

NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS SCHOOL OF NAVAL ARCHITECTURE & MARINE ENGINEERING DIVISION OF MARINE ENGINEERING

Computational Study and Optimization of Flow and Combustion Processes in Marine Engines Operating with Heavy Fuel Oil

A dissertation submitted for the degree of

Doctor of Philosophy

presented by

Panagiotis I. Kontoulis

Dipl. Naval Architect and Marine Engineer, N.T.U.A.

Born 07th December 1981 Citizen of Greece

Advisory Committee

Lambros Kaiktsis, Professor, N.T.U.A., examiner & supervisor Nikolaos Kyrtatos, Professor, N.T.U.A., co-examiner Konstantinos Boulouchos, Professor, ETH Zürich, co-examiner

Athens, June 2019

This page is intentionally left blank.

Abstract

Heavy Fuel Oil (HFO) is the predominant marine fuel. Its future use will be affected by the global 0.50% sulfur cap entering into force in 2020. It is widely accepted nowadays that Computational Fluid Dynamics (CFD) studies can substantially contribute to understanding and optimizing engine aerothermochemistry, provided that the key in-cylinder processes, namely, spray break-up, evaporation, fuel-air mixing, ignition and combustion, are properly accounted for in the frame of CFD modeling. The present thesis constitutes an extensive computational CFD study of non-reactive and reactive HFO spray physics in the context of marine engines, including applications of optimizing HFO injection in large two-stroke marine engines. The study is supported by experiments.

In this frame, a new integrated model for calculating the thermophysical properties of marine HFO has been developed in the present work. The model considers HFO as an equivalent one-component heavy petroleum fraction with undefined composition, and requires as input four values of fuel bulk properties, commonly measured at fuel bunkering. Thus, the model accounts for any HFO quality stored onboard a vessel. The model predicts a large set of fuel properties relevant for engine CFD studies, including temperature dependence. Further, model validation is performed by means of measurements of a number of properties of different HFO qualities. Next, the new model is applied to calculate the thermophysical properties of seven widely used marine heavy fuel grades as prescribed by ISO 8217:2010. Also, the model is tested with CFD simulations of non-reactive HFO spray flow in a large constant volume chamber, and the results are compared against recent experiments. Here, spray modeling is based on a proper adaptation of the cascade atomization and drop break-up (CAB) model. All computational results are in very good agreement with experiments.

Moreover, the new detailed model of HFO thermophysical properties is utilized for extensive CFD studies of HFO ignition and combustion in a large spray combustion chamber (SCC) and in a large marine engine; results are compared against existing and recent experiments, for two HFO qualities. A new kinetic model accounting for HFO aromaticity is developed and used for ignition modeling. Computational results are reported for reactive spray flow in the SCC, and are in good agreement with experimental data. The effects of HFO preheating on spray development are demonstrated. Finally, simulation results in a large marine engine are in good agreement with experiments in terms of pressure, heat release rate and pollutant emissions. Overall, the present modeling is shown to be appropriate for detailed CFD studies of HFO spray flow and combustion in marine engines.

In a final step, multi-objective optimization is deployed to investigate the effects of a threepulse HFO injection strategy (pilot-, main- and post-injection) on Specific Fuel Oil Consumption (SFOC) and the final concentration of nitric oxides (NO_X) and soot of a large two-stroke marine engine. An optimization procedure including unconstrained and constrained problems is formulated, by coupling the present modified KIVA-3 based CFD code with an optimization tool based on Evolutionary Algorithms (EAs). For both problems, significant reductions in pollutant emissions are attained, in comparison to a reference case characterized by HFO continuous injection; for the constrained problem, the reductions reach 15% and 11% for NO_X and soot, respectively.

In total, the work presented in the current thesis accounts for the following:

- Development of the new model of HFO thermophysical properties. The new model can account for the thermophysical properties of any bunkered oil, based on the commonly measured fuel properties: (a) density, (b) kinematic viscosity, and (c) sulfur content.
- Validation of the new model deploying measurements of HFO samples. Application of the new model to the calculation of thermophysical properties of the HFOs utilized in experiments in a large spray chamber, performed by ETH Zürich and Winterthur Gas

& Diesel (newly named since January 2015, formerly known as Wärtsilä Switzerland Ltd.).

- Extension of the fuel library of the KIVA-3 CFD code by adding several HFO qualities.
- Further development of the ETAB spray model, in the frame of the CAB model, in the KIVA-3 CFD code, for HFO sprays.
- Application of the new model to the calculation of thermophysical properties of marine HFO qualities prescribed by the ISO8217:2010, in particular: 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK.
- CFD studies of non-reactive HFO sprays in a large spray chamber, under evaporating conditions, including a cross-evaluation of the Enhanced Taylor Analogy Break-up (ETAB) and CAB models.
- A new kinetic model accounting for HFO aromaticity, developed and implemented in the KIVA-3 CFD code, for ignition modeling.
- CFD studies of non-reactive non-evaporating and evaporating HFO sprays in a large spray chamber, and comparison against the experiments performed by ETH Zürich and Winterthur Gas & Diesel, as well as other literature data. The effects of HFO preheating on spray development are also demonstrated.
- CFD studies of combustion in SCC for poor and good ignition quality HFOs, and comparison of results against experiments. A very good agreement between computational results and experiments in terms of ignition delay and location is demonstrated.
- CFD studies aiming at formulating a reference case of HFO combustion in a large two-stroke marine engine. Very good trends between computational results and experiments are achieved, in terms of pressure, heat release rate and pollutant emissions. The effect of HFO preheating is also considered.
- CFD studies of HFO combustion in large two-stroke marine engines, implementing advanced injection strategies in the frame of mutli-objective optimization, aiming at the simultaneous minimization of engine emissions and Specific Fuel Oil Consumption (SFOC).

The presentation of work is organized in eleven chapters. **Chapter 1** discusses the characterization of HFO, and presents the motivation for the present work. Detailed information on air pollutants and emission regulations in the context of marine industry is presented in **Chapter 2**. The development and validation of the new integrated thermophysical properties model of HFO are presented in **Chapters 3** and **4**, respectively. **Chapter 5** presents the recent experimental studies utilized for validation, as well as the CFD modeling adopted, including the introduction of HFO ignition model. In **Chapter 6**, the CFD non-reactive and reactive studies of HFO sprays in SCC are presented in detail. The CFD studies of HFO combustion in a two-stroke marine engine (formulation of a HFO reference case) are discussed in **Chapter 7**. **Chapter 8** includes the formulation of optimization studies in terms of advanced HFO injection strategies, as well as the discussion of results. The novelty of the present work is discussed in **Chapter 9**. In **Chapter 10**, the main conclusions of the present study are summarized. Suggestions for future work are presented in **Chapter 11**. Finally, the list of references is presented.

Acknowledgements

In this paragraph, I have the opportunity to express my gratitude towards my wife, Eleni, and my son, Giannis-Marinos, who supported and boosted my efforts all these years to conclude the present Ph.D. thesis project.

I also express my special thanks to my supervisor, Prof. L. Kaiktsis of the National Technical University of Athens, and my friend and colleague, D. Kazangas, for their continuous support and valuable contribution.

Special thanks are also expressed to Prof. N. Kyrtatos of the National Technical University of Athens and Prof. K. Boulouchos of ETH Zurich, as members of the Advisory Committee, for their support, and for many helpful discussions. Special thanks also go to the other members of the Examination Committee, Professors M. Founti, D. Karonis and G. Triantafyllou of the National Technical University of Athens, and Professor Z. Samaras of the Aristotle University of Thessaloniki.

I would like to thank the DNV-GL Classification Society, for financing my doctoral thesis project, while special reference should be made to the corresponding initiative of the late Nikolaos Boussounis to establish funded doctoral thesis projects at the National Technical University of Athens. Additional financial support in the frame of the EU Marie Curie ITN ECCO-MATE project (Grant No 607214) is gratefully acknowledged. The corresponding support of Prof. M. Founti of the National Technical University of Athens and Dr. P.T. Doss is highly appreciated. The support and provision of facilities by the research staff of the European Bioenergy Research Institute (EBRI) at Aston University via the BRISK initiative is also gratefully acknowledged.

I would also like to thank Dr. B. von Rontz of Paul Scherrer Institute for his important support in the form of experimental data, which is highly appreciated. These experimental investigations have been conducted as part of the HERCULES-C project within EC's 7th Framework Program, Contract number SCP1-GA-2011-284354.

I am also grateful to Prof. Ch. Karayanni and Prof. D. Karonis of the National Technical University of Athens for their technical support and for the experimental facilities made available during my doctoral thesis project. Further, I would like to thank you Prof. K. Giannakoglou of the National Technical University of Athens for providing the EASY optimization software.

I would like to thank also Mr. Kyriakopoulos of SGS Greece for providing access to fuel samples.

Finally, I would like to extend my gratitude towards Dr. G. Weisser, Prof. K. Herrmann, Dr. A. Schmid and Prof. F.X. Tanner for their valuable support and fruitful discussions.

This page is intentionally left blank.

Table of Contents

Abstract	i
Acknowledgements	iii
Table of Contents	v
List of Figures	ix
List of Tables	xix
1. Heavy Fuel Oil	1
1.1 Motivation of present work	1
1.2 Crude oil	3
1.2.1 Quality	3
1.2.3 Distillation and product blending	4
1.3 Refining impact on marine fuels	5
1.4 Heavy refining products for marine use	8
1.4.1 IFO 380	8
1.4.2 IFO 180	9
1.5 Marine HFO denomination and specification	10
1.6 Analysis of HFO characteristics	13
1.6.1 Kinematic viscosity	13
1.6.2 Density	13
1.6.3 Flash point	13
1.6.4 Sulfur	14
1.6.5 Carbon residue	14
1.6.6 Water	14
1.6.7 Ash	14
1.6.8 Vanadium and sodium	15
1.6.9 Magnesium	15
1.6.10 Aluminium and silicon	15
1.7 HFO treatment and operating principles	17
2. Air Pollution and Marine Industry	21
2.1 General considerations	21
2.1.1 Greenhouse gases and air pollutants	21
2.2 IMO marine engine emission regulations	22
2.2.1 Background	22
2.2.2 GHG emissions	22
2.2.3 NO _X emission standards	23
2.2.4 Fuel sulfur content standards	24
3. HFO modeling	27

27
61
61
64
64
64
67
72
72
75
99

6.1 Resolution tests	
6.2 Non-reactive HFO spray studies in SCC	101
6.2.1 Effect of ambient temperature in SCC non-reactive flow	107
6.2.2 Effect of HFO preheating in SCC non-reactive flow	107
6.2.3 Effect of swirl in SCC non-reactive flow	109
6.3 Reactive HFO spray studies in SCC	113
6.3.1 Effect of HFO preheating in SCC reactive flow	116
7. CFD studies of HFO combustion in a two-stroke marine engine	119
8. Advanced HFO injection strategies in a two-stroke marine engine	129
8.1 HFO thermophysical properties	131
8.2 Injection profile parameterization	137
8.3 Formulation of optimization problems	139
8.3.1 Design variables	139
8.3.2 Objective functions	140
8.3.2 Objective functions	140 140
8.3.2 Objective functions 8.3.3 Constraints 8.4 Optimization results	140 140 141
 8.3.2 Objective functions 8.3.3 Constraints 8.4 Optimization results 8.4.1 Unconstrained optimization problem	140
 8.3.2 Objective functions	
 8.3.2 Objective functions 8.3.3 Constraints 8.4 Optimization results 8.4.1 Unconstrained optimization problem 8.4.2 Constrained optimization problem 9. Novelty of the present work and contribution to scientific research. 	
 8.3.2 Objective functions 8.3.3 Constraints 8.4 Optimization results 8.4.1 Unconstrained optimization problem 8.4.2 Constrained optimization problem 9. Novelty of the present work and contribution to scientific research 9.1 Proposed methodology 	
 8.3.2 Objective functions	
 8.3.2 Objective functions	
 8.3.2 Objective functions 8.3.3 Constraints 8.4 Optimization results 8.4.1 Unconstrained optimization problem 8.4.2 Constrained optimization problem 9. Novelty of the present work and contribution to scientific research 9.1 Proposed methodology 9.2 New findings of the present thesis 9.3 Journal publications 9.4 Refereed conference publications 	
 8.3.2 Objective functions 8.3.3 Constraints 8.4 Optimization results 8.4.1 Unconstrained optimization problem 8.4.2 Constrained optimization problem 9. Novelty of the present work and contribution to scientific research 9.1 Proposed methodology 9.2 New findings of the present thesis 9.3 Journal publications 9.4 Refereed conference publications 10. Concluding remarks 	140 140 141 141 148 159 159 160 161 162 163
 8.3.2 Objective functions 8.3.3 Constraints 8.4 Optimization results 8.4.1 Unconstrained optimization problem 8.4.2 Constrained optimization problem 9. Novelty of the present work and contribution to scientific research 9.1 Proposed methodology 9.2 New findings of the present thesis 9.3 Journal publications 9.4 Refereed conference publications 10. Concluding remarks 11. Suggestions for future work 	140 140 141 141 148 159 159 160 161 162 163 167

This page is intentionally left blank.

List of Figures

Fig. 1. HFO bunkered in Salvador of Brazil is characterized by the low value of sulfur weight content of 0.37% (author's private record).

Fig. 2. Sketch of typical straight run refining. Diesel* refers to specific atmospheric distillation cutter stocks, and is not related to finished products for engine application (Vermeire 2007).

Fig. 3. Typical complex refining (Vermeire 2007).

Fig. 4. Example of the appearance of asphaltenes separated from residue, utilizing an excess of n-heptane $(n-C_7)$ (Liao et al. 2009).

Fig. 5. Fuel high pressure pump found stuck, with damaged plunger, due to HFO overheating (author's private record).

Fig. 6. Catalytic fines and abrasive debris from a HFO storage tank bottom (author's private record).

Fig. 7. Catalytic fines embedded in the surface of a liner (Henrik et al. 2013).

Fig. 8. Fire found in the under-piston space of a two-stroke marine engine after failure of piston rings, due to consumption of HFO with high content of catalytic fines (author's private record).

Fig. 9. HFO cleaning system including centrifuges (author's private record).

Fig. 10. Relationship between HFO preheating temperature (in °C) and cleaning capacity (% of maximum suction rate) of centrifugal separators (Aström et al. 2005).

Fig. 11. Excessive sludge accumulation found in a centrifugal separator after overhauling (author's private record).

Fig. 12. Marine engine NO_X emissions limits versus maximum operating speed (<u>www.imo.org</u>).

Fig.13. Maximum allowable sulfur weight content in marine fuel oils versus regulation's implementation dates (<u>www.imo.org</u>).

Fig. 14. Measured and computed density as a function of temperature for HFO samples #1a, #1b and #2. A corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 15. Measured and computed kinematic viscosity as a function of temperature for HFO samples #1a, #1b and #2. A corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 16. Kinematic viscosity versus temperature of typical marine fuels (Klianis et al. 2002).

Fig. 17. Measured and computed values of dynamic viscosity as a function of temperature for HFO samples #1b and #2. The calculated curve for HFO sample #1a is also included, as well as a corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ (API 1997).

Fig. 18. Watson characterization factor as function of API gravity and molecular weight (API 1997).

Fig. 19. Computed vapor pressure curves, including corresponding pseudo-critical values, of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 20. Computed heat of evaporation versus temperature for HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 21. Computed surface tension versus temperature for HFO #1a, HFO #1b, HFO #2 and $C_{14}H_{30}$. Experimental results for HFO #1b, HFO #2 (present work), as well as for various HFO qualities and MDO (Fink et al. 2008), are also included.

Fig. 22. Calculated mass diffusion coefficient of evaporated fuel to air versus temperature, at a pressure of 1 atm, for HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. A corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 23. Computed sensible enthalpy of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2 versus temperature, in the gas phase. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also shown (API 1997).

Fig. 24. Chart of the HFO thermophysical properties model developed in the present study. The input data set and the validated correlations used in the model are depicted (Kontoulis et al. 2018).

Fig. 25. Computed temperature dependence of density of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 26. Computed temperature dependence of kinematic viscosity of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 27. Computed temperature dependence of dynamic viscosity of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 28. Computed temperature dependence of vapor pressure of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 29. Computed temperature dependence of heat of evaporation of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 30. Computed temperature dependence of sensible enthalpy of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 31. Computed temperature dependence of surface tension of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 32. Computed temperature dependence of mass diffusivity (fuel vapor to air at 1 atm) of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 33. Spray and combustion test facility developed in the course of the HERCULES project by ETH Zürich and Winterthur Gas & Diesel (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

Fig. 34. Schematic of spray combustion test facility (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

Fig. 35. Constant volume SCC and regenerator (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

Fig. 36. Front and bottom views of a grid used in SCC simulations. The grid consists of sixty three blocks.

Fig. 37. Sketch of a computational cell in the active spray flow regime.

Fig. 38. Computed temperature dependence of density of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 39. Computed temperature dependence of kinematic viscosity of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 40. Computed temperature dependence of dynamic viscosity of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 41. Computed temperature dependence of vapor pressure of HFO #1a and HFO #3, including the pseudo-critical point. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 42. Computed temperature dependence of heat of evaporation of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 43. Computed temperature dependence of enthalpy of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 44. Computed temperature dependence of surface tension of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 45. Computed temperature dependence of diffusivity (fuel to air) of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 46. Sketch of break-up of a full-cone fuel spray (Baumgarten 2006).

Fig. 47. Secondary break-up regimes (Baumgarten 2006).

Fig. 48. Secondary break-up regimes defined in terms of the Weber and Ohnesorge numbers, for various fuels and engine conditions (Faeth et al. 1995). The HFO for the experimental conditions considered in the present study is also included. The adopted

transition Weber number value of 350 for the catastrophic regime is marked (Liu and Reitz 1993).

Fig. 49. Sketch of deformed fuel drop and of the forced damped spring-mass system utilized in the TAB model (Baumgarten 2006).

Fig. 50. Proportionality constant K_{bu} versus Weber number for the ETAB and CAB models. The optimal K_{bu} curve corresponding to the present studies of HFO sprays is also included.

Fig. 51. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³): Calculated HFO penetration length versus time, utilizing the CAB and ETAB models, for two different IDSD, corresponding to a power law and a monodisperse IDSD. The power law IDSD for the CAB and the ETAB model is characterized by values of the exponent n equal to 1.5 and 0.5, respectively. The corresponding experimental curve of von Rotz et al. (2011) is also included.

Fig. 52. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³): color-coded contours of HFO vapor mass fraction at a plane including the injector, at 1.5 ms after SOI, utilizing the CAB and ETAB models for two different IDSD, corresponding to a power law IDSD and a monodisperse IDSD. The power law IDSD for the CAB and the ETAB model is characterized by values of the exponent n equal to 1.5 and 0.5, respectively.

Fig. 53. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³): HFO spray penetration length time history using the CAB model, for power law IDSD, for different values of the exponent n. The corresponding experimental curve of von Rotz et al. (2011) is also included.

Fig. 54. Geometric collision parameters (Baumgarten 2006).

Fig. 55. Droplet collision regimes as function of the collision Weber number and impact parameter (left), and the corresponding mechanisms (right) (Baumgarten 2006).

Fig. 56. The simplified system of characteristic times τ_1 , τ_2 and τ_3 representing the low, medium and high temperature ignition chemistry regimes, as suggested by Weisser et al. (1998) to describe the overall ignition delay, τ .

Fig. 57. P=90 bar, φ =1 : experimental (mean values) and calculated ignition delay times as a function of temperature for HFO #1a, HFO #3, and two fuels with CCAI value in the upper and low limit of the range considered in Klianis et al. (2002). Corresponding data for n-heptane (C₇H₁₆) are also included (Weisser et al. 1998).

Fig. 58. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1a: calculated fuel penetration length versus time for three different computational grids, using the adapted CAB model. The time step value is 10-5 s. The corresponding experimental curve of von Rotz et al. (2011) is also included.

Fig. 59. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1a: color-coded contours of gas velocity and fuel vapor mass fraction at the horizontal plane including the injector, 3 ms after SOI, for three computational grids.

Fig. 60. Computed time history of penetration length using HFO #1, for Case 1, Case 2 and Case 3, corresponding to gas density of 33.7 kg/m³, 22.5 kg/m³ and 11.2 kg/m³, respectively (non-reactive evaporating conditions). All Cases are characterized by swirling gas flow. The corresponding experimental curves of von Rotz et al. (2011) are also included.

Fig. 61. Cases 1 and 3 (evaporating sprays) using the CAB model and HFO #1a: color-coded contours of gas velocity at the horizontal plane including the injector, at representative time instants after SOI.

Fig. 62. Cases 1 and 3 (evaporating sprays) using the CAB model and HFO #1a: color-coded contours of HFO vapor mass fraction at the horizontal plane including the injector, at representative time instants after SOI.

Fig. 63. Cases 1 and 3 (evaporating sprays) using the CAB model and HFO #1a: top view of spray structure and color-coded indications of HFO droplet velocity, at representative time instants after SOI.

Fig. 64. Cases 1 and 3 (evaporating sprays) using the CAB model and HFO #1a: top view of spray structure and color-coded indications of HFO droplet SMD, at representative time instants after SOI.

Fig. 65. Color-coded contours of HFO #1a vapor mass fraction at a plane including the injector, at 5.0 ms after SOI, for the non-evaporating Case 4 (left) and the evaporating Case 1 (right).

Fig. 66. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m^3) using HFO #1a: Computed fuel spray penetration length versus time, for different values of preheating temperature. The experimental results of von Rotz et al. (2011), corresponding to an initial fuel temperature of 120 °C, are also included.

Fig. 67. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1: color-coded contours of fuel vapor mass fraction for initial fuel temperatures of 80 °C, 120 °C and 157 °C, at 3 ms after SOI, in a plane located at the height of the injector.

Fig. 68. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1: bottom view of spray structure and color-coded indications of SMD, for initial fuel temperatures of 80 $^{\circ}$ C, 120 $^{\circ}$ C and 157 $^{\circ}$ C, at 3 ms after SOI.

Fig. 69. Computed time history of HFO #1a penetration length, for Case 1 (evaporating spray, swirling gas flow), corresponding to a gas density of 33.7 kg/m³, using the CAB model. The corresponding experimental curve of von Rotz et al. (2011), as well as the computed curve for the same conditions and no swirl, are also included.

Fig. 70. Color-coded contours of gas velocity at a plane including the injector, for HFO #1a, Case 1 (swirling gas flow) and a corresponding case with no swirl, at representative time instants after SOI.

Fig. 71. Color-coded contours of HFO #1a vapor mass fraction at a plane including the injector, for Case 1 (swirling gas flow) and a corresponding case with no swirl, at representative time instants after SOI.

Fig. 72. Computed and measured ignition delay times versus chamber air temperature for Case 5 (915 K, 91.5 bar), Case 6 (800 K, 80 bar) and Case 7 (780 K, 78 bar), all corresponding to gas density of 34.7 kg/m³, for HFO #1a and HFO #3.

Fig. 73. Computed and measured ignition location (distance from nozzle tip) versus chamber air temperature for Case 5 (915 K, 91.5 bar), Case 6 (800 K, 80 bar) and Case 7 (780 K, 78 bar), all corresponding to gas density of 34.7 kg/m³, for HFO #1a and HFO #3.

Fig. 74. Shadow images taken at the ignition initiation for Case 5 (915 K, 91.5 bar), Case 6 (800 K, 80 bar) and Case 7 (780 K, 78 bar), for HFO #1a and HFO #3. Corresponding visualizations of CFD results are also presented, including the iso-surface of Cig = 1.0.

Fig. 75. Case 5 (915 K, 91.5 bar): Computed and measured ignition delay times versus chamber air temperature for HFO #1a. Three values of fuel preheating temperature are considered.

Fig. 76. Case 5 (915 K, 91.5 bar): Computed and measured ignition location (distance from nozzle tip) versus chamber air temperature for HFO #1a. Three values of fuel preheating temperature are considered.

