιβλιογραφικές αναφορές). Ο βελτιστοποιημένος σκελετικός μηχανισμός που προέκυψε αναπαράγει με μεγάλη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα, σε ένα μεγάλο εύρος συνθηκών πίεσης, θερμοκρασίας και λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα. Στην Εικόνα 13(α) καταδεικνύεται η πολύ καλή αναπαραγωγή πειραματικών δεδομένων καθυστέρησης έναυσης (Petersen et al. 1999) από τον βελτιστοποιημένο σκελετικό μηχανισμό, σε σύγκριση με τον αρχικό σκελετικό μηχανισμό. Στην Εικόνα 13(β) απεικονίζεται η καλή σύγκλιση μεταξύ των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με χρήση του βελτιστοποιημένου σκελετικού μηχανισμού και των πειραματικών δεδομένων (Le Cong et al. 2008), αναφορικά με την παραγωγή αιθυλενίου (C_2H_4) κατά την καύση μεθανίου σε αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης.



Εικόνα 13: (α) Χρόνος καθυστέρησης έναυσης συναρτήσει της αρχικής θερμοκρασίας για μίγματα μεθανίου (CH_4) σε πίεση $P=100$ atm και λόγο ισοδυναμίας καυσίμου αέρα $\phi=0.4$. Οι πειραματικές τιμές αναφέρονται στους Petersen et al. 1999. (β) Προφίλ γραμμομοριακού κλάσματος (mole fraction) αιθυλενίου (C_2H_4) συναρτήσει της θερμοκρασίας, για καύση μεθανίου σε αντιδραστήρα πλήρους ανάμιξης, σε πίεση $P = 10.0$ atm και λόγο ισοδυναμίας καυσίμου αέρα $\phi = 0.3$. Η κατ' όγκον σύνθεση του μίγματος είναι 1% CH_4 , 6.67% O_2 , και 92.33% N_2 . Οι πειραματικές τιμές αναφέρονται στους Le Cong et al. 2008.

5. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα εργασία παρουσιάστηκαν πρόσφατα αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα της ερευνητικής ομάδας των συγγραφέων στην περιοχή της μοντελοποίησης και βελτιστοποίησης των διεργασιών ροής και καύσης σε ναυτικούς κινητήρες. Αρχικά, παρουσιάστηκε ένα γενικευμένο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Το μοντέλο βασίζεται στην παραδοχή του μονοσυστατικού υγρού, και υπολογίζει τις ιδιότητες οποιασδήποτε ποιότητας ναυτιλιακού καυσίμου, κάνοντας χρήση τεσσάρων τιμών θερμοφυσικών ιδιοτήτων, οι οποίες είναι διαθέσιμες από την ανάλυση δείγματος που λαμβάνεται κατά την πετρέλευση. Η ακρίβεια του μοντέλου πιστοποιήθηκε με εργαστηριακές μετρήσεις διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Μετά την εισαγωγή του μοντέλου σε κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, έγινε μελέτη της διάσπασης και εξάτμισης του spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε θάλαμο σταθερού όγκου, και επιτεύχθηκε πολύ καλή συμφωνία με πειραματικά δεδομένα. Τέλος, το μοντέλο χρησιμοποιήθηκε στη βελτιστοποίηση του προφίλ έγχυσης δίχρονου ναυτικού κινητήρα Diesel, για χρήση βαρέος καυσίμου. Στην παρούσα εργασία παρουσιάστηκε επίσης ένα πλήρες θερμοδυναμικό μοντέλο δίχρονου ναυτικού κινητήρα Diesel με χρήση ανακυκλοφορίας καυσαερίου (EGR), η ακρίβεια του οποίου πιστοποιήθηκε με σύγκριση με πειραματικά δεδομένα. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα δεικνύουν τον δραστικό περιορισμό των εκπομπών NO_x για χρήση EGR σε ποσοστό 30%, και αντιστοιχούν σε συμμόρφωση με τους νέους κανονισμούς για τις περιοχές ελέγχου των ρύπων (ECAs). Τέλος, στο πλαίσιο του ενδιαφέροντος για ναυτικούς κινητήρες διπλού καυσίμου, παρουσιάστηκε μια ολοκληρωμένη μεθοδολογία ανάπτυξης βελτιστοποιημένου σκελετικού μηχανισμού καύσης μεθανίου, και η εφαρμογή της στο πλαίσιο της μείωσης ενός λεπτομερούς μηχανισμού με 293 ενώσεις και 1593 στοιχειώδεις αντιδράσεις. Ο βελτιστοποιημένος σκελετικός μηχανισμός που αναπτύχθηκε αποτελείται από 28 ενώσεις και 119 στοιχειώδεις αντιδράσεις, και, σε πρότυπα προβλήματα, αναπαράγει με μεγάλη ακρίβεια πειραματικά δεδομένα, σε ένα μεγάλο εύρος συνθηκών πίεσης, θερμοκρασίας και λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα. Τα αναπτυχθέντα, στο πλαίσιο των ως άνω μελετών, μοντέλα και υπολογιστικά εργαλεία αποτελούν τη βάση για περαιτέρω έρευνα, με στόχο την κατανόηση και βελτιστοποίηση φαινομένων ροής και καύσης σε ναυτικούς κινητήρες.