Fig. 77. Case 5 (915 K, 91.5 bar): Bottom view of computed HFO #1a spray structure at ignition, including the iso-surface of Cig = 1.0. Three values of fuel preheating temperature are considered.

Fig. 78. Case 5 (915 K, 91.5 bar): color-coded contours of temperature for preheating temperatures of HFO #1a at 20 ms after SOI, in a plane located at the height of the injector. Three values of fuel preheating temperature are considered.

Fig. 79. Total injected mass (left y-axis) and SOI (right y-axis) versus LHV (HFO #1a, HFO #3 and MDO), for two-stroke marine engine simulations at full load.

Fig. 80. Computed injection profiles for HFO #1a, HFO #3. The experimental injection profile for the case of MDO is also included.

Fig. 81. Computed cylinder pressure traces for HFO #1a, HFO #3 and $C_{14}H_{30}$. The pressure history for experiment with MDO is also included.

Fig. 82. Computed rate of heat release traces for HFO #1a, HFO #3 and $C_{14}H_{30}$. The corresponding histories for MDO and HFO experiments are also included (Stratsianis et al. 2016, de Hoog et al. 2010).

Fig. 83. Computed pressure history for HFO #1a, for three values of fuel preheating temperature.

Fig. 84. Computed rate of heat release traces for HFO #1a, for three values of fuel preheating temperature.

Fig. 85. Computed histories of space-averaged NOx concentrations for HFO #1a, for two values of fuel preheating temperature. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included, as well as a measured value of final NOx concentration with MDO.

Fig. 86. Computed histories of total soot mass for HFO #1a, for two values of fuel preheating temperature. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included.

Fig. 87. Color-coded contours of temperature and equivalence ratio for $C_{14}H_{30}$, and HFO #1a at two values of fuel preheating temperature. A horizontal plane very close to the injectors is considered, at selected time instants.

Fig. 88. Color-coded contours of NOx mole fraction and soot density for $C_{14}H_{30}$, and HFO #1a at two values of fuel preheating temperature. A horizontal plane very close to the injectors is considered, at selected time instants.

Fig. 89. HFO #1a at two values of fuel preheating temperature and $C_{14}H_{30}$: T- ϕ maps, including T, ϕ values of all computational cells, at selected time instants.

Fig. 90. GUI format of the HFO thermophysical properties model reported in Kontoulis et al. (2018): Measured and computed values of thermophysical properties of HFO #4, used in the sea trials of the RT-58T-B marine engine. Corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are included for reference (API 1997).

Fig. 91. Computed temperature dependence of density of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 92. Computed temperature dependence of kinematic viscosity of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 93. Computed temperature dependence of dynamic viscosity of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 94. Computed temperature dependence of vapor pressure of HFO #4, including the pseudo-critical point. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 95. Computed temperature dependence of heat of evaporation of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 96. Computed temperature dependence of sensible enthalpy of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 97. Computed temperature dependence of surface tension of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 98. Computed temperature dependence of mass diffusivity (fuel to air) of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Fig. 99. Computed reference injection profile of continuous injection of HFO #4. The experimental injection profile for the case of MDO is also included.

Fig. 100. Sketch of a three-pulse injection profile with pilot, main and post injection; the five design variables (SOPiI, PiMF, PiDwell, PoDwell, PoMF) are indicated with arrows.

Fig. 101. Pareto front, presented in terms of normalized values of final NO_X concentration and SFOC, for the unconstrained optimization problem.

Fig. 102. Pareto front, presented in terms of normalized values of final soot concentration and SFOC, for the unconstrained optimization problem.

Fig. 103. Pareto front presented in terms of normalized values of final NO_X and soot concentrations (NO_X - soot trade-off), for the unconstrained optimization problem.

Fig. 104. Unconstrained optimization using HFO #4: fuel injection profiles for optimal cases A and B, and for reference case.

Fig. 105. Unconstrained optimization using HFO #4: Computed cylinder pressure traces for optimal cases A and B, and for reference case.

Fig. 106. Unconstrained optimization using HFO #4: Computed ROHR traces for optimal cases A and B, and for reference case. An experimental ROHR trace for HFO operation is also included (de Hoog et al. 2010).

Fig. 107. Unconstrained optimization using HFO #4: Computed histories of space-averaged NO_x concentration for optimal cases A and B, and for reference case.

Fig. 108. Unconstrained optimization using HFO #4: Computed histories of total soot mass for optimal cases A and B, and for reference case.

Fig. 109. Pareto fronts in terms of normalized values of final NO_X concentration and SFOC, for both the unconstrained and constrained optimization problem.

Fig. 110. Pareto fronts in terms of normalized values of final soot concentration and SFOC, for both the unconstrained and constrained optimization problem.

Fig. 111. Pareto fronts in terms of normalized values of final NO_X and soot concentrations (NO_X - soot trend-off), for both the unconstrained and constrained optimization problem.

Fig. 112. Constrained optimization using HFO #4: Fuel injection profiles for optimal Case C and for reference case.

Fig. 113. Constrained optimization using HFO #4: Computed cylinder pressure traces for optimal Case C and for reference case.

Fig. 114. Constrained optimization using HFO #4: Computed ROHR traces for optimal Case C and for reference case. An experimental ROHR trace for HFO operation is also included (de Hoog et al. 2010).

Fig. 115. Constrained optimization using HFO #4: Computed histories of space-averaged NO_x concentration for optimal Case C and for reference case.

Fig. 116. Constrained optimization using HFO #4: Computed histories of total soot mass for optimal Case C and for reference case.

Fig. 117. Reference case and optimal Case C (constrained optimization) using HFO #4: color-coded contours of oxygen mole fraction at a horizontal plane very close to the injectors, at selected time-instants.

Fig. 118. Reference case and optimal Case C (constrained optimization) using HFO #4: color-coded contours of temperature and equivalence ratio at a horizontal plane very close to the injectors, at selected time-instants.

Fig. 119. Reference case and optimal Case C (constrained optimization) using HFO #4: color-coded contours of NO_X mole fraction and soot density at a horizontal plane very close to the injectors, at selected time-instants.

Fig. 120. Reference case and optimal Case C (constrained optimization) using HFO #4: T- ϕ maps, including local T, ϕ values of all computational cells, at selected time-instants.

Fig. 121. GUI format of the HFO thermophysical properties model reported in Kontoulis et al. (2018).

This page is intentionally left blank.

List of Tables

Table 1. ISO 8217:2010 marine HFO specifications (International Organization forStandardization 2010).

Table 2. Notation regarding the HFO samples considered in the present thesis.

Table 3. Composition for HFO samples #1b and #2 based on the present experiments. Corresponding values for HFO sample #1a, reported in von Rotz et al. (2011), are also included.

Table 4. Results of present experiments for HFO #1b and HFO #2, in terms of acid number, corrosion index, Heating Values and representative thermophysical properties. Corresponding values for HFO sample #1a, reported in von Rotz et al. (2011), are also included.

Table 5. Measured values of thermophysical properties of HFO samples #1a (reported in von Rotz et al. (2011)), #1b and #2. The values form the input data set, as required by the present model. Corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are included for comparison (API 1997).

Table 6. Specific gravity 60F/60F and API gravity of HFO samples #1a, #1b and #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Table 7. Measured HHV and LHV (ASTM D240 2017b) and computed LHV of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding LHV for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Table 8. Correspondence between CCAI values and ignition quality (Klianis et al. 2002).

Table 9. Computed CCAI of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2.

Table 10. Computed molecular weight values of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Table 11. Computed Watson characterization factor and normal boiling point of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are also reported (API 1997).

Table 12. Computed carbon-to-hydrogen atomic ratio of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also presented (API 1997).

Table 13. Computed pseudo-critical temperature and pressure of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding critical values for $C_{14}H_{30}$ are also included (API 1997).

Table 14. Computed acentric factor of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also reported (API 1997).

Table 15. Computed specific heat capacity of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2, at 298.15 K. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also reported (API 1997).

Table 16. Computed enthalpy of formation at 298.15 K of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Table 17. Summary of measured and computed, utilizing the present model, thermophysical properties of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Table 18. Summarized results of temperature dependence of thermophysical properties of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding curves for $C_{14}H_{30}$ are also included (API 1997).

Table 19. Calculated thermophysical properties of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK, as per ISO 8217:2010, using the present model.

Table 20. Features of the meshes utilized in spatial resolution tests.

Table 21. Non-reactive cases computed in the present study.

Table 22. Reactive cases computed in the present study.

Table 23. Injection characteristics, initial fuel temperature and SCC wall temperature.

Table 24. Measured and computed, utilizing the model reported in Kontoulis et al. (2018), values of thermophysical properties of HFO #1a and HFO #3, used in experiments. Corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are included for reference (API 1997).

Table 25. Constants of the CAB and ETAB fuel spray models.

Table 26. Optimal values of CAB model constants for HFO.

Table 27. Extended ignition model constant values for HFO, as computed in the present study. The corresponding values for n-heptane (C_7H_{16}) are also included (Weisser et al. 1998). Ignition delay is in seconds, and temperature in deg. Kelvin. The reference pressure is 1 bar.

Table 28. Reactions and kinetics constants of NO_X mechanism (Weisser 2001).

Table 29. Values of soot model constants (Douladiris 2010).

Table 30. Engine characteristics.

Table 31. Engine operational parameters and injection characteristics for HFO #1a, HFO #3 and MDO.

Table 32. Measured and computed, utilizing the model reported in Kontoulis et al. (2018), values of thermophysical properties of HFO #4, used in sea trails. Corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are included for reference (API 1997).

Table 33. Engine operational parameters and injection characteristics for a reference case of continuous injection of HFO #4.

 Table 34. Basic characteristics of the EA methodology.

 Table 35. Characteristics of binary coding of design variables, including accuracy.

Table 36. Values of design variables, objective functions, as well as computed maximum cylinder pressure and normalized work output, for all optimal solutions of the unconstrained optimization problem, which constitute the Pareto front.

Table 37. Values of design variables, objective functions, as well as computed maximum cylinder pressure and normalized work output, for all optimal solutions of the constrained optimization problem, which constitute the Pareto front.

This page is intentionally left blank.

1. Heavy Fuel Oil

1.1 Motivation of present work

Marine Heavy Fuel Oil (HFO) is produced by blending visbroken residue, light petroleum products and performance additives, at the refinery, and its handling demands **heating**. Marine HFOs are widely known as Intermediate Fuel Oils (IFOs); they are characterized by high molecular weight, as well as high density and kinematic viscosity values at ambient temperature (Vermeire 2007). The main HFO content, the visbroken residue, consists of heavy hydrocarbon structures (asphaltenes and resins), sulfur (S), and metals, such as sodium (Na) and vanadium (V). Partially due to storage requirements, refineries offer a limited number of HFO grades, commonly named by the value of kinematic viscosity at a temperature of 323.15 K (50 °C). For instance, HFO 380 has a kinematic viscosity of 380 mm²/s (cSt) at 50 °C (Ancheyta 2013).

The vessels powered by internal combustion engines burning HFO dominate commercial shipping. The advantages of two-stroke or four-stroke engine operation with HFO include high cost effectiveness and low wear; the latter can be attributed to the high alkalinity cylinder lubricants that neutralize the acids generated by the combustion of high sulfur heavy fuels. It is noted that dual-fuel engines, recently available in the maritime sector, are also capable to operate on HFO, in accordance with their multi-fuel flexibility. The future use of HFO in the marine industry is affected by the imposed legislation on HFO sulfur content, which affects SO_x pollutant emissions. The existing specifications for marine HFOs are included in ISO 8217:2010, accommodating developments in marine engine technology, crude oil refining processes, as well as in pollutant emission regulations (International Organization for Standardization 2010).

Despite the fact that the quality of available HFO is deteriorating, high efficient and low pollutant combustion of marine engines must be achieved. Burning of HFO has been the subject of detailed investigation in the course of laboratory research and engineering development. Nowadays, Computational Fluid Dynamics (CFD) is used to study engine aerothermochemistry and to support engine development, providing insight to the in-cylinder flow and combustion processes. Thus, CFD-based studies are essential for studying and optimizing combustion in marine engines. To this end, a reliable representation of HFO thermophysical properties is necessary, which should be also convenient in terms of its implementation and use in CFD codes. Main in-cylinder processes include spray break-up, evaporation, fuel-air mixing, ignition and combustion. In CFD simulations, the performance of physical models accounting for the above processes depends critically on the accuracy of the values of fuel thermophysical properties utilized. These fuel properties include:

- 1. Density
- 2. Diffusion coefficient (fuel to air)
- 3. Dynamic viscosity
- 4. Enthalpy (sensible)
- 5. Enthalpy of formation
- 6. Heat of evaporation
- 7. Molecular weight
- 8. Surface tension
- 9. Vapor pressure

The complex chemical composition of marine HFO can hardly be specified, especially the residual fraction, which consists of complex heavy solid compounds, known as asphaltenes, kept in colloidal suspension. The thermophysical properties of asphaltenes are hard to calculate. A detailed determination of HFO composition is hardly feasible, as it contains a

large number of hydrocarbons, with a wide range of molecular weights, and dissimilar structures (Rahimi and Gentzis 2006). Inevitably, modeling of HFO composition with certain, even high, number of model hydrocarbons can only be an approximation of the actual fuel.

The present work aims at developing an integrated model of marine HFO thermophysical properties, accounting for different HFO qualities, for engineering CFD studies in marine engines. The model, utilizing different experimental and theoretical investigations of heavy petroleum fractions, considers marine HFO as an equivalent one-component heavy fraction of undefined composition; the model thus follows an approach widely adopted in literature CFD studies for distillate fuels (e.g. approximation of Marine Diesel Oil (MDO) properties with those of n-tetradecane – $C_{14}H_{30}$) (Andreadis et al. 2011). Hence, a quantification of proportions of individual hydrocarbons is not required in the present model. The model input consists of four thermophysical property values commonly determined at fuel bunkering, while its output is a series of additional properties required in engine CFD simulations, including temperature dependence. Thus, the model may account for any HFO quality used in marine engines.

Particular objectives of the present investigation are: (a) to develop and validate a new model of HFO thermophysical properties, valid for any marine HFO grade, (b) to properly adapt the CAB model for HFO spray simulations, (c) to introduce a proper ignition model, taking into account HFO aromaticity, (d) to characterize the dynamics of non-reactive and reactive HFO sprays under conditions relevant for large marine engines, and (e) to investigate the impact of advanced injection strategies on the performance of a large two-stroke marine engine operating with HFO, by implementing muti-objective optimization studies, aiming at the simultaneous reduction of engine emissions and Specific Fuel Oil Consumption (SFOC).

1.2 Crude oil

Crude oil, known as petroleum, is a fossil flammable liquid complex mixture of many different hydrocarbons and small amounts of contaminants. The composition of crude oil can vary significantly, depending on its origin.

1.2.1 Quality

The quality of crude oil is closely related to the geographical area from which it is recovered. There are three classification criteria of crude oil, listed below:

a. Prevailing hydrocarbons

- Paraffinic crude oil
- Naphthenic crude oil
- Asphaltenic (aromatic) crude oil

Crude oil contains all the above mentioned hydrocarbons, however, its characterization is based on the prevailing type of hydrocarbons. For instance, Saudi Arabian crude oil is characterized as paraffinic, due to the high content of paraffin-based hydrocarbons.

b. Sulfur content

Nowadays, the sulfur content of crude oil constitutes another significant classification factor, due to the environmental concern regarding the negative impact of fossil fuel combustion on ecosystems. Thus, crude oil is categorized as:

- Low sulfur
- High sulfur

For example, South America crude oil is characterized as low sulfur, and contributes to the production of low sulfur HFOs. Fig. 1 presents a low sulfur content (0.37%) HFO bunkered in Salvador of Brazil. The content of sulfur in crude oil directly affects the (high) cost of sulfur removal in the refinery (desulfurization), giving low sulfur content end products.

Bunker Port & Date :	SALVADOR-BRAZIL ; 20-Dec-2018
Bunker Supplier :	BR PETROBRAS
Barge :	LUIZ REBELO III
Sample Grade :	IF0380-RMG380
Sample Seal No :	W766365 - Sealed
Bunker Quantity :	200.205 MT
Bunker Density @15°C :	947.9 kg/m3
Bunker Viscosity @50°C :	317.4 cSt
Sulphur Content :	0.37 %

Fig. 1. HFO bunkered in Salvador of Brazil is characterized by the low value of sulfur weight content of 0.37% (author's private record).

c. API gravity

The American Petroleum Institute (API) classifies crude oils based on their density; crude oils characterized by low density values have a higher commercial value. A certain index, the

API gravity, has, thus, been introduced for characterizing crude oil quality, and is defined in Chapter 3. The lower the density of a crude oil, the higher its API gravity.

1.2.3 Distillation and product blending

Refinery distillation is based on the different boiling points that characterize the various components of the complex crude oil hydrocarbon mixtures. The purpose of distillation is the production of petroleum fractions according to the market's demand. The desired products are mainly gasoline, kerosene, jet fuel, gasoil, diesel and heavy petroleum fractions.

To obtain the final petroleum products, a lot of sub-processes, such as mixing, take place during the different distillation stages. Mixing of petroleum products during refining is known as **product blending**, and is intended to form valuable products that meet the ever changing market demand.

Marine fuel oil formation is also based on product blending. Particularly, blending of light petroleum fractions with distillation residual is performed; depending on the constituents, distillate marine fuel oil or marine HFO is formed. Marine HFO, widely known as IFO, is thus a blend of petroleum fractions.

1.3 Refining impact on marine fuels

Petroleum refining is a complex process, involving multiple operations. The distillation process is varied, relying on the technology and know-how of the refinery; the targeted quality of the final products, as marine distillate fuels or HFO, evidently depends on the origin of crude oil.

The refinery industry adopts two main refining processes (Vermeire 2007):

- Straight run refining
- Complex refining

The quality of marine fuel products resulting from these refining processes is quite different. The straight run refining is exclusively based on atmospheric distillation, producing marine fuels with better quality than complex refining. A typical straight run refining is shown in Fig. 2.



Fig. 2. Sketch of typical straight run refining. Diesel* refers to specific atmospheric distillation cutter stocks, and is not related to finished products for engine application (Vermeire 2007).

The distillates of the straight run refining are:

a. Straight run stocks for marine fuel blending

Light diesel, heavy diesel, and straight run residue.

b. Straight run Marine Gas Oil (MGO) and distillate Marine Diesel Oil (MDO)

MGO and distillate MDO are derived from mixing of kerosene, light and heavy diesel cutter stocks. Moreover, specific distillate marine diesel could contain 10% up to 15% of atmospheric residue.

c. Straight run IFO 380¹

This grade is obtained by blending the atmospheric residue fraction characterized by typical viscosity of about 800 cSt at 50°C with a gasoil fraction.

d. Straight run IFOs with lower viscosity than 380 cSt at 50°C

Lower grades of IFO, such as IFO 180², are derived from the blending of IFO 380 and MGO or MDO.

¹The coding of "IFO 380" corresponds to IFO with a kinematic viscosity value of 380 mm²/s (cSt) at 50°C.

²The coding of "IFO 180" corresponds to IFO with a kinematic viscosity value of 180 mm²/s (cSt) at 50°C.

Straight run IFOs are characterized by favorable ignition delay, due to their high content in paraffinic hydrocarbons present in both atmospheric residue and light cutter stocks. Further, straight run IFOs have low values of density, ensuring easy and efficient onboard fuel handling and purification.

Nonetheless, modern industrialized countries consume huge quantities of light petroleum fractions, such as jet fuel, gasoline and gasoil. This demand corresponds to further refining processing of straight run residue, and makes the whole refining process more complex. The complex refining process produces residue of about 10% of the crude oil feed, instead of the 50% characterizing the straight run refining process. The quality and composition of complex refining residue is inferior to that of straight run refining, due to the lack of paraffinic hydrocarbons, and the excess of aromatic hydrocarbons, asphaltenes, sulfur and metals. Nowadays, complex refining is the prevailing refining process worldwide. A typical complex refining process is shown in Fig. 3.

A typical complex refining includes separate operations, in particular:

- Atmospheric distillation of crude oil.
- Vacuum distillation of atmospheric residue.

Catalytic and thermal (visbreaking) cracking of products obtained from the vacuum distillation unit.



Fig. 3. Typical complex refining (Vermeire 2007).

The distillates of complex refining are:

a. Marine gasoil (MGO/DMA)

Marine gasoil (MGO/DMA) is obtained from blending of light cutter stocks of atmospheric distillation with Light Cycle (Gas) Oil (LC(G)O) from the Fluidized bed Catalytic Cracking (FCC) procedure; it contains about 60% aromatics due to the high aromatic nature of LC(G)O. The density will typically be close to 860 kg/m³ at 15° C. The performance and handling requirements of complex refining gasoil are similar to atmospheric gas oil.

b. Distillate marine diesel (MDO/DMB)

Distillate marine diesel (MDO/DMB) typically has inferior ignition characteristics than marine gasoil (MGO/DMA), and a higher density, due to its higher percentage of LC(G)O.

c. Blended marine diesel (MDO/DMC)

The complex refining blended marine diesel (MDO/DMC) differs substantially from straight run distillate marine diesel, because it could have a high content of visbroken residue. Consequently, thoughtful attention must be paid by the crew, so as to prevent stability problems during storage and performance problems during operation.

d. IFO 380

Grade IFO 380 is a blending petroleum product. It is made from visbroken residue, Heavy Cycle Oil (HCO), LC(G)O and performance additives. IFO 380 is widely used in the marine industry.

e. IFOs with viscosity between 180 and 380 cSt at 50°C

HFO grades with viscosity varying between 180 and 380 cSt at 50° C are derived from blending of IFO 380 with marine gasoil (MGO/DMA), distillate marine diesel (MDO/DMB) or LC(G)O. The composition of blending is specified so as to meet desired values of fuel properties, as density, set by the existing legislation for marine fuels.

f. IFOs with viscosity lower than 180 cSt at 50°C

HFO grades with viscosity lower than 180 cSt at 50°C are manufactured from blending of IFO 180 with suitable refining cutter stocks, such as marine gasoil (MGO/DMA). The mixing composition is dependent on the required fuel properties, such as density and viscosity.

1.4 Heavy refining products for marine use

The high demand for light products, such as gasoline, drives the refining industry to complex refining. Therefore, the modern refining process consists in the combination of atmospheric and vacuum distillation via implementing further product handling operations, such as visbreaking. Taking into account storage requirements, the refinery industry offers only two grades of HFO for marine use. Further, the ISO standards set limits regarding fuel properties, to avoid uncontrollable blending procedures. These widely used marine HFO grades are:

- IFO 380
- IFO 180

The above mentioned grades are considered as HFO, due to their high values of density (at 15°C) and kinematic viscosity (at 50°C).

1.4.1 IFO 380

IFO 380 is derived from product blending at the refinery. This product blending procedure concerns mixing of visbroken residue, HCO, LC(G)O and performance additives. The visbroken residue content is characterized by heavy hydrocarbon structures, sulfur (S) and metals, such as sodium (Na) and vanadium (V). The sulfur (S), sodium (Na) and vanadium (V) contents depend on crude oil origin. The heavy hydrocarbon structures are known as **asphaltenes**. In chemistry, the definition of asphaltenes is set as (Liao et al. 2009):

"Asphaltenes are residual fuel components insoluble in n-heptane (n-C7), but soluble in hot toluene."

The ignition and combustion characteristics of fuels with high content in asphaltenes are poor, due to the high aromaticity of asphaltenes. It is noted that HFO aromaticity is characterized using the Calculated Carbon Aromaticity Index (CCAI). Further, asphaltenes affect the fuel oil lubrication properties; high asphaltene content could lead to fuel high pressure pump sticking, in extreme cases. Fuels with a high content of asphaltenes may tend to emulsify with water, so the creation of corrosive sulfur oxides inside combustion chamber is enhanced (Kyrtatos 1993). Fig. 4 illustrates the appearance of asphaltenes separated from residue, utilizing an excess of n-heptane (n-C₇).



Fig. 4. Example of the appearance of asphaltenes separated from residue, utilizing an excess of n-heptane (n-C7) (Liao et al. 2009).

HCO is characterized by typical values of viscosity close to 130 cSt at 50°C, density of 1020 kg/m³ at 15°C and a content in aromatic hydrocarbons of approximately 60%. HCO is

the heavy fraction derived from the FCC unit. The catalytic action of this unit is based on aluminum (Al) and silicon (Si). These catalysts are expensive, and thus their recovery procedure is performed. However, the recovery efficiency of aluminum (Al) and silicon (Si) is low; thus, small amounts of these catalysts remain in HCO. Consequently, corresponding small amounts, known as catalyst fines, are detected in IFO 380. The aromaticity of HCO assists in improving stability of asphaltenes, but deteriorates fuel ignition. LC(G)O has typical values of viscosity close to 2.5 cSt at 50°C, and is characterized by the same aromaticity as HCO. LC(G)O, as a light FCC product, has a density of 940 kg/m³ at 15°C, and plays a significant role in achieving the targeted value of final fuel density.

1.4.2 IFO 180

IFO 180 is produced from product blending of IFO 380 with marine gasoil (MGO/DMA), distillate marine diesel (MDO/DMB) or light cycle (gas)oil (LC(G)O. A suitable blending composition is followed, to avoid stability problems related to asphaltene precipitation. Thus, IFO 180 contains a higher content of paraffinic hydrocarbons, in comparison to IFO 380, and is characterized by improved ignition characteristics. The high content of lighter fractions makes IFO 180 rather expensive. Nonetheless, IFO 180 may be found with a higher content of catalyst fines than IFO 380, because of its higher content in FCC unit light components, which are rich in catalyst fines.

1.5 Marine HFO denomination and specification

In the past, the British Standards Organization (BS MA 100) and Conseil International de Machines à Combustion (CIMAC) have published specific requirements regarding marine fuel oil properties. Today, the denomination and specification of marine fuel oil are defined by ISO, in order to control the final mixture quality at the refinery. ISO specifications are regularly revised, to accommodate changes in marine engine technology and in crude oil refining processes, as well as to meet the emission regulations. In particular, the ISO 8217:2010 specifications define the requirements for petroleum fuels utilized in marine engines and boilers, guiding interested parties, such as marine equipment designers, fuel suppliers and operators. Table 1 presents the ISO 8217:2010 specifications for marine HFO (IFO grades) (International Organization for Standardization 2010).

Recently, new specifications have been released under the ISO 8217:2017, introducing significant changes in marine light fuels in terms of allowing for bio-fuel blends, with a corresponding lower allowable sulfur content. Regarding HFO, the specifications of 8217:2010 are maintained in ISO 8217:2017, except for the content of Used Lubricating Oil (ULO).

Cha	racteristic	Unit	ISO 8217:2010 marine HFO specifications												
				RMA	RMB	RMD	RME	RMG RMK					Test method		
				IFO 10	IFO 30	IFO 80	IFO 180	IFO 180	IFO 380	IFO 500	IFO 700	IFO 380	IFO 500	IFO 700	
Viscosity	y at 50°C	mm²/s (cSt)	max.	10	30	80	180	180	380	500	700	380 500 700		ISO 3104	
Density	at 15°C	kg/m ³	max.	920	960	975	991	991 1010					ISO 3675		
CCAI -			max.	850	860	860	860	870 870					calculated		
Sulfur		% (m/m)	max.		Statutory requirements								ISO 8754		
Flash po	pint	°C	min.	60	60	60	60	60				ISO2719			
Hydroge	n sulfide	mg/kg	max.	2	2	2	2		2	2			2		-
Acid number mg KOH/g max. 2.5 2.5				2.5	2.5	2.5				2.5			-		
Total see	diment, aged	% (m/m)	max.	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1 0.1					ISO 10307-2		
Carbon residue, micro		% (m/m)	max.	2.5	10	14	15	18				20		ISO 10370	
Pour	Winter	°C	max.	0	0	30	30	30				30		ISO 3016	
point	Summer	°C	max.	6	6	30	30	30				30		ISO 3016	
Water		% (v/v)	max.	0.3	0.5	0.5	0.5	0.5 0.5		0.5		ISO 3733			
Ash		% (m/m)	max.	0.04	0.07	0.07	0.07	0.1				0.15		ISO 6245	
Vanadium		mg/kg	max.	50	150	150	150	350				450		ISO 14597	
Sodium		mg/kg	max.	50	100	100	50	100			100		-		
Aluminium + Silicon		mg/kg	max.	25	40	40	50	60 60				ISO 10478			
Used lubricating oil (ULO)		mg/kg	max.		The fuel shall be free of ULO							-			

 Table 1. ISO 8217:2010 marine HFO specifications (International Organization for Standardization 2010).

This page is intentionally left blank.
1.6 Analysis of HFO characteristics

1.6.1 Kinematic viscosity

Kinematic viscosity cannot be considered a quality criterion in its own for HFOs, while it also characterizes the flow and injection capability. HFOs are characterized by high values of viscosity at ambient temperature. Consequently, appropriate heating is essential for satisfactory pumping, settling, injection and atomization. Fuel injectors operate satisfactorily when the HFO has a viscosity between 8 cSt (engine applications) and 27 cSt (boiler and incinerator application). It should be noted that a substantially high value of HFO temperature leads to wear of both fuel injectors and pumps, and even to sticking, because of HFO boiling inside the fuel oil system; Fig. 5 shows a damaged fuel high pressure plunger. On the other hand, HFO low preheating temperature, which results in high value of viscosity, contributes to minimal fuel break-up and atomization. The spray jet is thus characterized by high penetration length, and the fuel is insufficiently evaporated and mixed with the compressed air; hence, incomplete combustion occurs, while liquid fuel impinges directly onto the piston and the liner.



Fig. 5. Fuel high pressure pump found stuck, with damaged plunger, due to HFO overheating (author's private record).

1.6.2 Density

Density is closely related to HFO quality, since fuels derived from complex refining process are characterized by a higher content of visbroken residue. HFOs with high density are usually found with an excess of asphaltenes and aromatic hydrocarbons. The ignition and combustion characteristics of higher density fuels may be poor. A low viscosity value in combination with a high density value may indicate poor ignition quality of such a fuel. The density of a fuel contributes to the water separation ability of the fuel, during centrifuging. The limits of 991 and 1010 kg/m³ (Table 1) must be taken into account, when the type of centrifuges is selected. Moreover, the value of HFO density affects the mass flow rate of fuel injection pumps, since the pumps are volumetric. Density is normally measured and given at 15°C, but the effect of temperature is always considered for bunkering and consumption calculations.

1.6.3 Flash point

The flash point limit is set as a safeguard against fire only. As a result, the HFO temperature must be kept below the flash point in the storage, settling and service tanks.

1.6.4 Sulfur

The sulfur content is an important characteristic, because of environmental and mechanical reasons. The sulfur oxides, SO_x, produced during combustion process constitute pollutant emissions. Present legislation controls such emissions by imposing specific limits in the sulfur content of the bunkered HFO. Further, sulfur in fuel contributes to acid corrosion. Acid corrosion is essentially the result of a condensation of the produced sulfur trioxide (sulfuric acid), which is the main cause of wear in cylinder liners. The corrosion is caused by the combination of water being present during the combustion process, and a thermodynamic condition where the temperature and pressure are below the dew point curve of sulfur trioxide. Even though the water mist catcher of the scavenge air cooler removes water droplets, the scavenge air is saturated with water vapour produced during the combustion process. The corrosive effect of sulfuric acid during combustion is counteracted by high alkalinity cylinder lube oils and by temperature control of the combustion chamber walls (by monitoring the cooling water temperature). The use of a cylinder lubricating oil with high alkalinity (in terms of equivalent mg KOH/g, expressed as Total Base Number (TBN)) is the solution to the corrosive effects, since it neutralises the acidic products of combustion deposits on the surface of the cylinder liner. The TBN of the cylinder lubricant is also an indication of the lubricant's detergent capability, ensuring clean and freely moving piston rings. Finally, fuels with very low sulfur content are also characterized by low lubricity, and thus their use should be accompanied by suitable chemical additives, to avoid wear of delivery pumps.

1.6.5 Carbon residue

The carbon residue indicates the coke-forming tendency of fuel oil, and is measured as Conradson Carbon Residue (CCR). Fuels with high carbon residue could cause increased fouling of the gas manifolds, necessitating more frequent cleaning, especially of the turbocharger and exhaust gas boiler. Part of the carbon residue corresponds to asphaltenes.

1.6.6 Water

Water in the fuel should be removed by settling and centrifuging before use. This applies especially to salt water, since the sodium content can result in deposits on valves and turbochargers. Sodium can also reach the engine in the form of airborne sea water mist.

1.6.7 Ash

Ash represents solid contaminants as well as metals present in the fuel in soluble compounds (vanadium). Part of the ash could be catalytic fines from the refining process. Such particles are highly abrasive. Solid ash should be removed to the widest possible extent by centrifuging and cleaning by installing a fine filter before engine inlet (e.g. 5 - 10 µm).

1.6.8 Vanadium and sodium

Vanadium is present in the fuel in soluble compounds and, consequently, cannot be removed. Vanadium, in combination with sodium, may lead to exhaust valve corrosion and turbocharger deposits, since fusible halts are created on surfaces with temperature higher than 550°C. According to ISO 8217:2010, this corrosion can especially occur if the weight ratio of sodium to vanadium exceeds 1:3, and in the case of high vanadium content. For lower contents of sodium and vanadium, the weight ratio is considered of less importance (for vanadium content less than 150 mg/kg). Sodium is normally present in the fuel as a salt water contamination, and may be removed by settling and centrifuging. Vanadium deposits can be so hard, that can cause extensive damage to the turbocharger nozzle ring and turbine wheel. The only way to remove vanadium deposits is to disassemble the components and clean the deposits mechanically.

1.6.9 Magnesium

Magnesium, either present in the fuel or introduced via additives, can, to some extent, increase the melting point of the vanadium, thus preventing the formation of deposits.

1.6.10 Aluminium and silicon

The ISO 8217:2010 limit to aluminum, AI, and silicon, Si, has been introduced, in order to restrict the content of catalytic fines, named alumino silicate $(Al_2O_3 \text{ and } SiO_2)$, in HFO. For reference, 60 mg AI and Si corresponds to up to 130 mg Al_2O_2 and SiO_2 . Catalytic fines give rise to abrasive wear, and their content should, therefore, be reduced as far as possible, by centrifuging before the fuel reaches the engine, and cleaning, by installing a fine filter after the centrifuge (e.g. 5-10µm). Catalytic fines are small particles of used catalysts that remain in the fuel after employing catalytic cracking processes to refine crude oil into higher value fractions. These particles vary in size from submicron to tenths of microns. Fig. 6 shows catalytic fines and abrasive debris from a HFO storage tank bottom.



Fig. 6. Catalytic fines and abrasive debris from a HFO storage tank bottom (author's private record).

ISO 8217:2010 specifies the maximum allowable content of catalytic fines in bunkered fuel, expressed as the total content of Al and Si – 60 ppm for HFO. However, engine builders generally estimate that this amount will be reduced by the onboard fuel cleaning system to a maximum of 15 ppm before the fuel oil is injected into the engine. The fuel high pressure pump is the first engine component that is subject to the harmful effects of catalytic fines, with fuel injectors, piston crowns, piston rings and liners being the subsequent ones. Fig. 7 presents catalytic fines embedded in the surface of a liner (Henrik et al. 2013).



Fig. 7. Catalytic fines embedded in the surface of a liner (Henrik et al. 2013).

Such abrasive wear can be so severe that could jeopardize the safety of vessel, cargo and crew, since damages could lead to loss of propulsion. Fig. 8 presents fire in the under-piston space of a two-stroke marine engine after failure of piston rings, due to consumption of HFO with high content of catalytic fines.



Fig. 8. Fire found in the under-piston space of a two-stroke marine engine after failure of piston rings, due to consumption of HFO with high content of catalytic fines (author's private record).

1.7 HFO treatment and operating principles

It is widely recognized that the efficient preheating and cleaning of HFO are mandatory for the reliable and cost-effective operation of marine engines. Preheating is required for achieving the proper kinematic viscosity value in terms of flow, while cleaning is essential for removing impurities, such as water, ash and catalytic fines. Consequently, HFOs must be treated onboard a vessel before being used in the engine.

As far as the HFO temperature is concerned, high preheating temperature is required. An inadequate (lower) temperature can influence combustion, and could cause low performance and increased wear on cylinder liners, piston rings, as well as exhaust valve seats. In most installations, heating is carried out by means of steam, and the viscosity is kept at the specified level by a viscosity regulator controlling the steam supply. The recommended viscometer setting is from 10 to 15 cSt before HFO is fed to engine. In order to avoid too rapid fouling of the heaters, as well as HFO boiling in the piping system, the temperature should not exceed 150°C.

The fuel oil pressure, measured on the engine side before the high pressure pumps, should be about 8 bar, which corresponds to a circulating pump delivery pressure of up to 10 bar. This maintains a pressure margin against gasification and cavitation in the fuel system, even at a preheating temperature of 150°C. In order to ensure proper conditions for effective injection, the HFO preheating temperature must be adjusted according to the particular fuel oil (viscosity curve) used.

A fuel cleaning system that includes settling tanks, service tanks, sludge tanks, pumps, heaters, centrifuges and filters is the general practice of the marine industry. A representative cleaning system when operating on HFOs is shown in Fig. 9. Fuel from the storage tank is transferred into the settling tank, where the force of gravity causes contaminants (water and coarse solid particles as large catalytic fines) to sink to the bottom of the tank. The catalytic fines are hydrophilic. The inclined bottom of settling tank favors the accumulation of contaminants. It is essential to drain the settling and service tanks regularly. In addition, fine filters are placed directly not only before and after the centrifuge, but also in the supply line to the engine, aiming at the removal of any solid particles not discharged by centrifuging. Further, the complete separation of the contaminants is achieved via cleaning of HFO. Centrifugal separation is widely accepted as the most effective means to clean marine fuels before consumption in engines. The centrifugal separation is obtained by means of clarifiers and purifiers.



Fig. 9. HFO cleaning system including centrifuges (author's private record).

The following parameters are important for efficient and effective centrifugal separation (Henrik et al. 2013):

a. HFO preheating to the correct temperature via steam preheaters before its inlet to the centrifuges

In order to ensure that the centrifugal forces separate the heavy contaminants in the relatively limited time that they are present in the centrifuge, the centrifuge should always be operated with an inlet temperature of 98°C for HFO. Fig. 10 shows the relationship between temperature and cleaning capacity of centrifugal separators. For example, for IFO 180, an operation with an inlet temperature of 90°C would require a reduction in the suction rate of at least 23 percent, in order to obtain the same separation efficiency with that of an operation with an inlet temperature of 98°C. As the suction rate is normally controlled by a positive displacement pump, it is not possible to reduce the flow of fuel to the separators, in case the preheating temperature is reduced below 98°C. Therefore, maintaining an inlet temperature of 98°C for HFOs above 180 cSt (at 50°C) is of critical importance.

b. Suitable flow rate of centrifugal separator

It is known that separation efficiency is a function of flow rate. The higher the flow rate, the more particles are left in the fuel, and, thus, the lower the separation efficiency. Optimum cleaning is achieved when the centrifugal separator is operated with the lower possible HFO viscosity. Such conditions increase the residence time of HFO in the centrifuge bowl, resulting in improved separation efficiency. Modern separation systems include automatic control of flow rate based on engine load.

c. Proper maintenance of centrifugal separator

Proper maintenance as per maker's recommendations, including overhauling and internal cleaning, is an important parameter for the separator reliable and efficient performance. The efficiency of the centrifuge should be regularly checked via fuel samples taken before and after the centrifuges, and sent to an established institution for analysis. Samples should be taken more frequently whenever operating on HFO is found with considerable content of catalytic fines. A criterion for a separator's performance is the ability to remove catalytic fines. Every cleaning system should be capable to lower the content of catalytic fines from 80 mg/Kg to 15 mg/Kg before the engine inlet. However, such a requirement does not ensure that catalytic fines with considerable size are not included in the final content achieved. Thus, even though the content of catalytic fines in the fuel injected in the engine may be small, the fuel may be harmful for the engine components. The centrifugal separator shall operate for 24 hours a day except during the necessary maintenance. At least two centrifuges are available onboard, for redundancy.



Fig. 10. Relationship between HFO preheating temperature (in °C) and cleaning capacity (% of maximum suction rate) of centrifugal separators (Aström et al. 2005).

The characteristics that may differ between HFOs and affect separation efficiency are:

- Polarity, which defines how the molecules of fuel are arranged according to the positive and negative charges of the molecules. Polarity is critical, since it determines how susceptible the fuel is to the formation of hard-to-handle emulsions, as well as the level of surface tension of water droplets.
- Stability, which is the ability of a fuel to remain in a constant state despite conditions that may cause the structure of the fuel to collapse. When a fuel is unstable, it contains precipitated asphaltenes that can be separated, when the particles created have accumulated to a sufficient size. These precipitated asphaltenes tend to produce sludge as a function of time and/or temperature, or both. Mixing or blending two incompatible fuels together may also cause the coagulation of precipitated asphaltenes and the formation of a substantial amount of sludge. A mixture of incompatible fuels in the tanks can result in rather large amounts of sludge being taken out by the centrifuges or even lead to centrifuge blocking. Fig. 11 shows sludge accumulation in a centrifugal separator, leading to operation failure.
- Contaminants, which include water and any insoluble residues, such as ash, sand, dirt and rust scale, derived either from fuel processing or storage. They may contribute to the creation of stable emulsions, which make the separation process difficult.



Fig. 11. Excessive sludge accumulation found in a centrifugal separator after overhauling (author's private record).

2. Air Pollution and Marine Industry

2.1 General considerations

Air pollution represents a severe hazard for man, other living organisms and local ecosystems, since it is related with several factors affecting the environment, such as smog, acid rain and global warming. Greenhouse gases (GHG) and air pollutants, such as the nitrogen oxides (NO_x), the sulfur oxides (SO_x), carbon monoxide (CO), carbon dioxide (CO_2), particulate matter (PM), volatile organic compounds (VOC) and the ground-level ozone, are mainly produced by thermal power generation.

2.1.1 Greenhouse gases and air pollutants

The presence of ozone (O_3) in the stratosphere is very important since it protects the earth from harmful ultraviolet radiation. However, when ozone is present close to the earth's surface, it is an air pollutant known as ground-level ozone or tropospheric ozone or smog (www.epri.com). Ozone depletion takes place when volatile organic compounds (VOC) react with nitrogen oxides (NO_x), in the presence of sunlight. Ground-level ozone is a respiratory irritant and can aggravate human health problems such as asthma. It has been associated with respiratory symptoms and temporarily impaired lung function. Moreover, animals exposed to ozone have been shown to develop increased inflammation of the airways, changes in the breathing pattern, and airway hyper-responsiveness at concentrations similar to those affecting humans. Last but not least, ground level ozone can also affect sensitive plant species.

Vessels, being NO_x emitting sources, play a main role in ground-level ozone formation, but quantifying this role has been difficult. Further, quantifying the role of any power plant in ozone formation is also difficult, because ozone is not emitted, but produced in the atmosphere from a combination of pollutants. These pollutants originate from thousands of stationary and mobile sources; the details of ground-level ozone formation also depend on many meteorological factors.

Regarding sulfur oxides (SO_x) , sulfur dioxide (SO_2) is formed and emitted to the atmosphere during the combustion process in diesel engines, as fossil fuels contain sulfur. Further oxidation of SO₂, usually in the presence of a catalyst such as nitrogen dioxide (NO_2) , forms H₂SO₄, and contributes to acid rain.

As far as the carbon monoxide (CO) and the carbon dioxide (CO₂) are concerned, the former is a deadly toxic gas in high concentrations, while the latter constitutes a GHG, playing a significant role in the aggravation of the greenhouse effect.

Finally, increased levels of fine particulate matter (PM) in the air are linked to health hazards, such as heart disease, lung inflammation and lung cancer.

The above mentioned consequences of air pollutants on the environment and on human health affect, among many others, the design of modern marine engines, so as to meet the strict current and future regulations, mainly concerning NO_x , SO_x , CO_2 and PM. Recent studies indicate that the emissions of CO_2 , NO_x and SO_2 from shipping correspond to about 2-3%, 10-15% and 4-9%, respectively, of the global anthropogenic emissions (Eyring et al. 2007).

2.2 IMO marine engine emission regulations

2.2.1 Background

The International Maritime Organization (IMO) is the United Nations specialized agency with responsibility for the safety and security of shipping and the prevention of marine pollution from ships.

IMO ship pollution rules are contained in the "International Convention on the Prevention of Pollution from Ships", known as "MARPOL 73/78". On September 27, 1997, the MARPOL Convention has been amended by the "1997 Protocol", which includes Annex VI, entitled "Regulations for the Prevention of Air Pollution from Ships". MARPOL Annex VI sets limits on NO_x and SO_x emissions from ship exhausts, and prohibits emissions of ozone depleting substances.

The IMO emission standards are commonly referred to as Tier I, II, III standards. The Tier I standards were defined in the 1997 version of Annex VI, while the Tier II and Tier III standards were introduced by the Annex VI amendments adopted in 2008 (www.imo.org).

2.2.2 GHG emissions

The 2011 Amendments to MARPOL Annex VI added "Chapter 4" to Annex VI on "Regulations on energy efficiency for ships" in order to reduce emissions of GHGs from international shipping.

MARPOL Annex VI, Chapter 4, introduces two mandatory mechanisms intended to ensure an energy efficiency standard for ships: (1) the Energy Efficiency Design Index (EEDI) for new ships and (2) the Ship Energy Efficiency Management Plan (SEEMP) for all ships.

a. Energy Efficiency Design Index (EEDI) for new ships

EEDI is a performance-based mechanism that requires certain minimum energy efficiency in new-building ships. Ship designers and builders have the freedom to choose the technologies that will satisfy the EEDI requirements in a specific ship design.

b. Ship Energy Efficiency Management Plan (SEEMP) for all ships

SEEMP establishes a strategy for operators to improve the energy efficiency of ships.

2.2.3 NO_x emission standards

 NO_x emission limits are set for diesel engines, depending on the engine maximum operating speed; these limits are presented graphically in Fig. 12. Tier I and Tier II limits are global, while the Tier III standards apply only for NO_x Emission Control Areas (ECAs)³. The compliance of machinery equipment installed onboard is certified with the " NO_x Technical Code Book", which includes technical information regarding power performance, NO_x emissions and machinery parts of each prime mover. The engine manufacturers are obliged to provide the " NO_x Technical Code Book" at engine delivery. In particular, the NO_x emission limits applied are defined as follows:

Tier I: For engines installed on ships constructed from 1^{st} January 2000 to 1^{st} January 2011, the allowable NO_x emissions versus the engine speed *n* (in rpm) are:

- 17.0 g/kWh, for *n* < 130 *rpm*
- $45.0^{\circ}n^{(-0.2)}$ g/kWh, for $130 \le n < 2000 \ rpm$
- 9.8 g/kWh, for $n \ge 2000 \ rpm$

Tier II: For engines installed on ships constructed on or after 1^{st} January 2011, the allowable NO_x emissions are:

- 14.4 g/kWh, for *n* < 130 *rpm*
- 44.0*n^(-0.23)g/kWh, for $130 \le n < 2000 \ rpm$
- 7.7 g/kWh, for $n \ge 2000 \ rpm$

Tier III: Ships constructed on or after 1^{st} January 2016 have additional limitations when operating inside an ECA. For such vessels operating in the NO_x ECAs, the allowable NO_x emissions are:

- 3.4 g/kWh, for *n* < 130 *rpm*
- $9.0*n^{(-0.2)}$ g/kWh, for $130 \le n < 2000 \ rpm$
- 2.0 g/kWh, for $n \ge 2000 \ rpm$

Regarding low speed marine diesel engines (n<130 rpm), the regulations corresponding to global (Tier II) and ECA (Tier III) standards show that the reduction on NO_x emissions limits (in a time window of five years) has been approximately 75%. This vast reduction in such a short time reveals the strong environmental concern of the international community, and has forced ship and engine builders as well as the research community to seek environmentally friendly solutions via substantial modifications to engine operating concepts and design.