Βιβλιογραφία

- Amsden, A.A., “KIVA-3: A KIVA program with block-structured mesh for complex geometries”, Los Alamos National Laboratory LA-12503-MS, 1993.
- Donato, N., Aul, C., Petersen, E., Zinner, C., Curran, H. and Bourque, G. (2010), “Ignition and oxidation of 50/50 butane isomer blends”, *J. Eng. Gas Turbines Power*, 132, 051502.
- Fokas N., Perdikaris F., Kazangas D., Skevis G. and Kaiktsis L. (2018), “Development of an optimized skeletal chemical kinetic mechanism for methane combustion for marine engine applications”, *Energy & Fuels*, DOI: 10.1021/acs.energyfuels.8b01118.
- Healy, D., Donato, N. S., Aul, C. J., Petersen, E. L., Zinner, C. M., Bourque, G. and Curran, H. J. (2010), “n-Butane ignition delay time measurements at high pressure and detailed chemical kinetic modeling”, *Combust. Flame*, 157 (8), 1526–1539.
- Healy, D., Donato, N. S., Aul, C. J., Petersen, E. L., Zinner, C. M., Bourque, G. and Curran, H. J. (2010), “Isobutane Ignition delay time measurements at high pressure and detailed chemical kinetic modeling”, *Combust. Flame*, 157 (8), 1540–1551.
- Healy, D., Kalitan, D. M., Aul, C. J., Petersen, E. L., Bourque, G. and Curran, H. J. (2010), “Oxidation of C₁–C₅ alkane quaternary natural gas mixtures at high pressures”, *Energy Fuels*, 24 (3), 1521–1528.
- Healy, D., Kopp, M. M., Polley, N. L., Petersen, E. L., Bourque, G. and Curran, H. J. (2010), “Methane/n-butane ignition delay measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulation”, *Energy Fuels*, 24 (3), 1617–1627.

Kampolis I.C. and Giannakoglou, K.C. (2008), “A multilevel approach to single- and multi-objective aerodynamic optimization”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197 (33-40), 2963-2975.

Kontoulis P., Kazangas D., Doss T.P. and Kaiktsis L. (2018), “Development and CFD validation of an integrated model for marine Heavy Fuel Oil thermophysical properties”, *J. Energy Eng.*, 144(5), 04018059: 1-17.

Le Cong, T., Dagaut, P. and Dayma, G. (2008), “Oxidation of natural gas, natural gas/syngas mixtures, and effect of burnt gas recirculation: Experimental and detailed kinetic modeling”, *J. Eng. Gas Turbines Power* 130 (4), 041502–041511.

Lion S., Taccani R., Vlaskos I., Scrocco P., Vouvakos X. and Kaiktsis L. (2018), “Thermodynamic analysis of waste heat recovery using Organic Rankine Cycle (ORC) for a two-stroke low speed marine Diesel engine in IMO Tier II and Tier III operation”, *Proc. of ECOS*, June 17-22, Guimaraes, Portugal.

Olm, C., Varga, T., Valkó, É., Hartl, S., Hasse, C. and Turányi, (2016), “T. Development of an ethanol combustion mechanism based on a hierarchical optimization approach”, *Int. J. Chem. Kinet.*, 48 (8), 423–441.

Petersen E. L., Davidson D. F. and Hanson R. K. (1999), “Ignition delay times of Ram Accelerator CH₄/O₂/diluent mixtures”, *J. Propul. Power*, 15 (1), 82–91.

Ranzi, E., Cavallotti, C., Cuoci, A., Frassoldati, A., Pelucchi, M. and Faravelli, T. (2015), “New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of n-alkanes”, *Combust. Flame*, 162 (5), 1679–1691.

Ranzi, E., Frassoldati, A., Grana, R., Cuoci, A., Faravelli, T., Kelley, A. P. and Law, C.K. (2012), “Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels”, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 38 (4), 468–501.

Ricardo Software. (2016), Ricardo WAVE n.d., <http://www.ricardo.com/en-GB/Whatwedo/Software/Products/WAVE/>.

Stratsianis, V., P. Kontoulis, and L. Kaiktsis. (2016), “Effects of Fuel Post-Injection on the Performance and Pollutant Emissions of a Large Marine Engine”, *J. Energy Eng.* 142 (2): E4016001.

Περίληψη στα Αγγλικά

The paper presents recent representative results of the authors related to model development and application to the simulation and optimization of flow and combustion in conventional and dual-fuel marine engines. An integrated model for the calculation of marine heavy fuel oil thermophysical properties has been developed by the present research team. The accuracy of the model was verified in terms of experimental measurements of fuel samples, as well as calculations of non-reactive and reactive sprays in a large constant volume combustion chamber, comparing the computational results against corresponding experiments. In terms of NO_x emission reduction studies in conventional marine engines, the present research team has developed a thermodynamic model accounting for the complete operational cycle of a two-stroke marine Diesel engine operating with Exhaust Gas Recirculation (EGR). Finally, modeling of natural gas combustion and formation of pollutant emissions in dual-fuel marine engines requires a proper, reliable and computationally acceptable, representation of combustion chemistry. The present research team has thus developed a methodology for generating an optimized skeletal chemical kinetic mechanism for methane combustion, which can be used in CFD studies of dual-fuel marine engines. The individual models developed are synthesized in the context of optimization studies, for optimizing engine performance and the output in pollutant emissions.