³Existing ECAs include: the Baltic Sea, the North Sea, the North American ECA (including most of US and Canadian coast), the US Caribbean ECA (including Puerto Rico and the US Virgin Islands) and China (domestic trade).



Fig. 12. Marine engine NO_X emissions limits versus maximum operation speed (www.imo.org).

Engine NO_x emissions are determined as a weighted average of the NO_x emissions at 25%, 50%, 75% and 100% load. Allowable emission limits according to IMO Tier III NO_x standards dictate combustion process optimization in the entire range of engine load, in combination with EGR, water addition in the combustion chamber, or exhaust gas aftertreatment. Finally, the use of alternative fuels (instead of the widely used liquid fuels), such as NG and LPG, supported by advanced combustion processes is a promising alternative, with substantial environmental benefits.

2.2.4 Fuel sulfur content standards

MARPOL Annex VI regulations include maximum limits for the fuel oil sulfur weight content, for controlling SO_x emissions. Consequently, vessel operators must purchase fuel characterized by sulfur content within the prescribed limits, and also check fuel properties during the bunkering process. On the other hand, fuel handling machinery providers have to offer reliable equipment that can handle those fuels, since low sulfur content influences important fuel properties, in particular viscosity and lubricity. Low sulfur fuels are used only inside SO_x ECAs (SECAs). The sulfur limits and corresponding implementation dates are listed next, and are depicted in Fig. 13.

Globally:

- 3.50 per cent from 1st January 2012
- 0.50 per cent from 1st January 2020

In SECAs:

- 1.0 per cent from 1st March 2010
- 0.10 per cent from 1st January 2015



Fig.13. Maximum allowable sulfur weight content in marine fuel oils versus regulation's implementation dates (<u>www.imo.org</u>).

Burning of HFO during a vessel's passage inside SECAs is permitted when fuel meets the applicable sulfur limit. Further, according to relevant directives of EU, the State of California, as well as other countries (Turkey, China, Hong Kong), distillate fuels with sulfur weight content up to 0.1% (MGO) have to be used during vessel berthing. Alternatively, exhaust gas scrubbers can be used for compliance with SO_x emission regulations, irrespective of the fuel sulfur content. The global 0.50% sulfur cap will enter into force in 2020, and more than 70,000 ships will be affected by the regulation. As a result, both refinery industry and ship owners shall ensure compliance. The available choices are:

- Switching from high sulfur HFO to low sulfur distillates, e.g. MGO.
- Using very low sulfur HFO (less than 0.5%) derived from compliant fuel blends
- Retrofitting vessels to use alternative low sulfur or sulfur-free fuels, such as LNG or LPG
- Installing exhaust gas cleaning systems (scrubbers), which allows operation on regular high sulfur HFO

In any case, the use of HFO is not abandoned, and thus, HFO will remain the predominant fuel in marine industry.

This page is intentionally left blank.

3. HFO modeling

3.1 Background

Several research efforts related to the characterization of HFO properties and combustion have been reported. Lin et al. (1995) developed an approach for calculating constant (temperature-independent) values of marine fuel properties, and applied it to a double film combustion model of a single liquid droplet. Fink et al. (2008) performed experimental spray studies with HFO in a constant volume combustion chamber under conditions similar to those of medium speed marine engines. In the same study, measurements of kinematic viscosity and surface tension as a function of temperature for various HFO qualities were also reported and compared to those of MDO. Kyriakides et al. (2009) proposed a thermophysical properties model of a given residual fuel, utilizing refinery data and literature studies. The proposed residual fuel properties were adopted in the HFO CFD studies of Chryssakis et al. (2010) for constant volume chambers, the results of which have been compared against experiments of Struckmeier et al. (2009) and Struckmeier (2010). The computational studies of Goldsworthy (2006), Struckmeier et al. (2009, 2010) and Stamoudis et al. (2014) have considered a two-component approach, with the two components representing a residual (heavy) and a cutter (light) part, characterized by different vapor pressure curves, and constant or temperature-dependent values for dynamic viscosity, density, latent heat, specific heat capacity and surface tension; the approach has resulted in a sufficient representation of HFO combustion, as illustrated by comparisons against experimental data for constant volume chambers (Takasaki et al. 2011) and marine engines (Andreadis et al. 2011). Garaniya and Goldsworthy (2007), Garaniya (2009) and Garaniya et al. (2011) adopted a more complex representation of HFO composition in the context of SARA modeling, which considers Saturates, Aromatics, Resins and Asphaltenes as the HFO content. Recently, Bolla et al. (2012) performed non-reactive CFD simulations of HFO sprays utilizing a fivecomponent approach, and obtained good agreement against experimental data in a large constant volume SCC (Herrmann et al. 2007, 2009, von Rotz et al. 2011). Gaining from the experience of these literature studies, the present work aims at developing a general model of HFO thermophysical properties that:

- accounts for any quality of HFO
- considers temperature dependence of thermophysical properties, and
- is an integrated, readily applicable tool for CFD studies of HFO combustion in marine engines.

3.2 Sampling and experimental analysis of two HFO qualities

In the frame of the present thesis, samples of two representative HFO qualities, kindly provided to us by Winterthur Gas & Diesel (newly named since January 2015, formerly known as Wärtsilä Switzerland Ltd.) and SGS Greece, have been collected, and are characterized in terms of their thermophysical properties, by means of proper experiments. The first HFO has been used in the spray experiments of von Rotz et al. (2011), where results of an initial characterization of the fuel are also presented. The second HFO constitutes a typical HFO used in marine engines. The notation regarding the samples of the two HFO grades followed hereafter is listed in Table 2. It is clarified that samples #1a and #1b correspond to the same HFO; analyses of sample #1a have been presented in von Rotz et al. (2011), while sample #1b is analysed experimentally in the present study.

Notation	Supplier	Analysis and characterization
HFO #1a	Winterthur Gas & Diesel	von Rotz et al. (2011)
HFO #1b	Winterthur Gas & Diesel	present work
HFO #2	SGS Greece	present work

Table 2. Notation regarding the HFO samples considered in the present thesis.

The present analyses thus concern HFO samples #1b and #2; they include chemical characterization in terms of the content of carbon, hydrogen, nitrogen, sulfur, water, and metals and inorganics (Al, Na, V and Si), as well as the determination of Heating Values, acid number and corrosion index. These measurements were performed at the European Bioenergy Research Institute (EBRI) of Aston University. Further, the temperature dependence of density, as well as of kinematic and dynamic viscosity, was determined experimentally at the Fuels and Lubricants Technology Laboratory of the Department of Chemical Engineering of the National Technical University of Athens. Finally, measurements of surface tension versus temperature were performed at the Division of Materials Science and Engineering of the Department of Chemical Engineering of the National Technical University of Athens.

The following procedures were implemented, in duplicate, to characterize the two HFO qualities:

a. elemental CHN analysis, using a FlashEA® 1112 Elemental Analyzer (Thermo Fisher Scientific, Waltham, Massachusetts),

b. determination of metal and other inorganic component content, using Varian Vista MPX CCD Simultaneous axial ICP-OES (Varian, Palo Alto, California),

c. determination of water content, by means of volumetric Karl-Fischer titration (ASTM D6304 2016a),

d. determination of Higher Heating Value (HHV) and Lower Heating Value (LHV), using a Parr 6100 oxygen bomb calorimeter (Parr Instrument Company, Moline, Illinois) (ASTM D240 2017b),

e. determination of acid number, using an acid number G20 Titrator (Mettler Toledo, Columbus, Ohio) (ASTM D664 2017a), and

f. determination of corrosion index in accordance with ASTM D130/IP154 (2018a).

The results of the present experiments (HFO #1b and HFO #2) are presented in Table 3 for content analysis, and in Table 4 for HHV, LHV, acid number and corrosion index; the two Tables also include the results for HFO #1a, as reported in von Rotz et al. (2011).

Further, the following procedures were implemented, in duplicate, to determine the temperature dependence of thermophysical properties:

(a) density measurements were performed according to ASTM D4052 (2018b),

(b) dynamic and kinematic viscosity were determined according to ASTM D7042 (2016b), and

(c) surface tension was determined using the Du Noüy ring method on a KRÜSS K10T Digital Tensiometer (ASTM D971 2012).

Representative results for these properties at different temperatures are shown in Table 4 for HFO samples #1b and #2; values for sample #1a reported by von Rotz et al. (2011) are also included. It is worth noting that small differences are identified between the measured values reported in von Rotz et al. (2011) (sample #1a) and the present ones (sample #1b) for the HFO used in the experiments of Winterthur Gas & Diesel. This deviation may be attributed to:

- uncertainties in the experiments
- differences in the sampling procedures
- fuel aging, affecting the results of the present experiments
- effects due to fuel handling (filtration and purification)

		•	· •			,.			
	С	Н	Ν	S	AI	Na	Si	V	H ₂ O
	[wt.%]	[wt.%]	[wt.%]	[wt.%]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[wt.%]
HFO #1a	87.2	10.2	1.0	0.81	<1.0	11.0	<1.0	28.0	<0.1
HFO #1b	87.9	10.2	0.6	0.88	1.0	5.0	<1.0	29.0	<0.1
HFO #2	85.8	10.1	0.4	3.4	3.0	29.0	<1.0	106.0	<0.1

Table 3. Composition for HFO samples #1b and #2 based on the present experiments. Corresponding values for HFO sample #1a, reported in von Rotz et al. (2011), are also included.

Table 4. Results of present experiments for HFO #1b and HFO #2, in terms of acid number, corrosion index, Heating Values and representative thermophysical properties. Corresponding values for HFO sample #1a, reported in von Rotz et al. (2011), are also included.

	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2
Acid number [mg KOH/g]	0.1	0.3	0.5
Corrosion index	NA	1b	1b
HHV [KJ/kg]	42740	42660	42330
LHV [KJ/kg]	40580	40491	40182
Density at 288.15 K [kg/m ³]	1001.1	989.4	989.3
Kinematic viscosity at 323.15 K [cSt]	1255.0	995.5	440.8
Dynamic viscosity at 323.15 K [cP]	NA	963.3	426.3
Surface tension at 313.15 K [mN/m]	NA	31.5	31.2

3.3 Development of HFO thermophysical properties model

Refinery industries utilize product blending, obtaining different qualities of HFO as final products. Consequently, the full chemical and physical characterization of a HFO is not feasible, since the final product contains a wide range of hydrocarbons with complex composition and structure. Hence, comprehensive measurements of various heavy petroleum fraction samples have been carried out, supported by thermodynamic analysis, in order for easily measured bulk properties of the fuel, i.e. density and viscosity, to be correlated to costly, even hardly, experimentally determined fuel thermophysical properties, such as molecular weight, critical temperature, critical pressure and enthalpy. To this end, a variety of correlations for characterization of heavy petroleum fractions are available in the literature (Ancheyta 2013, Riazi 2005, Wauquier 1995, API 1997, and references therein).

Here, an integrated HFO thermophysical properties model is developed based on proven correlations for heavy petroleum fractions reported in literature (Kontoulis et al. 2018). Specifically, the model considers HFO as an equivalent one-component heavy petroleum fraction of undefined composition, and forms a calculation tool for HFO thermophysical properties relevant for engineering CFD studies in marine engines, accounting for various HFO qualities. The present model requires **four (4)** input values of HFO bulk properties, commonly measured at fuel bunkering, namely:

- a. density at a given temperature,
- b. kinematic viscosity values at temperature T1,
- c. kinematic viscosity values at temperature T2 (different than T1), and
- d. sulfur weight content.

As a result, the present modeling accounts for **any HFO quality** stored onboard a vessel. The model output consists of a large set of fuel properties, in particular, molecular weight, normal boiling point, carbon-to-hydrogen ratio, pseudo-critical pressure and temperature values, LHV, enthalpy of formation, specific heat capacity, as well as Calculated Carbon Aromaticity Index (CCAI), Watson characterization factor and acentric factor. A main asset of the present modeling is the capability to calculate the temperature dependence of a wide range of thermophysical properties (density, kinematic viscosity, dynamic viscosity, vapor pressure, heat of evaporation, surface tension, mass diffusion coefficient (fuel vapor to air) and sensible enthalpy), which is crucial for CFD applications.

In the following sections, the present model is briefly described and applied to the calculation of thermophysical properties of the different HFO qualities presented in Table 2. Table 5 presents the measured thermophysical property values of HFO samples #1a, #1b and #2 (see also Table 3 and Table 4), which form the input data set for the present model. The corresponding values for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) are also reported (API 1997), for comparison.

The validation of the present modeling includes the relevant measurements described in the previous chapter. Further, the model results are tested and compared against measured HFO thermophysical properties reported in literature, while corresponding results for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) are also considered, indicating the difference between heavy and light hydrocarbons.

Table 5. Measured values of thermophysical properties of HFO samples #1a (reported in von Rotz et al. (2011)), #1b and #2. The values form the input data set, as required by the present model. Corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are included for comparison (API 1997).

Input data : Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Density at 288.15 K [kg/m ³]	1001.1	989.4	989.3	765.7
Kinematic viscosity at 323.15 K [cSt]	1255.0	995.49	440.84	1.84
Kinematic viscosity at 373.15 K [cSt]	73.96	56.57	33.46	1.01
Sulfur weight content [%]	0.81	0.88	3.4	-

3.3.1 Density, specific gravity 60F/60F and API gravity

The dependence of density on temperature is characterized by a negative gradient. The following equation, proposed by Denis et al. (Riazi 2005), can be effective in calculating the density of a heavy petroleum fraction, if the value of liquid density at a certain temperature of fuel is known:

$$\frac{\Delta\rho}{\Delta T} = -(2.34 \cdot 10^{-3} - 1.9 \cdot \rho_T) \quad (1)$$

where,

 ρ_T is the fuel density at temperature T, in Kg/m^3

The measured and calculated dependence of density on temperature, at atmospheric pressure, is presented in Fig. 14, for different HFO qualities. The corresponding curve of n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) is also included (API 1997). A good agreement between measurements and model predictions is verified.



Fig. 14. Measured and computed density as a function of temperature for HFO samples #1a, #1b and #2. A corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Specific gravity 60F/60F and API gravity are alternate properties characterizing the density. Both properties are readily calculated from a given density input.

The specific gravity 60F/60F of a fuel is a dimensionless quantity defined as the ratio of the fuel density at 60 degrees Fahrenheit (15.6 \degree C) to the density of pure water at the same temperature:

$$SG_{60F/60F} = \frac{\rho_{60F}^{fuel}}{\rho_{60F}^{water}}$$
 (2)

where,

 ρ_{60F}^{fuel} is the density of fuel at 60 degrees Fahrenheit $\rho_{60F}^{water} = 999.1 \ kg \ / m^3$ is the density of pure water at 60 degrees Fahrenheit

The API gravity is another relative measure of oil density with respect to water density. API gravity is inversely proportional to specific gravity 60F/60F, thus also a non-dimensional quantity:

$$API = \frac{141.5}{SG_{60F/60F}} - 131.5 \quad (3)$$

The resulting values of specific gravity 60F/60F and API gravity of the HFO qualities considered are shown in Table 6.

Table 6. Specific gravity 60F/60F and API gravity of HFO samples #1a, #1b and #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Specific gravity 60 F/60 F	1.002	0.9903	0.9902	0.7665
API gravity	9.72	11.38	11.40	53.11

3.3.2 Kinematic and dynamic viscosity

The validated correlation of Walther (1931), known to be accurate over the wide viscosity range of $2 \div 2 * 10^7 cSt$, is used for the calculation of kinematic viscosity versus temperature:

 $\log[\log(v_T + 0.7)] = A + B \cdot \log(T)$ (4)

where,

 \mathcal{V}_{T} is the kinematic viscosity of HFO at temperature T, in cSt

T is the temperature, in degrees Kelvin

A and B are constants

Fig. 15 shows the measured and computed temperature variation of kinematic viscosity of the present HFO samples. The corresponding curve for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) is also included (API 1997). A very good agreement between measurements and the model predictions is captured. Corresponding curves for a wide range of marine fuels are included in Fig. 16 (Klianis et al. 2002). Fig. 15 and Fig. 16 indicate that HFO requires adequate preheating (in practice, up to 430 K or 160 °C) to enable effective atomization and evaporation inside the engine combustion chamber.



Fig. 15. Measured and computed kinematic viscosity as a function of temperature for HFO samples #1a, #1b and #2. A corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 16. Kinematic viscosity versus temperature of typical marine fuels (Klianis et al. 2002).

The dynamic viscosity can be readily calculated via its definition:

$$\left[\mu = v \cdot \rho\right]_{T} \quad (5)$$

where, μ is the dynamic viscosity ν is the kinematic viscosity ρ is the fuel density

Fig. 17 shows the measured dynamic viscosity values as a function of temperature for HFO qualities #1b and #2, compared to the calculated ones; the calculated curve for sample #1a is also included, as well as the corresponding n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) curve (API 1997). A very good agreement between measurements and calculations is shown. Fig. 17 indicates that HFO viscosity is higher than diesel oil viscosity by more than two orders of magnitude, with the difference decreasing at increasing temperature (Bartok and Sarofim 1991).



Fig. 17. Measured and computed values of dynamic viscosity as a function of temperature for HFO samples #1b and #2. The calculated curve for HFO sample #1a is also included, as well as a corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ (API 1997).

3.3.3 Net enthalpy of combustion (or LHV)

The calculation of net enthalpy of combustion at 298.15 K and 1 atm, which coincides with the fuel LHV, in KJ/kg, utilizes a formula that correlates the net enthalpy of combustion with the corresponding fuel density, ρ , in kg/m^3 at 288.15 K and sulfur weight content, S%, suggested for marine heavy fuels in Wauquier 1995:

$$\Delta h_c = 55500 - 14.4 \cdot \rho_{288.15K} - 320 \cdot S\% \tag{6}$$

The measured HHV and LHV according to ASTM D240 (2017b) (see also Table 4), as well as the computed LHV values of the HFO qualities considered here are presented in Table 7. The corresponding LHV for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) is also reported (API 1997). The comparison confirms that the suggested relationship can satisfactorily predict the measured data. Table 7 also indicates that all HFOs are characterized by lower values of LHV in comparison to n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$), as expected. Further, the effect of the sulfur content on LHV is also justified in the case of HFO #2, compared to the other HFO samples; LHV decreases with increasing sulfur content, provided that the fuels have similar values of density (see Table 5).

Table 7. Measured HHV and LHV (ASTM D240 2017b) and computed LHV of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding LHV for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
HHV (ASTM D240) [KJ/kg]	42740	42660	42330	-
LHV (ASTM D240) [KJ/kg]	40580	40491	40182	-
Computed LHV [KJ/kg]	40826	40971	40166	44019.6

3.3.4 CCAI

The poor ignition and combustion quality of HFOs is directly related to the high aromaticity of asphaltenes. CCAI constitutes a useful measure to rank the quality of marine HFO in terms of ignition, and is cross-validated with experiments in fuel ignition analyzers and engines (Schenk et al. 1998, de Hoog et al. 2010). The calculation of CCAI is based on an empirical equation that correlates it with density (in kg / m^3) and kinematic viscosity (in cSt), as follows (Wauguier 1995):

$$CCAI = \rho_{15^{\circ}C} - 140.7 \cdot \log \left[\log \left(v_{50^{\circ}C} + 0.85 \right) \right] - 80.6$$
 (7)

where,

 $ho_{15^{\circ}C}$ is the density of the heavy fuel at 15 °C, in kg/m^3

 $V_{50^{\circ}C}$ is the kinematic viscosity at 50 °C, in cSt

The relation between CCAI values and ignition quality is presented in Table 8 (Klianis et al. 2002). The lower the CCAI value, the better the ignition characteristics of marine HFO. Many engine manufacturers suggest an upper CCAI limit in the engine specifications; thus, ISO 8217:2010 also includes such a requirement. The computed CCAI values of the HFO samples considered here are presented in Table 9, suggesting a good to moderate ignition quality.

Table 8. Correspondence between CCAI values and ignition quality (Klianis et al. 2002).

CCAI value	Ignition quality
790 ÷ 830	Very good ÷ Good
830 ÷ 850	Good ÷ Moderate
850 ÷ 870	Moderate ÷ Poor
870 ÷ 950	Poor + Very poor

 Table 9. Computed CCAI of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2.

Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2
CCAI	851	842	849

3.3.5 Molecular weight

The calculation of molecular weight of heavy petroleum fractions, in gr/mole, can be based on the correlation suggested by Riazi 2005, known to be valid over the wide molecular weight range of 200÷800 gr/mole. This suggestion is also included in the API procedure 2B2.3 (API 1997), and relates the molecular weight to known values of kinematic viscosity (in cSt) at certain values of temperature and the specific gravity 60 F/60 F of the fuel, as follows:

$$MW = 223.56 \cdot v_{311.15K}^{(-1.2435+1.1228*SG_{60F/60F})} \cdot v_{372.15K}^{(3.4758-3.038*SG_{60F/60F})} \cdot SG_{60F/60F}^{-0.6665}$$
(8)

where,

MW is the molecular weight, in gr/mole

 $V_{311,15K}$ is the kinematic viscosity at 311.15 degrees Kelvin, in cSt

 $V_{372.15K}$ is the kinematic viscosity at 372.15 degrees Kelvin, in cSt

 $SG_{60F/60F}$ is the specific gravity 60F/60F

Following the one-component approach, the computed molecular weight of HFOs is considered as an average molecular weight of the individual components. The resulting values of molecular weight of the HFO qualities considered here are listed in Table 10. The corresponding value for n-tetradecane $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997). Table 10 underlines the difference between heavy and light fuels.

Table 10. Computed molecular weight values of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Molecular weight [gr/mole]	554.84	531.08	468.06	198.388

3.3.6 Watson characterization factor and normal boiling point

The Watson characterization factor is an indication of a fuel fraction paraffinicity, with values higher than 12 corresponding to high rates of evaporation. Watson characterization factor values lower than 12 correspond to HFOs (API 1997). The Watson characterization factor is useful in determining a number of heavy fuel oil fraction thermo-physical properties. The definition of Watson factor is based on the normal boiling point and specific gravity 60F/60F of the fuel. The normal boiling point is the temperature at which the vapor pressure of a liquid is equal to 1 atm. Thus, the Watson characterization factor is defined by the following equation (API 1997, Riazi 2005):

$$K_{w} = \frac{(1.8 \cdot T_{b})^{1/3}}{SG_{60F/60F}}$$
(9)

where,

 K_w is the Watson characterization factor of the heavy petroleum fraction

 T_{b} is the normal boiling point, in degrees Kelvin

 $SG_{60F/60F}$ is the specific gravity 60F/60F

The property values in the RHS of the above definition may not be known; nonetheless, the Watson characterization factor can still be determined, if the fuel molecular weight and API gravity are known, according to the API figure 2B2.2, as shown in Fig. 18 (API 1997). Once the Watson characterization factor value is known, utilizing its definition, the fuel normal boiling point is readily determined. It is noted that here the normal boiling point of heavy petroleum fractions is considered as an average boiling point of the individual fuel components. The computed values of Watson characterization factor and normal boiling point of the HFO qualities considered here are presented in Table 11. The corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are also included (API 1997). Table 11 verifies that the three HFO qualities are characterized by values of Watson characterization factor lower than 12. Further, the resulting values of normal boiling point of HFOs lie in the range of 465÷854 K, reported in Shyu et al. (1972) for the individual components of a HFO.



Fig. 18. Watson characterization factor as function of API gravity and molecular weight (API 1997).

The off-z. The corresponding values for O_{14} O_{30} are also reported (Ar (1997)).							
Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	C ₁₄ H ₃₀			
Watson factor	11.41	11.47	11.3	12.8			
Normal boiling point [K]	829.7	813.6	780.5	526.7			

Table 11. Computed Watson characterization factor and normal boiling point of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are also reported (API 1997).

3.3.7 Carbon-to-Hydrogen ratio

Carbon-to-hydrogen weight ratio is defined as the ratio of total weight of carbon atoms to the total weight of hydrogen atoms in a compound or in a mixture. The carbon-to-hydrogen weight ratio provides useful information in terms of the type and quality of a fuel. Here, the prediction of carbon-to-hydrogen weight ratio in the range of C_{20} up to C_{50} is obtained by formula (Riazi 2005):

$$CH_{weight} = 8.7743 \cdot 10^{-10} \cdot \left[\exp(7.176 \cdot 10^{-3} \cdot T_b + 30.06242 \cdot SG_{60F/60F} - 7.35 \cdot 10^{-3} \cdot T_b \cdot SG_{60F/60F}) \right] \cdot (10) \cdot T_b^{-0.98445} \cdot SG_{60F/60F}^{-18.2753}$$

where,

 T_b is the normal boiling point, in degrees Kelvin

 $SG_{60F/60F}$ is the specific gravity 60F/60F

The definition of carbon-to-hydrogen atomic ratio is the ratio of total carbon atoms to the total hydrogen atoms. The estimation of carbon-to-hydrogen weight ratio contributes to the determination of carbon-to-hydrogen atomic ratio as follows:

$$CH_{atomic} = \frac{A_H}{A_C} \cdot CH_{weight} \quad (11)$$

where,

 A_{H} and A_{C} are the atomic weights of hydrogen and carbon, respectively.

The resulting values of carbon-to-hydrogen atomic ratio of the HFO qualities considered here are included in Table 12. The corresponding value for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) is also presented (API 1997).

Table 12. Computed carbon-to-hydrogen atomic ratio of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also presented (API 1997).

		,		
Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Carbon-to-hydrogen atomic ratio	0.977	0.932	0.973	0.467

Taking into consideration the computed molecular weight and carbon-to-hydrogen ratio values, it is feasible to calculate the number of carbon atoms, as well as the number of hydrogen atoms in a representative molecule of a HFO.

3.3.8 Pseudo-critical temperature and pressure

The critical properties of heavy petroleum fractions are hardly defined. Thus, the pseudocritical properties are adopted and calculated by validated formulas. Here, the pseudo-critical temperature and pressure (in degrees Kelvin and bar, respectively) are estimated by the validated correlations of Lee and Kesler, known to be valid in the range of C5 up to C50, corresponding to the wide molecular weight range of 70÷700 gr/mole (Riazi 2005):

 $T_{pc} = 189.8 + 450.6 \cdot SG_{60F/60F} + (0.4244 + 0.1174 \cdot SG_{60F/60F}) \cdot T_b + (0.1441 - 1.0069 \cdot SG_{60F/60F} \cdot 10^5) / T_b$ (12)

 $P_{pc} = \exp(5.689 - 0.0566 / SG_{60F/60F} - (0.43639 + 4.1216 / SG_{60F/60F} + 0.21343 / SG_{60F/60F}^2) \cdot 10^{-3} \cdot T_b$ $+ (0.47579 + 1.182 / SG_{60F/60F} + 0.15302 / SG_{60F/60F}^2) \cdot 10^{-6} \cdot T_b^2 - (2.4505 + 9.9099 / SG_{60F/60F}^2) \cdot 10^{-10} \cdot T_b^3)$ (13)

where,

 $T_{\scriptscriptstyle nc}$ is the pseudo-critical temperature, in degrees Kelvin

 P_{pc} is the absolute pseudo-critical pressure, in bar

 T_{h} is normal boiling point, in degrees Kelvin

 $SG_{60F/60F}$ is the specific gravity 60F/60F

The resulting values of pseudo-critical properties for the HFO samples considered here are listed in Table 13. The corresponding critical values for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) are also included (API 1997).

Table 13. Computed pseudo-critical temperature and pressure of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding critical values for $C_{14}H_{30}$ are also included (API 1997).

Pseudo-critical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	C ₁₄ H ₃₀
Temperature [K]	986.8	971.1	948.7	693 (critical)
Pressure [bar]	9.2	9.44	10.9	15.7 (critical)

The calculations regarding petroleum fractions are usually based on the parameters known as reduced temperature and reduced pressure. The reduced properties are the values of the temperature and pressure of interest normalized by the critical temperature and pressure. Here, the reduced properties of interest are realized via the pseudo-critical temperature and pressure, as follows:

 $T_r = \frac{T}{T_{pc}}$ is the reduced temperature $P_r = \frac{P}{P_{pc}}$ is the reduced pressure

3.3.9 Acentric factor and vapor pressure

The acentric factor expresses the deviation of the intermolecular potential function from that of monatomic gases, e.g., argon, krypton and xenon. The acentric factor represents the eccentricity (non-sphericity) of a molecule, and its value increases with carbon chain length. For instance, the acentric factor values of argon and methane are minimal, equal to 0.001 and 0.011, respectively. The acentric factor can be calculated as follows:

$$\omega = -\log[\mathbf{P}_r^*]_{0.7} - 1 \quad (14)$$

where,

 $[\mathbf{P}_r^*]_{0,7}$ is the reduced vapor pressure corresponding to a reduced temperature of 0.7.

Utilizing the computed value of acentric factor, the vapor pressure can be calculated using a formula suggested by Pitzer et al. (1995), which is valid for values of reduced temperature higher than 0.7. An extension has been suggested by Twu et al. (1994), applicable for reduced temperatures higher than 0.5, and is adopted in the present implementation. In particular, the present model applies the modified acentric factor, which refers to heavy hydrocarbons, and is defined as:

$$\Omega = -\log[P_r^*]_{0.5} - \ln 10 \quad (15)$$

where,

 $[\mathbf{P}_r^*]_{0.5}$ is the reduced vapor pressure corresponding to a reduced temperature of 0.5

The calculation of modified acentric factor utilizes the normal boiling point, as the reference point. Thus, the vapor pressure is calculated in the range of reduced temperature between 0.5 and 1.0, utilizing the following correlation:

$$\ln P_{r} = \ln P_{r}^{(0)} + \Omega \cdot \ln P_{r}^{(1)}$$
 (16)

The analytical form of functions $\ln P_r^{(0)}$ and $\ln P_r^{(1)}$ is implemented as follows (Twu et al. 1994):

$$\ln P_r^{(0)} = \frac{1}{T_r} \cdot \left[-5.95103 \cdot (1 - T_r) + 1.15236 \cdot (1 - T_r)^{1.5} - 0.492662 \cdot (1 - T_r)^3 - 1.36122 \cdot (1 - T_r)^6 \right]$$
(17)
$$\ln P_r^{(1)} = \frac{1}{T_r} \cdot \left[-1.59825 \cdot (1 - T_r) + 0.135518 \cdot (1 - T_r)^{1.5} - 2.99603 \cdot (1 - T_r)^3 - 1.63677 \cdot (1 - T_r)^6 \right]$$
(18)

The computed values of acentric factor are presented in Table 14, while the corresponding HFO vapor pressure curves, including pseudo-critical values, are presented in Fig. 19 (see also Table 13). The acentric factor and vapor pressure of n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) are also reported in Table 14 and Fig. 19, respectively (API 1997). The calculated values of vapor pressure are similar to corresponding values published in Shyu et al. 1972.

Table 14. Computed acentric factor of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also reported (API 1997).

Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Acentric factor	1.272	1.244	1.132	0.643



Fig. 19. Computed vapor pressure curves, including corresponding pseudo-critical values, of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

3.3.10 Heat of evaporation

The heat of evaporation of a petroleum fraction is predicted, in KJ/Kg, by implementing the equation proposed by Watson (Riazi 2005), in which the heat of evaporation, Δh_v , at the desired temperature is related to the heat of evaporation at the normal boiling point, $[\Delta h_v]_{T_b}$, as follows:

$$\Delta h_{v} = \left[\Delta h_{v}\right]_{T_{b}} \cdot \left(\frac{1 - T_{r}}{1 - \frac{T_{b}}{T_{c}}}\right)^{0.38}$$
(19)

where,

 T_r is the reduced temperature

 $T_{\scriptscriptstyle b}\,$ is the normal boiling point, in degrees Kelvin,

 $T_{\scriptscriptstyle c}$ is the pseudo-critical temperature, in degrees Kelvin

Here, the heat of evaporation at the normal boiling point, $\left[\Delta h_{\nu}\right]_{T_{b}}$, is calculated by the correlation proposed by Riedel (Riazi 2005):

$$\left[\Delta h_{v}\right]_{T_{b}} = 1.093 \cdot R \cdot T_{b} \cdot \frac{\ln P_{c} - 1.013}{0.93 - \frac{T_{b}}{T_{c}}}$$
(20)

where,

R is the specific gas constant, in $KJ / kg \cdot K$

 $T_{\scriptscriptstyle b}$ is the normal boiling point, in degrees Kelvin

 $T_{\scriptscriptstyle c}$ is the pseudo-critical temperature, in degrees Kelvin

 P_c is the pseudo-critical pressure, in bars

The calculated heat of evaporation curves for the HFO qualities considered are presented in Fig. 20; a corresponding curve for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) is also included (API 1997). Fig. 20 indicates that, at sufficiently high values of temperature, HFOs are characterized by greater values of heat of evaporation compared to n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$), with the difference increasing with temperature. The present results for HFO qualities are close to those reported in Shyu et al. (1972), and similar to experimental values reported in Gray et al. (1985) for heavy coal liquid fuel fractions.



Fig. 20. Computed heat of evaporation versus temperature for HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

3.3.11 Surface tension

The surface tension of a heavy petroleum fraction of unknown composition is calculated as follows, based on the API procedure 10A3.2 (API 1997):

$$\sigma = 673.7 \cdot \left[1 - T_r\right]^{1.232} \cdot K_w^{-1} \quad (21)$$

where,

 $\sigma\,$ is the surface tension, in mN/m

 T_r is the reduced temperature

 K_{w} is the Watson characterization factor

Fig. 21 presents the computed surface tension variation of the different HFO qualities with temperature, also including the corresponding curve for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) (API 1997). To support the present modeling, the temperature dependence of surface tension for HFO samples considered here, in particular HFO #1b and HFO #2, has been measured. Fig. 21 also shows the present experimental results, as well as corresponding ones for various HFO qualities (HFO 160, HFO 380 and HFO 570) and MDO, reported by Fink et al. (2008). The comparison reveals that the present measurements for HFO are very close to the ones of Fink et al. (2008). Moreover, Fig. 21 indicates that the calculated values of surface tension for HFOs are higher than corresponding experimental ones by about 10%, as also reported in API (1997). It is noted that, for conditions relevant to marine Diesel engines, the resulting values of Weber number correspond to the catastrophic break-up regime, and the effect of surface tension on the frequency of droplet break-up is minor, in comparison to that of viscosity. In all cases, the HFO surface tension values are significantly higher than those of light fuel oils (MDO, $C_{14}H_{30}$). Finally, it is noted that the results of the present calculations for HFO surface tension are very close to corresponding ones published in Bartok and Sarofim (1991).



Fig. 21. Computed surface tension versus temperature for HFO #1a, HFO #1b, HFO #2 and $C_{14}H_{30}$. Experimental results for HFO #1b, HFO #2 (present work), as well as for various HFO qualities and MDO (Fink et al. 2008), are also included.

3.3.12 Diffusion coefficient (fuel to air)

Diffusion of mass is the dissipation of a concentration gradient by molecular transport without bulk flow. The diffusion coefficient is the proportionality constant between the resulting mass flux and the concentration gradient. It is generally defined by Fick's first law for unidirectional, binary-system diffusion.

In the present work, the estimation of the mass diffusion coefficient of an evaporated fuel to air is derived from an empirical equation, as proposed by the API procedure13B1.2 (API 1997). This equation correlates pressure and temperature with the molecular weight and atomic diffusion volumes of fuel and air, as follows:

$$D_{fuel \ to \ air} = 1.015321 \cdot 10^{-3} \cdot \left(\frac{1}{MW_{fuel}} + \frac{1}{MW_{air}}\right)^{0.5} \cdot \left[\left(d_{fuel}\right)^{\frac{1}{3}} + \left(d_{air}\right)^{\frac{1}{3}}\right]^{-2} \cdot T^{1.75} \cdot P^{-1}$$
(22)

where,

 $D_{\it fuel \ to \ air}$ is the mass diffusion coefficient of evaporated fuel to air, in $\ cm^2$ / s

 MW_{fuel} is the fuel molecular weight, in gr/mole

 MW_{air} is the molecular weight of air, in gr/mole

T is the ambient temperature, in degrees Kelvin

P is the ambient pressure, in bar

 $d_{\it fuel}$ and $d_{\it air}$ are the atomic diffusion volumes of fuel and air, respectively

As expressed in the above equation, the diffusion coefficient is inversely proportional to absolute pressure. The atomic diffusion volume is calculated under the assumption that the heavy petroleum fraction is an equivalent hydrocarbon characterized by a specific carbon-tohydrogen atomic ratio. The relation for calculating the atomic diffusion volume of fuels is based on the API procedure 13B1.2 (API 1997):

$$d_{fuel} = x \cdot d_{carbon} + y \cdot d_{hydrogen}$$
(23)

where,

x and y are the number of carbon and hydrogen atoms, respectively, in the equivalent fuel molecule

 d_{carbon} , $d_{hydrogen}$ are the atomic diffusion volumes of carbon and hydrogen, respectively, as given in the API table 13B1.3 (API 1997)

The resulting curves of mass diffusion coefficient versus temperature of the HFO qualities considered, at 1 atm, are presented in Fig. 22. For comparison, the computed curve for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) is also included. Fig. 22 illustrates that lighter fuels are characterized by higher levels of diffusion coefficient, which is in all cases a monotonically increasing function of temperature.



Fig. 22. Calculated mass diffusion coefficient of evaporated fuel to air versus temperature, at a pressure of 1 atm, for HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. A corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

3.3.13 Enthalpy (sensible)

In the present study, the calculation of (sensible) enthalpy of a petroleum fraction in gas phase is based on the assumption of ideal gas. The ideal gas enthalpy is a function of only temperature, and estimated as the difference between the enthalpy at the targeted temperature and the reference temperature. The reference state is chosen to be 0K (according to the fuel library of the KIVA-3 CFD code). The difference in enthalpy, in J/mole, is calculated from the following relation based on the ideal gas heat capacity:

$$\Delta H = \int_{T_{ref}}^{T_2} C_p(T) \cdot dT \qquad (24)$$

The molecular heat capacity of a petroleum fraction is calculated using analytical correlations in terms of the Watson characterization factor, K_{w} , and the acentric factor, ω , as proposed by Lee and Kesler for heavy petroleum fractions, valid up to 922 K (Riazi 2005):

$$C_{p} = MW \cdot [A_{0} + A_{1} \cdot T + A_{2} \cdot T^{2} - C \cdot (B_{0} + B_{1} \cdot T + B_{2} \cdot T^{2})]$$
(25)

where,

 C_p is the molecular heat capacity of a heavy petroleum fraction, in $J / mole \cdot K$ MW is the molecular weight of a heavy petroleum fraction, in gr / mole

The constants are calculated as follows:

$$\begin{split} A_{0} &= -1.41779 + 0.11828 \cdot K_{w} \qquad (26) \\ A_{1} &= -(6.99724 - 8.69326 \cdot K_{w} + 0.27715 \cdot K_{w}^{2}) \cdot 10^{-4} \qquad (27) \\ A_{2} &= -2.2582 \cdot 10^{-6} \qquad (28) \\ B_{0} &= 1.09223 - 2.48245 \cdot \omega \qquad (29) \\ B_{1} &= -(3.434 - 7.14 \cdot \omega) \cdot 10^{-3} \qquad (30) \\ B_{1} &= -(7.2661 - 9.2561 \cdot \omega) \cdot 10^{-7} \qquad (31) \\ C &= \left[\frac{(12.8 - K_{w}) \cdot (10 - K_{w})}{10 \cdot \omega}\right]^{2} \qquad (32) \end{split}$$

The corresponding values of specific heat capacity of the HFO samples considered here, at 298.15 K, are listed in Table 15. Further, Fig. 23 presents the calculated temperature dependence of sensible enthalpy. All results are compared to corresponding ones for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) (API 1997).

Table 15. Computed specific heat capacity of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2, at 298.15 K. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also reported (API 1997).

Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Specific heat capacity at 298.15 K [KJ/kgK]	1.412	1.423	1.394	1.639



Fig. 23. Computed sensible enthalpy of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2 versus temperature, in the gas phase. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also shown (API 1997).

3.3.14 Enthalpy of formation

The enthalpy of formation of a hydrocarbon, $C_x H_y$, is defined by the following equation:

$$\left[\Delta h_f = \Delta h_f^{liq} + \Delta h_v \right]_{298.15K}^{latm}$$
(33)

where,

 Δh_f is the enthalpy of formation, in KJ / kg

 Δh_{f}^{liq} is the enthalpy of formation in the liquid state, in KJ / kg

 Δh_{v} is the heat of evaporation, in *KJ* / *kg*

The heat of evaporation has already been calculated previously. The liquid heat of formation at 298.15 K and 1 atm is derived from the net heat of combustion, and estimated according to the following equation, which neglects pressure correction (API 1997):

$$\left[\Delta h_f^{liq} = \Delta h_c + x \cdot \frac{MW_{CO_2}}{MW_{C_xH_y}} \cdot \Delta h_{f,CO_2} + \frac{y}{2} \cdot \frac{MW_{H_2O}}{MW_{C_xH_y}} \cdot \Delta h_{f,H_2O}\right]_{298.15K}^{1atm}$$
(34)

where,
Δh_c is the known net heat of combustion (LHV), in KJ/kg

 $\Delta h_{f,CO_2}$ is the enthalpy of formation of carbon dioxide, in KJ/kg

 $\Delta h_{fH,Q}$ is the enthalpy of formation of water, in KJ/kg

x and y are the number of carbon and hydrogen atoms in the equivalent molecule of a heavy fuel, respectively

 $MW_{C,H_{a}}$ is the fuel molecular weight, in gr/mole

 $\mathit{MW}_{\scriptscriptstyle CO_2}$ is the molecular weight of carbon dioxide, in $\mathit{gr} \, / \, \mathit{mole}$

 $MW_{H_{2}O}$ is the molecular weight of water, in gr/mole

It is noted that the above formula is implemented here in the general frame of the onecomponent approach. The resulting values of enthalpy of formation of the HFO samples considered are presented in Table 16, in which the corresponding value for n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) is also included (API 1997). The resulting positive values of heat of formation for the HFOs are directly correlated to the carbon-to-hydrogen atomic ratio of about 1.0 of the corresponding equivalent molecules (see Table 12).

Table 16. Computed enthalpy of formation at 298.15 K of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Enthalpy of formation at 298.15 K [KJ/kg]	1075.0	909.4	678.4	-1675.7

3.4 Summary of calculated and measured HFO properties

All the measured and calculated results obtained by the present new model of HFO thermophysical properties are summarized in Table 17, in which the corresponding input data sets are also included. The temperature dependence of thermophysical properties is presented in Table 18.

	Thermophysical property	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
	Density at 288.15 K	1001 kg/m ³	989.4 kg/m ³	989.3 kg/m ³	765.7 kg/m ³
Input data cat	Kinematic viscosity at 323.15 K (50°C)	1255 cSt	995.49 cSt	440.84 cSt	1.84 cSt
input data set	Kinematic viscosity at 373.15 K (100°C)	73.96 cSt	56.57 cSt	33.46 cSt	1.01 cSt
	Sulfur weight content	0.81%	0.88%	3.4%	-
	Specific gravity 60F/60F	1.002	0.9903	0.9902	0.7665
	API gravity	9.72	11.38	11.40	53.11
	Molecular weight	554.84 gr/mole	531.08 gr/mole	468.06 gr/mole	198.388 gr/mole
	Watson characterization factor	11.41	11.47	11.3	12.8
	Acentric factor	1.272	1.244	1.132	0.649
	Normal boiling point (at 1 atm)	829.7 K	813.6 K	780.5 K	526.7 K
Results	Pseudo-critical temperature	986.8 K	971.1 K	948.7 K	693 K (critical)
	Pseudo-critical pressure	9.2 bar	9.44 bar	10.9 bar	15.7 bar (critical)
	Carbon-to-hydrogen atomic ratio	0.977	0.932	0.973	0.467
	Specific heat capacity at 298.15 K	1.412 KJ/kgK	1.423 KJ/kgK	1.394 KJ/kgK	1.639 KJ/kgK
	Enthalpy of formation at 298.15 K	1075 KJ/Kg	909.4 KJ/Kg	678.4 KJ/Kg	-1675.7 KJ/Kg
	LHV (computed)	40826 KJ/Kg	40971 KJ/Kg	40166 KJ/Kg	44019.6 KJ/Kg
	CCAI	851	842	849	-

Table 17. Summary of measured and computed, utilizing the present model, thermophysical properties of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding value for C₁₄H₃₀ is also included (API 1997).



Table 18. Summarized results of temperature dependence of thermophysical properties of HFO #1a, HFO #1b and HFO #2. The corresponding curves for C₁₄H₃₀ are also included (API 1997).

4. New thermophysical properties model validation for ISO 8217:2010 marine fuels

The new model is briefly reviewed here and applied to the calculation of thermophysical properties of marine HFO qualities widely used in the marine industry, namely 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK, as prescribed by ISO 8217:2010. Fig. 24 summarizes the present HFO thermophysical properties model, illustrating the required input data set and the validated correlations utilized. Table 19 shows the model input values utilized in the present implementation, as well as the model output; the density and sulfur weight content correspond to the upper limits set by ISO 8217:2010 and the International Maritime Organization (IMO), respectively. The main bulk properties of fuel, density and viscosity, are affected by sulfur content; in this context, desulfurization processes is of significance (Ancheyta 2013). Taking into account that the present model utilizes both the bulk properties and the sulfur content as input, it is expected that it is also applicable to low sulfur HFOs.

The computed temperature dependence of density and kinematic viscosity is presented in Fig. 25 and Fig. 26, respectively, while the corresponding dependence of dynamic viscosity and vapor pressure, including the pseudo-critical point, is shown in Fig. 27 and Fig. 28, respectively. Fig. 29 shows the temperature dependence of heat of evaporation, and Fig. 30 depicts the sensible enthalpy versus temperature. The corresponding curves of surface tension and mass diffusivity (fuel vapor to air) are presented in Fig. 31 and Fig. 32, respectively. In all cases, data regarding the thermophysical properties of n-tetradecane (C₁₄H₃₀) are also included (API 1997), with the comparison indicating the substantial difference between the values corresponding to light and heavy hydrocarbons. These results demonstrate that the present thermophysical properties model can adequately describe the marine HFO qualities prescribed by ISO 8217:2010 in the frame of an one-component approach. Hence, the new model is deemed as a very promising calculation tool for CFD studies of HFO combustion in marine engines.



Fig. 24. Chart of the HFO thermophysical properties model developed in the present study. The input data set and the validated correlations used in the model are depicted (Kontoulis et al. 2018).

	Thermophysical property	10RMA	30RMB	80RMD	180RMG	380RMK	500RMK	700RMK
	Density at 288.15 K [kg/m ³]	920	960	975	991	1008.5	1010	1010
Input data cat	Kinematic viscosity at 323.15 K (50°C) [cSt]	10	30	80	180	380	500	700
Input data set	Kinematic viscosity at 373.15 K (100°C) [cSt]	3.36	7.25	13.7	22.9	35.6	42.1	51.8
	Sulfur weight content	3.5	3.5	3.5	3.5	3.5	3.5	3.5
	Specific gravity	0.92	0.96	0.98	0.99	1.01	1.01	1.01
	API gravity	22.17	15.76	13.5	11.15	8.68	8.47	8.47
	Molecular weight [gr/mole]	310.2	368.6	418.9	450	460.1	473.8	494.4
	Watson characterization factor	11.5	11.3	11.3	11.2	11.1	11.1	11.2
	Acentric factor	0.86	0.96	1.05	1.1	1.1	1.1	1.2
	Normal boiling point at 1 atm [K]	654.6	708.8	746.5	770.4	782	790.6	802.3
Results	Pseudo-critical temperature [K]	833.6	887.4	919.5	942.5	957.6	964.2	972.1
	Pseudo-critical pressure [bar]	14.6	13.3	11.9	11.4	11.6	11.3	10.7
	Carbon-to-hydrogen atomic ratio	0.77	0.9	0.94	1.0	1.09	1.09	1.06
	Specific heat capacity at 298.15 K [KJ/kgK]	1.427	1.391	1.394	1.381	1.354	1.358	1.369
	Enthalpy of formation at 298.15 K [KJ/kg]	607.4	836.4	802.9	432	728.5	764.3	1119.4
	LHV [KJ/kg]	41132	40556	40340	40110	39857	39836	39836
	CCAI	837	855	855	861	870	869	865

Table 19. Calculated thermophysical properties of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK, as per ISO 8217:2010, using the present model.

This page is intentionally left blank.



Fig. 25. Computed temperature dependence of density of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 26. Computed temperature dependence of kinematic viscosity of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 27. Computed temperature dependence of dynamic viscosity of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 28. Computed temperature dependence of vapor pressure of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 29. Computed temperature dependence of heat of evaporation of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 30. Computed temperature dependence of sensible enthalpy of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 31. Computed temperature dependence of surface tension of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 32. Computed temperature dependence of mass diffusivity (fuel vapor to air at 1 atm) of marine HFO qualities 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK according to ISO 8217:2010. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

5. HFO experimental studies and CFD modeling

5.1 HFO experimental studies

A major development for fundamental experimental studies in the context of large marine Diesel engines was accomplished in the course of the EU funded research project HERCULES. The HERCULES project, coordinated by Prof. N. Kyrtatos of NTUA, constitutes a long-term research initiative, aiming at developing novel engine technologies for reducing pollutant emissions and improving efficiency and reliability of marine engines (Kyrtatos et al. 2007, Kyrtatos et al. 2010, Kyrtatos et al. 2013). In this frame, a state-of-the-art experimental test facility, which is dedicated to spray and combustion studies under conditions similar to those of marine Diesel engines, was developed by ETH Zürich and Winterthur Gas & Diesel (see Fig. 33) (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015). The test facility is hosted in the premises of Winterthur Gas & Diesel in Winterthur.



Fig. 33. Spray and combustion test facility developed in the course of the HERCULES project by ETH Zürich and Winterthur Gas & Diesel (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

The development of the above mentioned experimental test facility enables detailed flow, spray, combustion and emission formation studies, under conditions relevant for large marine engines, at relevant physical dimensions (bore) and operational parameters (pressure, temperature), including flow characteristics (swirl) and low quality fuels (HFO). Thus, valuable experimental data can validate and support the development of CFD models, to be used in studying and optimizing flow and combustion in marine engines. It is noted that the majority of physical models used in engine CFD has been validated for geometries and conditions relevant for small or heavy duty engines (Takasaki et al. 2011, Pizza et al. 2007, Fink et al. 2008). However, the operating conditions of marine engines, especially large low-speed two-stroke marine engines, are substantially different, due to the following reasons (de Hoog et al. 2010):

- The injectors are located in the periphery of the cylinder cover, instead of the center.
- Two or three injectors (instead of one) are used per cylinder.
- Each injector carries multiple orifices with different spatial orientation and diameter.
- The orifice diameter is large (in the range of 1 mm).
- The injection and combustion duration are long.
- There is strong air swirling motion, due to the requirements of scavenging.
- The fuel and lubricant quality are different (MDO, MGO, HFO, cylinder oil).
- Due to the low speed (less than 200 rpm) and the large dimensions, both time and length scales are increased.

Hence, the novel experimental test facility described here is a major unique development, which is expected to substantially support worldwide research on large marine engines. A schematic of the experimental setup is shown in Fig. 34. The core element is a disk-shaped constant volume spray combustion chamber, with a diameter of 500 mm and a height of 150 mm, on which one exhaust valve is mounted and walls can be heated. A peripheral injection into a swirling gas flow is implemented, at the chamber mid-plane. Optical access is provided by sapphire windows (net diameter of 150 mm) mounted in eccentric revolvable window holders, located in rotatable covers. At the start of injection (SOI), conditions similar to those in a large marine engine are achieved (levels up to 13 MPa, 930 K) by feeding the chamber (via inclined intake channels achieving desired swirling motion) with pressurized and heated gas provided by pressure vessels connected to a heat regenerating system. The regenerator consists of numerous electrically heated plates and is shown in Fig. 35 connected to SCC. The charge gas could be either nitrogen or air, and is supplied via a pressure accumulating system. The system can operate with both MDO and HFO. Regarding HFO operation, it is supported by a fuel handling and preheating system (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

An improved "shadow-imaging" method, consisting of a pulsed diode laser light source and an appropriate narrow band pass filter (CWL 689.1 nm, T 60%, FWHM 10.6 nm), is applied for visualizing the macroscopic spray morphology inside the spray combustion chamber (Herrmann et al. 2011). A very short laser pulse within a 1 μ s exposure time of a high-speed CMOS-camera (20 kHz frame rate, 512x512 pixels) enables a high signal-tonoise ratio in the recordings.

For detecting the flame region in reactive cases, a high speed intensifier connected to a second high speed camera has been added to the experimental setup, in order to simultaneously record shadow images and ultraviolet (UV) light emitted from the combustion (Schmid et al. 2012). An appropriately configured setup is used to investigate the ignition location and flame lift-off length. In parallel, the global broadband light signal is recorded with a photo diode, allowing the measurement of the ignition delay independently of the recording rate, with a higher sampling rate.



Fig. 34. Schematic of spray combustion test facility (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).



Fig. 35. Constant volume SCC and regenerator (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

5.2 CFD modeling

Multidimensional CFD studies can substantially contribute to understand and optimize engine aerothermochemistry, provided the key in-cylinder processes such as spray break-up, evaporation, fuel-air mixing, ignition and combustion are properly accounted for. The detailed investigation of in-cylinder processes present in marine Diesel engines requires an understanding of several specific flow and combustion processes. CFD engine simulations commonly involve the numerical solution of the Reynolds averaged conservation equations for mass, momentum and energy (Stiesch 2003, Baumgarten 2006). In the present work, the KIVA-3 CFD code is utilized for implementing the present HFO modeling. Further, physical models (spray break-up, collision, evaporation, ignition, combustion, emissions) are adapted and extended in the context of HFO sprays.

5.2.1 KIVA-3 CFD code

The KIVA-3 code constitutes a powerful CFD platform for the numerical calculation of transient two- and three-dimensional chemically reactive fluid flows interacting with fuel sprays (Amsden et al. 1989; Amsden 1992). For instance, the in-cylinder flow of an engine is characterized by the transient three-dimensional dynamics of evaporating liquid fuel sprays interacting with the turbulent flow of multi-component gases. Concurrently, physical and chemical processes, such as mixing, heat transfer, ignition and combustion, are in progress. Some of the important features of the KIVA-3 code can be summarized as follows:

- Structured meshes are implemented.
- Block-structured grids are utilized.
- Arbitrarily shaped geometries can be modeled.
- Inflow/outflow boundaries can be utilized, e.g. air admission in the cylinder via ports.
- The effects of turbulence and wall heat transfer are accounted for.
- A wide variety of other applications, in addition to internal combustion engines, can be considered, e.g. Bunsen burner flames, hydrogen-oxygen flame propagation, etc.

In the present work, the standard equations of the k- ϵ turbulence model are used (Launder and Spalding 1972) in the frame of a KIVA-based CFD code (Amsden et al. 1989).

5.2.2 SCC Computational grid

The computational grid used in the present CFD studies corresponds to the disk-shaped constant volume SCC of ETH Zürich and Winterthur Gas & Diesel (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015). The chamber has a size of Ø500x150 mm, and the injector is located on the chamber periphery, 75 mm above the bottom, i.e. on the chamber mid-plane. Taking into account the large size of the chamber, as well as the (co-swirl) injection direction, preliminary simulations were deployed, aiming at detecting the active spray flow regime. Here, the scope has been the efficient generation of block-structured meshes, aiming at adequately resolving the spray regime, while maintaining a reasonable computational cost (Amsden 1992). The investigation converged to a sixty three block grid, characterized by a constant azimuthal resolution of 2.0 degrees. Fig. 36 shows the front and bottom views of a grid used in the present study. In the spray regime in front of the injector, the cells were characterized by equal increments in the x (radial) and z (vertical) direction; different grid densities were tested, characterized by cells of 4x4 mm, 2x2 mm and 1x1 mm in the active spray regime (see Fig. 37). Information regarding the three grids utilized in the detailed spatial

resolution studies is reported in Table 20 (Kontoulis et al. 2014, Kontoulis et al. 2018, Kontoulis et al. 2019).



Fig. 36. Front and bottom views of a grid used in SCC simulations. The grid consists of sixty three blocks.



Fig. 37. Sketch of a computational cell in the active spray flow regime.

Mesh (Ø500x150 mm)	Number of cells	Spray regime resolution ($\Delta x=\Delta z$)
Coarse	115,000	4mm
Fine	260,000	2mm
Very fine	720,000	1mm

Table 20. Features of the meshes utilized in spatial resolution tests.

5.3 Test cases

Both evaporating and non-evaporating non-reactive HFO spravs have been computed; the evaporating cases correspond to conditions and injection characteristics utilized in the experimental studies of von Rotz et al. (2011). Further, simulations have been performed for reactive HFO spravs, corresponding to new experiments (von Rotz, 2015). In the non-reactive evaporating cases, densities of the surrounding gas (nitrogen) of 11.2, 22.5 and 33.7 kg/m³ have been considered, and the results have been validated against the experiments reported in von Rotz et al. (2011), in terms of spray penetration length and cone angle. Finally, simulations of reactive HFO sprays have been performed, for a surrounding air density of 34.7 kg/m³ and temperatures of 915, 800 and 780 K; the results are compared against new experiments for two different HFO gualities, in terms of ignition delay and location. All cases are characterized by a strong swirling gas flow at the SOI, with velocities prescribed in terms of a Bessel function, corresponding to a solid body swirl angular velocity of 100 rad/s. The non-reactive and reactive cases computed are summarized in Table 21 and Table 22, respectively, while important input data with regard to the injection system (Demmerle and Heim 2004), fuel and boundary conditions are presented in Table 23 (Kontoulis et al. 2014, Kontoulis et al. 2018, Kontoulis et al. 2019).

Filling gas: nitrogen (N_2) – non-reactive flow					
Case	1	2	3	4	
Gas temperature [K]	900 (evaporating)			400 (non-evaporating)	
Gas pressure [bar]	90	60	30	40	
Gas density [kg/m ³]	33.7 22.5 11.2 33.7				
Swirl angular velocity [rad/s]	100 (Bessel function profile)				

Table 21. Non-reactive cases computed in the present stud	dy.
---	-----

Filling gas: air – reactive flow					
Case	5	6	7		
Gas temperature [K]	915	800	780		
Gas pressure [bar]	91.5	80	78		
Gas density [kg/m ³]	34.7				
Swirl angular velocity [rad/s]	100 (Bessel function profile)				

 Table 22. Reactive cases computed in the present study.

Table 23. Injection characteristics, initial fuel temperature and SCC wall temperature.

Injection system	Common Rail
Rail pressure [bar]	1000
Number of nozzle holes	1
Nozzle hole diameter [mm]	0.875
Injection orientation	co-swirl
HFO preheating temperature [°C]	120
Wall temperature [K]	453

5.4 HFO thermophysical properties

In CFD simulations, the performance of physical models accounting for the main incylinder processes, i.e. fuel spray break-up, evaporation, ignition and combustion, depends critically on the accuracy of the values of fuel thermophysical properties. In the present constant volume SCC simulations, the detailed model of HFO thermophysical properties presented in Chapter 3 is used for calculating the values and temperature dependence of the properties required in CFD modeling. The thermophysical properties model is applied to two different HFO gualities utilized in experiments, HFO #1a and HFO #3; the input data are based on measurements. The input data, as well as the resulting values of main properties, i.e. molecular weight, carbon-to-hydrogen atomic ratio, specific heat capacity, enthalpy of formation, lower heating value (LHV) and CCAI, characterizing the particular HFOs, are reported in Table 24; the data referring to HFO #1a have been presented in Chapter 3, and included once again for comparison. The computed temperature dependence of density and kinematic viscosity is presented in Fig. 38 and Fig. 39, respectively, while the corresponding dependence of dynamic viscosity and vapor pressure, including the pseudo-critical point, is shown in Fig. 40 and Fig. 41. Fig. 42 and Fig. 43 show the temperature dependence of heat of evaporation and sensible enthalpy, while the corresponding curves of surface tension and mass diffusivity (fuel vapor to air) are presented in Fig. 44 and Fig. 45, respectively. In all cases, data regarding the thermophysical properties of n-tetradecane ($C_{14}H_{20}$) are also included (API 1997), with the comparison indicating the substantial difference between the values corresponding to light and heavy hydrocarbons. The present modeling captures the expected better quality of HFO #3 compared to HFO #1 (Kontoulis et al. 2014, Kontoulis et al. 2019). The computed values of HFO thermophysical properties for both fuels have been imported to the fuel library of the KIVA-3 code.

C ₁₄ H ₃	are included for reference (API 1997).	•		C C
	Thermophysical property	HFO #1a	HFO #3	$C_{14}H_{30}$
	Density at 288.15 K	1001.1 kg/m ³	967.8 kg/m ³	765.7 kg/m ³
Input	Kinematic viscosity at 323.15 K	1255 cSt	186.8 cSt	1.841 cSt
data	Kinematic viscosity at 373.15 K	73.96 cSt	23.89 cSt	1.01 cSt
	Sulfur weight content	0.806%	1.8%	-
	Molecular weight	554.84 gr/mole	497.79 gr/mole	198.388 gr/mole
Results -	Carbon-to-hydrogen atomic ratio	0.977	0.864	0.467
	Specific heat capacity at 298.15 K	1.412 KJ/kgK	1.4484 KJ/kgK	1.639 KJ/kgK
	Enthalpy of formation at 298.15 K	1075 KJ/kg	597.2 KJ/kg	-1675.7 KJ/kg
	LHV	40826.2 KJ/kg	40987.7 KJ/kg	44019.6 KJ/kg

851

837

CCAI

Table 24. Measured and computed, utilizing the model reported in Kontoulis et al. (2018), values of thermophysical properties of HFO #1a and HFO #3, used in experiments. Corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are included for reference (API 1997).



Fig. 38. Computed temperature dependence of density of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 39. Computed temperature dependence of kinematic viscosity of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 40. Computed temperature dependence of dynamic viscosity of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 41. Computed temperature dependence of vapor pressure of HFO #1a and HFO #3, including the pseudo-critical point. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 42. Computed temperature dependence of heat of evaporation of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 43. Computed temperature dependence of enthalpy of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 44. Computed temperature dependence of surface tension of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 45. Computed temperature dependence of diffusivity (fuel to air) of HFO #1a and HFO #3. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

5.5 Fuel spray model

5.5.1 Basics of spray physics

Marine Diesel engines are direct injection engines, since the introduction of fuel into the combustion chamber is via fuel sprays, injected at high pressure. A main goal thereby is the enhancement of spray atomization, resulting in increased fuel surface area, and thus evaporation rate. For instance, taking into consideration that the evaporation rate is proportional to the overall surface area of the liquid fuel, the disintegration of a single 2 mm drop into approximately 8 million droplets of 10 µm increases the evaporation rate by a factor of 200 (Stiesch 2003). The fuel spray thus constitutes a governing factor to control the combustion process. Overall, the fuel jet propagates, breaks up and disperses into the compressed hot air; as a result, the enhancement of heat transfer between air and fuel increases the evaporation rate. Further, the high velocity fuel jet constitutes a major turbulence generation factor, for better air-fuel mixing by turbulent diffusion, resulting in an efficient combustion process.

Fig. 46 shows a schematic representation of a full-cone high-pressure spray (Baumgarten 2006). Modern injectors used in marine applications have nozzle holes with diameter up to 1 mm, with a design trend for minimal sac volume in order to decrease pollutant emissions (Pedersen et al. 2010). Important global characteristics of fuel spray, such as spray cone angle and penetration length, are defined in Fig. 46. After the SOI, the fuel jet leaves the nozzle hole and propagates into the combustion chamber. While the injector valve lift remains small, the break-up of the fuel jet is minimal due to the low injected mass flow rate, and the associated low levels of flow disturbances at the nozzle exit; the spray jet penetration increases linearly with time. For a fully open injector, the jet breaks up into ligaments and large drops at a distance from the nozzle tip (primary break-up). The large spray droplets break further into smaller ones (secondary break-up). Break-up processes are caused by the aerodynamic forces from the gas phase, and are counteracted by surface tension forces. Aerodynamic forces, especially on the liquid jet, are strongly affected by cavitation and turbulence in flow inside the nozzle, which substantially affect the level of flow (jet) disturbances at the nozzle exit. As aerodynamic forces depend on the square of relative velocity between the liquid and gas phase, spray primary break-up is enhanced at elevated injection pressures. Regarding the secondary break-up, the ratio of aerodynamic to surface tension forces, mainly affecting its dynamics, is expressed in terms of the dimensionless Weber number, as follows:

$$We_{g} = \frac{\rho_{g} \cdot u_{rel}^{2} \cdot d}{\sigma} \qquad (35)$$

where,

 ho_{g} is the density of the surrounding gas

 u_{rel} is the relative velocity between droplet and surrounding gas

d is the fuel droplet diameter

 $\sigma\,$ is the fuel surface tension

Another useful dimensionless number, that relates the liquid viscous forces to inertia and surface tension forces, is the Ohnesorge number, defined as:

$$Z = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \cdot \sigma \cdot d}} \qquad (36)$$

where,

- μ_{l} is the fuel dynamic viscosity
- ρ_l is the fuel density
- σ is the fuel surface tension
- d is the fuel droplet diameter



Fig. 46. Sketch of break-up of a full-cone fuel spray (Baumgarten 2006).

Various secondary break-up regimes have been identified in experimental studies, depending on the Weber number, as sketched in Fig. 47. The catastrophic break-up regime prevails in marine engine applications (Baumgarten 2006). In detail, Fig. 48 presents the classification of the secondary break-up regimes, based on the Weber and Ohnesorge numbers, for various fuels and engine conditions (Faeth et al. 1995), including HFO as modeled and tested in the present SCC simulations. Here, the exact HFO initial conditions (nozzle diameter and an HFO temperature of 120 °C) are accounted for. The transition Weber number value of 350 proposed by Liu and Reitz (1993), marked in Fig. 48, is adopted in the present simulations.



Droplet track Fig. 47. Secondary break-up regimes (Baumgarten 2006).



Fig. 48. Secondary break-up regimes defined in terms of the Weber and Ohnesorge numbers, for various fuels and engine conditions (Faeth et al. 1995). The HFO for the experimental conditions considered in the present study is also included. The adopted transition Weber number value of 350 for the catastrophic regime is marked (Liu and Reitz 1993).

5.5.2 Modeling

In the present simulations, modeling of the liquid fuel spray is achieved by implementing the CAB model calibrated for HFOs, while comparison studies against $\tau\eta\epsilon$ ETAB model are also reported. The CAB model constitutes an extension of the ETAB model; both models further develop the TAB model, introduced by O'Rourke and Amsden (1987). The TAB model considers an analogy between an oscillating drop penetrating into a gas (with a given relative velocity) and a forced damped spring-mass system (see Fig. 49). In particular, the following second order differential equation is considered for drop distortion:

$$\ddot{x} + \frac{d}{m} \cdot \dot{x} + \frac{\kappa}{m} \cdot x = \frac{F}{m} \qquad (37)$$

where,

x is the displacement of the droplet's equator from its equilibrium state

- m is the droplet mass
- d is the damping coefficient
- k is the spring coefficient
- F is the excitation force



Fig. 49. Sketch of deformed fuel drop and of the forced damped spring-mass system utilized in the TAB model (Baumgarten 2006).

It is convenient to introduce the non-dimensional displacement, y:

$$y = \frac{x}{0.5 \cdot r}$$
(38)

where,

r is the droplet radius in the idle (spherical) state

The TAB model assumes that break-up occurs for values of non-dimensional displacement higher than unity (y > 1). The damping coefficient depends on the viscous forces within the droplet (energy dissipation), while the spring coefficient depends on surface tension forces (which act towards minimizing the droplet distortion). The excitation force corresponds to the aerodynamic forces, which are proportional to the surrounding gas density. Specifically, the force terms of eq. (37) are modeled as follows:

Damping term:
$$\frac{d}{m} = \frac{5 \cdot \mu_l}{\rho_l \cdot r^2}$$
 (39)
Spring term: $\frac{k}{m} = \frac{8 \cdot \sigma_l}{\rho_l \cdot r^3}$ (40)

Excitation term:
$$\frac{F}{m} = \frac{2 \cdot \rho_g \cdot u_{rel}^2}{3 \cdot \rho_l \cdot r^2}$$
 (41)

where,

 μ_i is the fuel dynamic viscosity

 ρ_l is the fuel density

r is the droplet radius in the idle (spherical) state σ is the fuel surface tension

 $ho_{_g}$ is the density of the surrounding gas

 u_{rel} is the relative velocity between the droplet and the surrounding gas

The TAB model assumes initial zero values for both the non-dimensional droplet deformation (y_0) and deformation velocity (\dot{y}_0). An improvement of the TAB model, maintaining the model dynamics, was proposed by Tanner in the context of the ETAB model (Tanner 1997). The modifications introduced in ETAB concern the initial droplet size distribution, the initial conditions with respect to the deformation velocity (\dot{y}_0), and the calculation of the size and number of the product droplets after break-up (Tanner and Weisser 1998). As a result, the ETAB model predicts a more realistic value of spray dense core length, as well as a proper drop size distribution near the nozzle.

In ETAB, the initially injected droplets follow a power law size distribution (IDSD), accounting for droplet surface stripping close to the nozzle exit. The IDSD is specified as follows:

$$f(r) = \frac{n+1}{r_0} \cdot \left(\frac{r}{r_0}\right)^n \quad (42)$$

where, r is the droplet radius r_0 is the nozzle radius n is a constant, with a suggested value of 0.5

The implementation of IDSD in the KIVA-3 code requires a suitable adaptation, since the droplets are injected in the form of parcels, following the practical approach known as the discrete droplet model (Dukowicz 1980). Each parcel constitutes a group of droplets with identical size, temperature and velocity. The requirement of injecting parcels with identical mass transforms eq. (42) into the following IDSD for injected parcels (Amsden et al. 1989):

$$g(r) = \frac{n+4}{r_0} \cdot \left(\frac{r}{r_0}\right)^{n+3}$$
(43)

Further, the choice of the initial deformation velocity ($\dot{y}_0 \neq 0$) is based on the consideration that the first break-up of an injected drop takes place at a certain distance from the nozzle tip, L_b , which is calculated via the following experimental correlation:

$$L_{b} = U_{inj} \cdot t_{bu} = C_{\lambda} \cdot d_{0} \cdot \sqrt{\frac{\rho_{l}}{\rho_{g}}} \qquad (44)$$

where,

 U_{ini} is the jet exit velocity

- t_{hu} is the drop break-up time
- C_{λ} is a constant depending on nozzle design
- d_0 is the nozzle diameter
- ρ_{l} is the fuel density
- ho_{g} is the density of the surrounding gas

The initial spray cone angle, θ , can be calculated from the following correlation:

$$\tan(\frac{\theta}{2}) = C_a \cdot \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \qquad (45)$$

where,

 C_a is a constant depending on nozzle design

 $\rho_{\scriptscriptstyle \varrho}$ is the density of the surrounding gas

 ρ_{l} is the fuel density

The constants C_{λ} and C_{a} are determined from experimental measurements, and considered as calibration parameters of the ETAB model.

Finally, the ETAB model considers that the product droplet number and size is related to the break-up time, in contrast to the TAB model; in the latter, a conservation law for the kinetic and surface energy is utilized, while a necessary condition for drop break-up is achieved for $We > We_{cr}$, where $We_{cr} = 6.0$ (experimentally determined). In ETAB, the rate of product droplet generation is proportional to the number of product droplets, as follows:

$$\frac{dN(t)}{dt} = 3 \cdot K_{bu} \cdot N(t)$$
 (46)

The proportionality constant K_{bu} depends on the break-up regime (see Fig. 47 and Fig. 48). The ETAB model accounts for two regimes, namely, bag and stripping break-up. Correspondingly, the constant K_{bu} is specified as follows:

$$K_{bu} = \begin{cases} k_1 \cdot \omega, & \text{if } We_{cr} < We \le We_t \ (bag \ break - up) \\ k_2 \cdot \omega \cdot \sqrt{We}, & \text{if } We > We_t \ (stripping \ break - up) \end{cases}$$
(47)

where,

 k_1 and k_2 are model constants based on experimental drop sizes ω is the droplet oscillation frequency We is the Weber number of the drop before break-up We_{cr} is the critical Weber number

 We_t is the transition Weber number between bag and stripping break-up, with a suggested value of 80.

It is noted that a proper smooth function is utilized in the calculation of the proportionality constant K_{bu} for the transition between the two regimes.

Recently, Tanner further developed the ETAB model and proposed the CAB model (Tanner 2004). In particular, an extended frame for the calculation of the proportionality constant K_{bu} was proposed to include the catastrophic break-up regime, as follows:

$$K_{bu} = \begin{cases} k_1 \cdot \omega, \text{ if } We_{cr} < We \leq We_{b,s} \text{ (bag break-up)} \\ k_2 \cdot \omega \cdot \sqrt{We}, \text{ if } We_{b,s} < We \leq We_{s,c} \text{ (stripping break-up)} \\ k_3 \cdot \omega \cdot We^{3/4}, \text{ if } We > We_{s,c} \text{ (catastrophic break-up)} \end{cases}$$
(48)

where,

 k_1 , k_2 and k_3 are model constants based on experimental drop sizes ϖ is the droplet oscillation frequency

 $\mathit{W\!e}\,$ is the Weber number of the drop before break-up

 We_{cr} is the critical Weber number

 $We_{b,s}$ is the transition Weber number between bag and stripping break-up, with a suggested value of 80 (Liu and Reitz 1993)

 $We_{s,c}$ is the transition Weber number between stripping and catastrophic break-up, with a suggested value of 350 (Liu and Reitz 1993).

In the CAB model, the transition between the individual break-up regimes, as expressed by K_{bu} , is considered as continuous. Consequently, only the value of k_1 needs to be determined, offering simplicity. In Fig. 50, K_{bu} is presented as a function of Weber number, characterizing the transitions between the break-up regimes. Here, both the ETAB and the CAB models are accounted for. In particular, the ETAB constants k_1 and k_2 are both equal to 0.2222 (Tanner 1997), while a value of 0.05 can be used for the CAB constant k_1 (Tanner 2004). In the present simulations of HFO using CAB, optimal calculation of K_{bu} corresponds to a value of k_1 equal to 0.13, obtained by utilizing experimental results of HFO spray development in the SCC of von Rotz et al. (2011).



Fig. 50. Proportionality constant K_{bu} versus Weber number for the ETAB and CAB models. The optimal K_{bu} curve corresponding to the present studies of HFO sprays is also included.

The calculation of droplet oscillation frequency ω is based on the following formula (O'Rourke and Amsden 1987):

$$\omega^2 = \frac{8 \cdot \sigma}{\rho_l \cdot r^3} - \frac{25 \cdot \mu_l^2}{4 \cdot \rho_l^2 \cdot r^4} \quad (49)$$

where, σ is the fuel surface tension

 ρ_l is the fuel density

 μ_{l} is the fuel dynamic viscosity

r is the droplet radius

In the present study, all thermophysical properties used in eq. (49) accommodate the temperature dependence (Kontoulis et al. 2018). Furthermore, the calculation of the initial spray angle in the CAB model is simpler, and makes no use of eq. (45). In the present study, the initial spray angle calculation utilizes, for both the CAB and the ETAB model, the standard approach of the KIVA-3 code, which does not account for a correction to a prescribed spray angle (Amsden et al. 1989).

It is worth mentioning that, in comparison to the ETAB model, the CAB model predicts higher ratios of child to parent droplet radius, in the entire Weber number range. Consequently, an improved representation of a fragmented liquid core is attained, which results in a more realistic prediction of the overall spray structure and the droplet size distribution (Tanner 2004).

The above values suggested in the literature regarding the CAB and ETAB model constants are based on MDO spray experiments. Thus, calibration of model constants is essential for CFD studies of HFO sprays. The constants used in the CAB and ETAB models are presented in Table 25.

Constants	Description	CAB	ETAB
θ	spray angle [deg.]	Yes	No
C_a	initial jet break-up angle	No	Yes
C_{λ}	jet break-up length	5.5	10.0
k_1	time scale parameter for 'bag break-up'	0.13	0.2222
<i>k</i> ₂	time scale parameter for 'stripping break-up'	calculated	0.2222
<i>k</i> ₃	time scale parameter for 'catastrophic break-up'	calculated	No
п	exponent in IDSD	Yes	Yes

Table 25. Constants of the CAB and ETAB fuel spray models.

Fig. 51 shows the comparison between the resulting HFO penetration length time history calculated using the CAB and ETAB models, for the conditions of Case 1 (introduced in Table 21). Here, the IDSD either follows a power law with a constant value of n, equal to 1.5 and 0.5 for the CAB and the ETAB model, respectively, or is assumed uniform (monodisperse, $d_{droplet} = d_{orifice}$). The experimental results of von Rotz et al. (2011) are also included in Fig.

51. The results demonstrate that both the CAB and ETAB models predict very well the spray penetration history. In particular, for the CAB model, the agreement with experiments is excellent, irrespective of IDSD. The ETAB model also predicts very accurately the spray propagation for a monodisperse IDSD, while discrepancies with experiment are observed for the case of a power law IDSD, in particular after the primary break-up. The observed trend of a higher computed penetration length in the case of CAB model should be attributed to the higher ratios of child to parent drop radius, and is in accordance with the persistent dense core observed in the HFO spray experiments reported in von Rotz et al. (2011). The computational results are further analyzed in terms of visualizations of the flow field. In particular, Fig. 52 presents snapshots of HFO vapor mass fraction at 1.5 ms after SOI, at the horizontal plane including the injector. The visualizations show that there are significant differences in the spray evaporation between the CAB and the ETAB model during the early injection stages; ETAB predicts a faster evaporation, especially in the case of a power law IDSD. This is a consequence of the presence of smaller drops, and may be important for spray ignition and combustion. With a monodisperse IDSD, at 1.5 ms after SOI, evaporation is hardly present in the case of the CAB model, while it only occurs close to the spray tip with ETAB. In summary, IDSD can be an important factor affecting HFO spray evaporation, and thus air-fuel mixing and reactive flow, in accordance with observations regarding MDO sprays (Tanner 2004).

The results presented above suggest that the CAB model is appropriate for HFO sprays, in particular accompanied by a power law IDSD. Hence, it is important to investigate the sensitivity of spray dynamics on the values of exponent n. Fig. 53 thus presents the spray penetration time history for the conditions of Case 1 for several n values, illustrating that spray penetration is insensitive to values of n. Nonetheless, the value of exponent n can play an important role, especially in reactive spray flow. The optimal values attained in the present study for HFO spray simulations using CAB model are presented in next sub section.



Fig. 51. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³): Calculated HFO penetration length versus time, utilizing the CAB and ETAB models, for two different IDSD, corresponding to a power law and a monodisperse IDSD. The power law IDSD for the CAB and the ETAB model is characterized by values of the exponent n equal to 1.5 and 0.5, respectively. The corresponding experimental curve of von Rotz et al. (2011) is also included.



Fig. 52. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m^3): color-coded contours of HFO vapor mass fraction at a plane including the injector, at 1.5 ms after SOI, utilizing the CAB and ETAB models for two different IDSD, corresponding to a power law IDSD and a monodisperse IDSD. The power law IDSD for the CAB and the ETAB model is characterized by values of the exponent *n* equal to 1.5 and 0.5, respectively.



Fig. 53. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³): HFO spray penetration length time history using the CAB model, for power law IDSD, for different values of the exponent n. The corresponding experimental curve of von Rotz et al. (2011) is also included.

5.5.3 CAB spray model adaptation for HFO

Calibration of the CAB spray model for HFO was performed using HFO #1a, for operating conditions corresponding to Case 1 and Case 5 (introduced in Table 21 and Table 22, respectively), using the fine mesh (see Table 20). Both cases are perceived as demanding, as they involve break-up, evaporation (Case 1) and combustion (Case 5), while they also correspond to conditions similar to those of marine engines. Spray propagation can be characterized by the evolution of the penetration of its tip versus time after SOI (Arcoumanis et al. 1997). A good agreement between the computed and measured time history of penetration length, as well as ignition delay and location were used as the main criteria for calibrating the CAB spray model. It is noted that the value of exponent n (see eq. (43)) plays an important role, especially in reactive spray flow. In calibrating the spray model for HFO, the value of the initial spray angle, depending on the gas density, is prescribed based on experimental measurements (von Rotz et al. 2011). The optimal constant values obtained are reported in Table 26; these values were maintained for all other cases computed (Kontoulis et al. 2019).

Constant	Description	Value
θ	Initial spray cone angle (deg.)	10-16
C_{λ}	jet break-up length	5.5
<i>k</i> ₁	time scale parameter for 'bag break-up'	0.13
n	exponent in IDSD	0.6

Table 26. Optimal values of CAB model constants for HFO.

5.6 Collision model

The disintegrated droplets of a spray jet may undergo collisions, especially close to nozzle and near the spray axis, due to their velocity trajectories and the minimal void space between each other. As a result, the size, the mass, the velocity, even the number of droplets could be changed, with substantial impact on the evaporation and fuel-air mixing.

The following dimensionless numbers can fully characterize the collision process between two spherical droplets with different size (Baumgarten 2006):

collision Reynolds number

$$Re_{coll} = \frac{\rho_l \cdot u_{rel}^2 \cdot d_1}{\mu_l} \qquad (50)$$

collision Weber number

$$We_{coll} = \frac{\rho_l \cdot u_{rel}^2 \cdot d_2}{\sigma}$$
 (51)

droplet diameter ratio

$$\Delta = \frac{d_2}{d_1} \qquad (52)$$

impact parameter

$$\mathbf{B} = \frac{2 \cdot \mathbf{X}}{d_1 + d_2} \tag{53}$$

where,

 ρ_l is the fuel droplet density

 μ_l is the fuel droplet dynamic viscosity

 $\sigma\,$ is the fuel surface tension

 u_{rel} is the relative velocity of droplets

- d_1 is the fuel droplet with the bigger diameter
- d_2 is the fuel droplet with the smaller diameter

X is the projection of the distance between the droplet centers in the direction normal to that of relative velocity of droplets (see Fig. 54).



Fig. 54. Geometric collision parameters (Baumgarten 2006).

It is noted that the main parameters affecting a collision event are the surface tension, which tends to maintain the drops integrity, and the kinetic energy of droplets, that is striving to disintegrate the droplets. The potential droplet collision regimes prescribed by the collision Weber number and impact parameter, as well as the corresponding droplet-to-droplet interaction mechanisms are illustrated in Fig. 55 (Baumgarten 2006). In the present HFO spray simulations, the standard collision model of the KIVA-3 code is utilized, in which only the coalescence and stretching (grazing collision) are taken into account by a droplet sampling procedure for a pair of particles present in the same computational cell (Amsden et al. 1989).



Fig. 55. Droplet collision regimes as function of the collision Weber number and impact parameter (left), and the corresponding mechanisms (right) (Baumgarten 2006).
5.7 Evaporation model

The new model of marine HFO thermophysical properties presented in the present study considers marine HFO as an equivalent one-component heavy petroleum fraction of undefined composition (Kontoulis et al. 2018). Hence, a single-component evaporation model is utilized in the CFD studies presented subsequently.

The energy balance of a single drop can be expressed as follows (Baumgarten 2006, Borman and Johnson 1962):

$$\dot{Q}_{drop} = \dot{Q}_{heating} + \dot{Q}_{evap}$$
 (54)

where,

 Q_{drop} is the total energy flux from the hot surrounding gas to the liquid droplet $\dot{Q}_{heating}$ is the thermal power corresponding to the heat-up of the liquid droplet

 ${\it Q}_{\rm evap}$ is the thermal power for evaporating the corresponding fuel mass flux

It is worth noting that the above energy equilibrium neglects the power related to superheating of the fuel vapor. The thermal power terms in the RHS of the above equation are calculated as follows:

$$\dot{Q}_{heating} = m_{drop} \cdot c_{p,l} \cdot \frac{dT_{drop}}{dt}$$
(55)

$$\dot{Q}_{evap} = \Delta h_{evap} \cdot \frac{dm_{evap}}{dt}$$
 (56)

where,

 m_{drop} is the instantaneous liquid fuel droplet mass

 $c_{n,l}$ is the specific heat capacity of the liquid fuel

 T_{drop} is the instantaneous liquid fuel droplet temperature

 Δh_{evap} is the latent heat of evaporation

 $\frac{dm_{evap}}{dt}$ is the evaporating mass flow rate

Hence, by considering the above three equations, the following equation is derived for the droplet temperature change rate:

$$\frac{dT_{drop}}{dt} = \frac{1}{m_{drop} \cdot c_{p,l}} \cdot \left(\frac{dQ_{drop}}{dt} - \Delta h_{evap} \cdot \frac{dm_{evap}}{dt}\right) \quad (57)$$

Thus, determination of the temperature time derivative requires a proper modeling of the total power transferred to the drop (due to convection), and of the evaporation rate.

Considering the Nusselt number definition, as well as the effect of fuel vapor superheating,

the total power transferred to the fuel drop, Q_{drop} , can be expressed as:

$$\dot{Q}_{drop} = \lambda_g \cdot \pi \cdot d_{drop} \cdot (T_{\infty} - T_R) \cdot \frac{\varsigma}{e^{\varsigma} - 1} \cdot Nu \quad (58)$$
$$Nu = \frac{\alpha \cdot d_{drop}}{\lambda_g} \quad (59)$$

$$\varsigma = \frac{\dot{m}_{evap} \cdot c_{p,vap}}{Nu \cdot \lambda_g \cdot \pi \cdot d_{drop}}$$
(60)

where,

 $\lambda_{_{o}}$ is the thermal conductivity of the gas phase

 $d_{\scriptscriptstyle drop}$ is the liquid fuel droplet diameter

 T_{∞} is the surrounding gas temperature

 T_{drop} is the liquid droplet temperature

 ς is a correction factor accounting for the superheating of fuel vapor

Nu is the Nusselt number

 $\boldsymbol{\alpha}~$ is the convection heat transfer coefficient

 $c_{p,vap}$ is the specific heat capacity of the fuel vapor

 \dot{m}_{evap} is the evaporating mass flow rate

In flow past a sphere, the Nusselt number, Nu, depends on the flow Reynolds number, Re, and on the Prandtl number, Pr, of the fluid (in engine applications, the gas phase). Here, the formula of Ranz and Marshall (1952) is used for calculating Nu:

$$Nu = 2.0 + 0.6 \cdot \mathrm{Re}^{1/2} \cdot \mathrm{Pr}^{1/3} \quad (61)$$

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho_{\infty} \cdot u_{rel} \cdot d_{drop}}{\mu_{g}} \quad (62)$$

$$\Pr = \frac{\mu_g \cdot c_{p,g}}{\lambda_g} \qquad (63)$$

where,

 $ho_{\scriptscriptstyle\infty}$ is the density of the surrounding gas

 u_{rel} is the relative velocity between droplet and surrounding gas

 d_{drop} is the droplet diameter

 μ_{a} is the dynamic viscosity of the surrounding gas

 $c_{p,g}$ is the specific heat capacity of the surrounding gas

 $\lambda_{_g}$ is the thermal conductivity of the gas phase

The calculation of the evaporating mass flow rate, $\frac{dm_{evap}}{dt}$, accounts for the overall effect of convection and diffusion (Turns 1996):

$$\dot{m}_{evap} = d_{drop} \cdot \pi \cdot \rho \cdot D \cdot \ln\left(\frac{1 - Y_{f,\infty}}{1 - Y_{f,R}}\right) \cdot Sh \qquad (64)$$

$$Sh = 2.0 + 0.6 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot Sc^{1/3}$$
 (65)

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g \cdot D}$$
 (66)

where,

 d_{drop} is the droplet diameter

 ρ is the density of liquid fuel droplet

D is the diffusion coefficient of fuel vapor in air

 $Y_{\rm f,\infty}$ is the fuel vapor mass fraction far from the liquid droplet

 $Y_{\rm f,R}$ is the fuel vapor mass fraction at the liquid droplet surface, quantified by Raoult's law

Sh is the Sherwood number

 $Re \ \mbox{is the Reynolds number}$

Sc is the Schmidt number of the gas phase

 $\mu_{\rm g}$ is the dynamic viscosity of the surrounding gas

 ho_{g} is the density of the surrounding gas

5.8 Ignition model

The ignition model used in the present simulations of reactive HFO sprays is based on the simplified kinetic ignition model developed by Weisser et al. (1998), in which the value of an ignition progress variable, governing the ignition delay through the transport conservation equation (67), serves as the ignition criterion. The ignition progress variable, C_{ig} , is a non-dimensional quantity, defined as the concentration of an intermediate species divided by a critical value. A computed value of the ignition progress variable greater than unity signals ignition for the corresponding computational cell, and activates the combustion model.

$$\frac{\partial(\rho_s C_{ig})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s C_{ig} u) = \nabla \cdot (\rho_s D \nabla C_{ig}) + \frac{\rho_s}{\tau}$$
(67)

where, ρ_s , u, D are the density, velocity and effective diffusivity of the surrounding gas, respectively. Modeling of the overall ignition delay, τ , utilizes the simplified system of characteristic times, as shown in Fig. 56, and is calculated by the following expression:



Fig. 56. The simplified system of characteristic times τ_1 , τ_2 and τ_3 representing the low, medium and high temperature ignition chemistry regimes, as suggested by Weisser et al. (1998) to describe the overall ignition delay, τ .

τ

In eq. (69), the characteristic times τ_1 , τ_2 and τ_3 represent the low, medium and high temperature ignition chemistry regimes, respectively, and are computed from the following Arrhenius type correlations, taking into account the pressure, p, and temperature, T, of the surrounding gas, as well as the local equivalence ratio, φ :

$$\tau_{i} = A_{i} \cdot \left(\frac{p}{p_{ref}}\right)^{a_{i}} \cdot T^{b_{i}} \cdot \exp\left[\frac{B_{i}}{T}\right] \cdot h_{i}(\varphi), \quad i = 1, 2, 3$$
(69)

where, A_i , a_i , b_i , B_i are the kinetic model constants. The simplified kinetic ignition model was applied to a detailed chemistry mechanism for n-heptane (C₇H₁₆) with excellent results (Weisser et al. 1998).

Recent computational studies utilizing a simple representation of HFO composition include a two-component approach, with the two components representing a residual (heavy) and a cutter (light) part (Goldsworthy 2006; Struckmeier et al. 2010; Stamoudis et al. 2014). The approach yields an adequate representation of combustion of various HFO qualities in constant volume combustion chambers and marine engines (Takasaki et al. 2011; Struckmeier et al. 2009). It is worth noting that Goldsworthy (2006) and Stamoudis et al. (2014) have utilized the simplified kinetic ignition model of Weisser et al. (1998), whereby one of the main model parameters for accounting for different HFO qualities is the constant B_3 , related to the activation energy in the high temperature ignition chemistry regime (eq. 69). Poor HFO qualities are evidently associated with high values of activation energy.

Moreover, Hardenberg and Hase (1979) have developed an empirical Arrhenius type formula for calculating ignition delay in direct injection (DI) engines, taking into account the diesel fuel cetane number (CN); the lower the CN, the higher the apparent activation energy (Heywood 1988). Further, Vandersickel et al. (2012) carried out experimental measurements of ignition delay of n-heptane and two practical kerosene-like fuels in a high pressure shock tube for homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine relevant conditions, while a phenomenological ignition kinetic model was suggested based on the characteristic time model of Weisser et al. (1998). Specifically, an extension in eq. (69) was proposed by adding a simple power law term and a weighted exponential term, to account for the effects of exhaust gas recirculation (EGR). The extended model was shown to perform well against experimental measurements of ignition delay times (Vandersickel et al. 2012).

HFOs with a high aromatic content are characterized by poor ignition and combustion quality, due to the high aromaticity of asphaltenes. CCAI, by its definition, characterizes the fuel aromatic content, and is used to rank the quality of marine HFO in terms of ignition. Schenk et al. (1998) have confirmed that CCAI constitutes the most appropriate index for HFO ignition quality. The calculation of CCAI is based on an empirical correlation that correlates CCAI with density (in kg/m³) and kinematic viscosity (in cSt) in eq. (7) (Wauquier 1995). High values of CCAI correspond to poor fuel ignition quality. The relation between CCAI values and marine HFO ignition quality is presented in Table 8 (Klianis et al. 2002).

Considering the above, a new extension of the kinetic model proposed by Weisser et al. (1998), and described by the eq. (69), is suggested in the present study, and used in all reactive flow simulations (Kontoulis et al. 2019). The new extension accounts for the effect of aromaticity of different HFO qualities on ignition delay, as demonstrated in experimental studies of HFO sprays in the SCC, under conditions relevant for large marine engines. Here, the calculation of the overall ignition delay is still based on pressure, p, and temperature, T, of the surrounding gas, and on the local equivalence ratio, φ , but the CCAI, characterizing the HFO quality, is also utilized:

$$\tau = f(p, T, \varphi, CCAI) \tag{70}$$

In particular, the influence of fuel aromaticity, indicated by CCAI, on ignition delay is accounted for by adding an additional weighted exponential factor in eq. (69); thus, ignition delay is reduced or prolonged, due to the associated fuel aromaticity. In this context, activation energy increases with increasing CCAI. The proposed Arrhenius type correlations for the characteristic times describing the three individual temperature ignition chemistry regimes are:

$$\tau_i = A_i \cdot \left(\frac{p}{p_{ref}}\right)^{a_i} \cdot T^{b_i} \cdot \exp\left[\frac{B_i}{T} + C_i \cdot CCAI\right] \cdot h_i(\varphi), \quad i = 1, 2, 3$$
(71)

where, A_i , a_i , b_i , B_i , C_i , are the kinetic model constants. Ignition delay is in seconds, temperature in deg. Kelvin, while the reference pressure is set equal to 1 bar.

Experiments of reactive HFO sprays have been carried out in the SCC (von Rotz, 2015), providing valuable data for validating and supporting ignition and combustion modeling. Specifically, the measurements of ignition delay concern the two HFO qualities (HFO #1a and HFO #3 described in Table 24), for a constant ambient air pressure of 90 bar, various temperature levels, and a strong swirling gas flow; injection characteristics and HFO preheating temperature have already been reported in Table 23. The present experiments demonstrate a consistent higher ignition delay for HFO #1a in comparison to HFO #3, with the absolute difference in ignition delay times decreasing at higher temperature. This observation is in accordance with the CCAI values computed with the present HFO thermophysical properties model: CCAI equal to 851 for HFO #1a (moderate ignition quality), CCAI equal to 837 for HFO #3 (good ignition quality) (see Table 24).

Based on the experiments reported in Kontoulis et al. (2019), the parameter values of the new extended ignition model (eq. 71) have been calibrated, and are presented in Table 27, also including the corresponding values for n-heptane (C7H16) suggested by Weisser et al. (1998). Here, data analysis has utilized quantities as the coefficient of determination (R^2) and the root mean square error (RMSE), resulting in a high quality of the fitting. Fig. 57 shows the measured (mean values) and computed (based on eq. 71) ignition delay as a function of temperature for HFO #1a and HFO #3, for a pressure of 90 bar and stoichiometric conditions. The calculated ignition delay for the limits of CCAI range of Table 8 is also presented. For comparison, corresponding results for the n-heptane (C_7H_{16}) are also included (Weisser et al. 1998). The present ignition model confirms a longer ignition delay for HFO compared to nheptane (C_7H_{16}), while the increase of HFO ignition delay is related to fuel aromaticity in terms of CCAI, as a main control parameter determining activation energy (Goldsworthy 2006; Heywood 1988). In particular, HFO with very good ignition quality (CCAI=790) is characterized by short ignition delay times, while poor ignition quality HFO (CCAI=950) is characterized by long ignition delays. Further, the present model captures very well the different ignition behavior of HFO #1a and HFO #3, in accordance with the experimental results. Overall, the present ignition modeling approach is deemed very promising for CFD studies of HFO combustion in marine engines.

		A _i		a_i b_i		B_i		C_i		$h_i(\varphi)$			
	Fuel	C ₇ H ₁₆	HFO	C_7H_{16}	HFO	C ₇ H ₁₆	HFO	C ₇ H ₁₆	HFO	C_7H_{16}	HFO	C_7H_{16}	HFO
SS	1	2.39·10 ⁻¹¹	3.74·10 ⁻¹⁵	-0.1		0	1	140	00	0	1.196·10 ⁻²	1	
roce	2	1.33·10 ⁵	1.04·10 ⁴	-2.125		0	1	-100	000	0	4.979·10 ⁻³	φ	-1
ш	3	2.5·10 ⁻⁸	1.62·10 ⁻¹¹	-1		0		140	00	0	9.497·10 ⁻³	1	

Table 27. Extended ignition model constant values for HFO, as computed in the present study. The corresponding values for n-heptane (C₇H₁₆) are also included (Weisser et al. 1998). Ignition delay is in seconds, and temperature in deg. Kelvin. The reference pressure is 1 bar.

This page is intentionally left blank.



Fig. 57. P=90 bar, $\varphi = 1$: experimental (mean values) and calculated ignition delay times as a function of temperature for HFO #1a, HFO #3, and two fuels with CCAI value in the upper and low limit of the range considered in Klianis et al. (2002). Corresponding data for n-heptane (C₇H₁₆) are also included (Weisser et al. 1998).

5.9 Combustion model

In the present study, combustion modeling utilizes the characteristic time model of Kong et al. (1995), in which the change of the concentration of each species (fuel, O₂, N₂, CO₂, H₂, H₂O and CO) due to combustion is expressed in terms of the actual and equilibrium concentration, Y_i and Y_i^{eq} , as well as the characteristic combustion time scale, τ_c , as follows:

$$\frac{dY_i}{dt} = -\frac{Y_i - Y_i^{eq}}{\tau_c} \qquad (72)$$

The τ_c parameter is defined as the sum of the laminar and turbulent time scales, τ_{lam} and τ_{turb} , according to the following equation:

$$\tau_c = \tau_{lam} + f \cdot \tau_{turb}$$
 (73)

The calculation of T_{lam} is derived from the following Arrhenius type correlation taking into account the local concentration of fuel and oxidizer:

$$\tau_{lam} = A^{-1} \cdot \left[C_n H_{2n+2} \right]^{0.75} \cdot \left[O_2 \right]^{-1.5} \cdot \exp\left[\frac{E}{RT} \right]$$
(74)

where,

A is the pre-exponential factor

E is the activation energy, in KJ / kg

R is the specific gas constant, in $KJ / kg \cdot K$

T is the local temperature, in K

The turbulent time scale, τ_{turb} , is specified as follows:

$$\tau_{turb} = C_m \cdot \frac{k}{\varepsilon} \qquad (75)$$

where,

 C_m is a factor accounting for the mixing characteristics

k is the turbulent kinetic energy, in *KJ* / kg

 \mathcal{E} is the dissipation rate in $KJ / kg \cdot s$

The weight factor f accounts for the fact that the turbulent microscale mixing becomes increasingly more critical compared to chemistry kinetics as combustion is evolved (Stiesch 2003). To this end, the calculation of f takes into account the local composition as follows:

$$f = \frac{1 - e^{-r}}{0.632}$$
 (76)

The parameter r specifies the local 'completeness' of combustion, and is defined as the ratio of the amount of products to that of total reactive species (except N₂), as follows:

$$r = \frac{Y_{CO_2} + Y_{H_2O} + Y_{CO} + Y_{H_2}}{1 - Y_{N_2}}$$
(77)

It is worth noting that the value of r varies from zero to unity for unburned and completely burned mixture, respectively. Consequently, the value of f also varies within the range from zero to unity, depending on local conditions.

5.10 NO_x model

In the present study, a NO_X model as outlined in Weisser (2001) is used; the chemical mechanism is presented in Table 28. The model accounts for thermal NO formation, and its core is based on the extended Zeldovich mechanism (Lavoie et al. 1970), while also considering the formation of N₂O through a three-body reaction of N₂ and oxygen radical (Malte and Pratt 1974).

 $N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$ (78)

 $N + O_2 \rightleftharpoons NO + O$ (79)

 $N + OH \rightleftharpoons NO + H$ (80)

The model also accounts for NO₂ formation. Overall, the model affects the temporal evolution of the species involved, determined from the solution of corresponding conservation equations, using the chemistry source term. It is noted that the present chemical scheme only accounts for the formation of thermal NO, since the formation of prompt NO (Fenimore 1971) is of minor importance in Diesel engines (Pundir 2007).

Reaction	A_{NO_x}	b_{NO_x}	T_{A,NO_X} [K]
$N + NO \rightarrow N_2 + O$	3.30e+12	0.3	0
$N_2 + O \rightarrow N + NO$	6.68e+12	0.4	37707.29
$N + O_2 \rightarrow NO + O$	6.40e+09	1.0	3160.54
$NO + O \rightarrow N + O_2$	5.62e+08	1.1	19086.52
$N + OH \rightarrow NO + H$	3.80e+13	0	0
$NO + H \rightarrow N + OH$	1.29e+15	-0.3	24574.68
$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH$	2.10e+12	0	-241.07
$NO_2 + OH \rightarrow NO + HO_2$	8.45e+12	0.02	2971.32
$NO_2 + H \rightarrow NO + OH$	3.50e+14	0	754.91
$NO + OH \rightarrow NO_2 + H$	9.46e+09	0.81	15089.38
$N_2O + H \rightarrow N_2 + OH$	7.60e+13	0	7649.72
$N_2 + OH \rightarrow N_2O + H$	5.73e+07	1.31	38531.49
$N_2O + M \rightarrow N_2 + O + M$	1.60e+14	0	25968.8
$N_2 + O + M \rightarrow N_2O + M$	5.21e+07	1.34	5227.24
$N_2O + O \rightarrow N_2 + O_2$	1.0e+14	0	14192.25
$N_2 + O_2 \rightarrow N_2 O + O$	2.91e+10	0.91	53722.71
$N_2O + O \rightarrow 2NO$	1.0e+14	0	14192.25
$2NO \rightarrow N_2O + O$	1.26e+09	0.92	31941.4
$N_2O + OH \rightarrow N_2 + HO_2$	2.0e+12	0	5032.71
$N_2 + HO_2 \rightarrow N_2O + OH$	1.39e+10	0.48	18367.62

Table 28. Reactions and kinetics constants of NO_X mechanism (Weisser 2001).

5.11 Soot model

Soot emissions are of utmost importance in Diesel engines, depending on local conditions of pressure, temperature and stoichiometry. Soot formation includes the progressive stages of particle inception, surface growth and coagulation, while a substantial portion of the soot formed is oxidized (Haynes and Wagner 1981). In the present work, a phenomenological model of Hiroyasu et al. (1983) is applied for soot modeling, in which the rate of change in soot mass results from the rates of soot formation and oxidation, as follows:

$$\frac{dm_s}{dt} = \frac{dm_{s,f}}{dt} - \frac{dm_{s,ox}}{dt}$$
(81)

$$\frac{dm_{s,f}}{dt} = A_f \cdot m_{f,\nu} \cdot p^{0.5} \cdot \exp(-\frac{E_{s,f}}{R \cdot T}) \qquad (82)$$

$$\frac{dm_{s,ox}}{dt} = A_{ox} \cdot m_s \cdot \frac{p_{O_2}}{p} \cdot p^{1.8} \cdot \exp(-\frac{E_{s,ox}}{R \cdot T})$$
(83)

where,

 m_s is the soot mass in kg

 $m_{s,f}$ is the mass corresponding to soot formation in kg

 $m_{s,ox}$ is the mass corresponding to soot oxidation in kg

 A_f is the constant in soot formation correlation

 $m_{f,v}$ is the mass of fuel vapour in kg

 $E_{s,f}$ is the activation energy in soot formation correlation in J/mole

 A_{ox} is the constant in soot oxidation correlation

 $E_{s,ox}$ is the activation energy in soot oxidation correlation in J/mole

The soot model is applied to each computational cell, in a post processing stage, using the computed values of local quantities. The values of soot model constants (for pressures in MPa) are listed in Table 29 (Douladiris 2010).

A_f	$E_{s,f}$ [J/mole]	A _{ox}	$E_{s,ox}$ [J/mole]		
3162	52335	2.79e+06	58615		

Table 29. Values of soot model constants (Douladiris 2010).

This page is intentionally left blank.

6. CFD studies of HFO sprays in SCC

6.1 Resolution tests

Both spatial and temporal resolution tests were performed using the CAB model to check the dependence of computational results on discretization parameters (Kontoulis et al. 2019). First, spatial resolution tests were performed, utilizing the three grids presented in Table 20, for Case 1 (non-reactive evaporating spray of HFO #1a). The maximum computational time step was in all cases $\Delta t=10^{-5}$ s. Fig. 58 shows the calculated time history of the spray penetration length for all three grids, which is compared with the corresponding experimental data of von Rotz et al. (2011). In general, there is very good agreement between the present CFD results and the experiment. For all grids, the results coincide in the initial stage of injection, and are very close to the experimental curve. Subsequently, there are small differences in the computed values of penetration length; these differences are minimal for the two fine grids. The results suggest that the resolution of the two fine grids is sufficient for the present geometry and the conditions of Case 1.

Fig. 59 presents instantaneous snapshots of gas velocity and fuel vapor mass fraction at a time of 3 ms after SOI, at the horizontal plane including the injector. An increase of gas velocities in the fuel jet region is observed for increased resolution; this justifies the penetration length trends of Fig. 58. The increase in penetration length tends to increase the spray area, and thus enhances the total evaporation rate; a corresponding trend is justified in the fuel vapor mass fraction iso-contours of Fig. 59.

As the very fine mesh (720,000 cells) is characterized by quite high computational cost, while giving results only slightly deviating from the fine mesh (260,000 cells), the latter is selected for the subsequent computational studies of HFO sprays.

Finally, Case 1 was computed for different maximum time step values using the fine mesh. These temporal time resolution tests involved maximum time step values ranging from 10^{-6} s to 10^{-4} s. Minimal variations in spray penetration length were observed for time steps lower than 10^{-5} s. Thus, a maximum numerical time step of $\Delta t=10^{-5}$ s was selected for the subsequent computations.



Fig. 58. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1a: calculated fuel penetration length versus time for three different computational grids, using the adapted CAB model. The time step value is 10^{-5} s. The corresponding experimental curve of von Rotz et al. (2011) is also included.

	Case 1 (33.7 kg/m ³) - Different grid resolutions						
Time: 3 ms after SOI	Coarse mesh (115,000 cells)	Fine mesh (260,000 cells)	Very fine mesh (720,000 cells)				
Gas flow velocity	Gas velocity [m/s] 100 75 50 25 0	Gas velocity (m/s) 100 75 50 25 0	Gas velocity [m/s] 100 75 50 25 0				
HFO vapor mass fraction	HFO vapor 4.0e-002 3.0e-002 2.0e-002 1.0e-002 0.0e+000	HFO vapor 4.0e-002 3.0e-002 2.0e-002 1.0e-002 0.0e+000	HFO vapor 4.0e-002 3.0e-002 2.0e-002 1.0e-002 0.0e+000				

Fig. 59. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1a: color-coded contours of gas velocity and fuel vapor mass fraction at the horizontal plane including the injector, 3 ms after SOI, for three computational grids.

6.2 Non-reactive HFO spray studies in SCC

The computed HFO penetration length versus time, for Case 1, Case 2 and Case 3 (see Table 21), using HFO #1a, is presented in Fig. 60; the experimental curves of von Rotz et al. (2011) are also included. An overall very good agreement is observed (Kontoulis et al. 2019). The penetration tip increases linearly at the early stage of injection until break-up length/time is reached, and subsequently a deceleration is observed; this trend is in accordance with observation in smaller scale experiments (see, for example, Hiroyasu and Arai 1990). Fig. 61 and Fig. 62 present snapshots of gas velocity and HFO vapor mass fraction, respectively, at representative times (up to 5 ms after SOI), for Cases 1 and 3; here, the horizontal plane including the injector is considered. Further, a representative parameter of spray structure is the Sauter Mean Diameter (SMD), defined as the diameter of a parcel, whose volume to surface area ratio is equal to the ratio of the sum of all droplet volumes in the spray to the sum of all droplet surface areas, as follows:

$$\text{SMD} = \frac{\sum_{i=1}^{n} d_i^3}{\sum_{i=1}^{n} d_i^2} \qquad (84)$$

where, d is the fuel droplet diameter

Fig. 63 and Fig. 64 show corresponding snapshots of spray structure, including indications of droplet velocity and SMD, respectively. It is noted that SMD calculations are considered to qualitatively characterize HFO sprays, due to the lack of corresponding experimental data. The present results demonstrate a substantially slower propagation of the spray at high gas density (Case 1), due to the fact that the fuel spray experiences higher aerodynamic forces, resulting in higher values of Weber number for the spray droplets. Also, no evaporation of HFO is observed in the initial stage of injection, while lower evaporation rates are subsequently observed for the high pressure case. The stronger break-up at high pressure has been also demonstrated by the computed distributions of gas flow velocity, as well as by the computed droplet velocities and SMD values. In all cases, a continuous decrease of drop velocity from the nozzle exit to the spray tip is verified, while an effect of the swirling gas motion on spray structure and fuel vapor distribution is also evident.



Fig. 60. Computed time history of penetration length using HFO #1, for Case 1, Case 2 and Case 3, corresponding to gas density of 33.7 kg/m3, 22.5 kg/m3 and 11.2 kg/m3, respectively (non-reactive evaporating conditions). All Cases are characterized by swirling gas flow. The corresponding experimental curves of von Rotz et al. (2011) are also included.



Fig. 61. Cases 1 and 3 (evaporating sprays) using the CAB model and HFO #1a: color-coded contours of gas velocity at the horizontal plane including the injector, at representative time instants after SOI.



Fig. 62. Cases 1 and 3 (evaporating sprays) using the CAB model and HFO #1a: color-coded contours of HFO vapor mass fraction at the horizontal plane including the injector, at representative time instants after SOI.



Fig. 63. Cases 1 and 3 (evaporating sprays) using the CAB model and HFO #1a: top view of spray structure and color-coded indications of HFO droplet velocity, at representative time instants after SOI.

	HFO #1a droplet SMD						
Time after SOI	Case 1 (33.7 kg/m ³)	Case 3 (11.2 kg/m ³)					
1 ms	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0					
2 ms	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0					
3 ms	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0					
4 ms	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0	HFO droplet SMD [mic] 800 600 200 0					
5 ms	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0	HFO droplet SMD [mic] 800 600 400 200 0					

Fig. 64. Cases 1 and 3 (evaporating sprays) using the CAB model and HFO #1a: top view of spray structure and color-coded indications of HFO droplet SMD, at representative time instants after SOI.

6.2.1 Effect of ambient temperature in SCC non-reactive flow

To further justify the low evaporation tendency of HFO, simulations are performed for relatively low ambient gas temperature, in particular 400 K, for the conditions corresponding to Case 4 (see Table 21). Fig. 65 shows snapshots of HFO #1a vapor mass at 5.0 ms after SOI for Case 4, while corresponding results for Case 1 (900 K, same gas density as Case 4) are also included; a plane including the injector is considered. A zero value of evaporated HFO #1a mass is verified for Case 4, even though the two spray jets are characterized by the same Weber number, and thus are expected to exhibit the same dynamics of spray break-up.



Fig. 65. Color-coded contours of HFO #1a vapor mass fraction at a plane including the injector, at 5.0 ms after SOI, for the non-evaporating Case 4 (left) and the evaporating Case 1 (right).

6.2.2 Effect of HFO preheating in SCC non-reactive flow

To investigate the impact of HFO preheating on spray propagation, the effect of injected fuel temperature under the conditions of Case 1 is investigated, using HFO #1. In particular, three values of fuel preheating temperature at SOI are considered, namely, 80 °C, 120 °C and 157 °C; the high end temperature range corresponds to representative values of kinematic viscosity of fuels used in large marine engines, i.e. 13 cSt. The computational results for penetration length versus time are presented in Fig. 66; the experimental results of von Rotz et al. (2011), obtained for a fuel temperature of 120 °C, are also included. The computational results illustrate a considerable difference between the spray development of "cold" (T=80 °C) and sufficiently heated fuel, with the "cold" spray characterized by substantially higher penetration, due to its minimal break-up. The corresponding high value of viscosity acting on the droplet oscillation frequency, ω , increases the break-up timescales (see eq. (49)) (Hsiang and Faeth 1992). It is worth noting that, in all cases, the initial stage of linear development is similar for all temperatures. In the subsequent stage, spray development is found to be independent of preheating, for fuel temperatures higher than 120 °C. Fig. 67 shows snapshots of the HFO vapor mass fraction distribution, at representative times up to 3 ms after SOI, for Case 1, for different preheating temperatures, for the plane including the injector. An increase in evaporation rate with fuel preheating is observed, while minimal break-up is achieved for "cold" fuel. The conclusion for minimal cascade break-up of "cold" fuel is also confirmed in Fig. 68, in which the spray structure is illustrated, including indications of SMD, at representative times up to 3 ms after SOI. The results presented in this subsection demonstrate that the present modeling can properly account for the effects of HFO preheating on spray dynamics.



Fig. 66. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1a: Computed fuel spray penetration length versus time, for different values of preheating temperature. The experimental results of von Rotz et al. (2011), corresponding to an initial fuel temperature of 120 $^{\circ}$ C, are also included.



Fig. 67. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1: color-coded contours of fuel vapor mass fraction for initial fuel temperatures of 80 °C, 120 °C and 157 °C, at 3 ms after SOI, in a plane located at the height of the injector.

	Case 1 (33.7 kg/m ³) - Different HFO #1a preheating temperature						
Time after SOI	80 °C	120 °C	157 °C				
1 ms	HFO droplet SMD [mic]	HFO droplet SMD [mic]	HFO droplet SMD [mic]				
	800	800	800				
	600	600	600				
	400	400	400				
	200	200	200				
	0	0	0				
2 ms	HFO droplet SMD [mic]	HFO droplet SMD [mic]	HFO droplet SMD [mic]				
	800	800	800				
	600	600	600				
	400	400	400				
	200	200	200				
	0	0	0				
3 ms	HFO droplet SMD [mic]	HFO droplet SMD [mic]	HFO droplet SMD [mic]				
	800	800	800				
	600	600	600				
	400	400	400				
	200	200	200				
	0	0	0				

Fig. 68. Case 1 (gas density of 33.7 kg/m³) using HFO #1: bottom view of spray structure and color-coded indications of SMD, for initial fuel temperatures of 80 °C, 120 °C and 157 °C, at 3 ms after SOI.

6.2.3 Effect of swirl in SCC non-reactive flow

Fig. 69 illustrates the impact of gas swirling flow on HFO #1a penetration length of Case 1, which is characterized by surrounding gas density value of 33.7 kg/m³ and co-swirl HFO injection. The effect of swirl evidently increases the penetration length, in agreement with experimental observations (e.g. see von Rotz et al. (2011) for MDO data). Fig. 70 and Fig. 71 present snapshots of gas velocity and HFO vapor mass fraction, respectively, at representative times (up to 5 ms after SOI); a plane including the injector is considered. During the injection event, the velocity flow field in front of the injector nozzle exit does not differ subsequently between the two cases, since the same mass injection profile is used and the resulting spray jet constitutes the prevailing factor for generating high velocity levels in the gas flow. In addition, the strong gas swirl motion induces a motion of the liquid and evaporated HFO towards the periphery of SCC, thus deviating for the nozzle axis. On the other hand, a symmetric distribution of HFO mass around the nozzle axis is observed in the case of no swirl. Thus, the presence of gas swirl motion has a serious impact on the spray morphology.



Fig. 69. Computed time history of HFO #1a penetration length, for Case 1 (evaporating spray, swirling gas flow), corresponding to a gas density of 33.7 kg/m3, using the CAB model. The corresponding experimental curve of von Rotz et al. (2011), as well as the computed curve for the same conditions and no swirl, are also included.



Fig. 70. Color-coded contours of gas velocity at a plane including the injector, for HFO #1a, Case 1 (swirling gas flow) and a corresponding case with no swirl, at representative time instants after SOI.





6.3 Reactive HFO spray studies in SCC

In the present work, detailed reactive spray CFD simulations are performed using the present HFO modeling approach for the first time, and results are compared to corresponding experimental data (von Rotz, 2015), aiming at a characterization of reactive flow for different HFO qualities (Kontoulis et al. 2019). The experiments have been conducted with HFO #1a and HFO #3, both preheated to a temperature of about 120 °C, for a surrounding air density of 34.7 kg/m³ and temperatures of 915, 800 and 780 K (on average). A sophisticated setup based on OH radical chemiluminescence appearance is utilized to determine the ignition characteristics experimentally. The measured data have been processed to obtain average results for ignition delay and location. In the present simulations, the conditions of Case 5, Case 6 and Case 7 are utilized (see Table 22). The computational results for ignition delay and location have been determined by averaging over all cells in which the non-dimensional ignition progress variable is greater than unity and the instantaneous burning rate higher than zero.

Fig. 72 and Fig. 73 present the computed ignition delay and location, respectively, the latter in terms of the distance from the nozzle tip, for the reactive Cases 5, 6 and 7, utilizing HFO #1a and HFO #3. The experimental results (mean values and corresponding error bars indicating standard deviation) are also included. A very good agreement between experiment and simulation is demonstrated. Further, the expected increase of ignition delay and distance between nozzle tip and ignition spot at decreasing values of chamber temperature, for a constant gas density, is verified in the present computations, for both HFOs. This trend is justified by the fact that evaporation rate decreases at decreasing ambient air temperature, whereas the ambient air density and swirl levels remain unchanged, leading to a similar spray break-up dynamics in all cases. As a result, lower local values of equivalence ratio, at lower temperatures, are attained, resulting in increased ignition times. Similar conclusions are also reported in the literature for diesel fuel (Baert 1989; Taşkiran and Ergeneman 2011) and MDO (Schmid et al. 2012). It is noted that the results of the present modeling indicate that HFO #1a is a fuel of moderate ignition quality (CCAI value of 851), while HFO #3 is characterized by good ignition quality (CCAI = 837) (see Table 24). The present extended ignition kinetic model, which takes into account fuel aromaticity, reproduces very well the experimental observations, predicting shorter ignition delay times for HFO #3, in comparison to HFO # 1a, for all cases computed. Nonetheless, the difference is minimized at increasing chamber air temperature (see Fig. 72).

For both HFOs considered here, the spray structure, along with the averaged ignition location for Case 5 and Case 7, are illustrated in Fig. 74, for experiment (shadow images) and CFD simulation. In Fig. 74, computational results are visualized in terms of the iso-surface of $C_{ig} = 1.0$ (ignition location). In agreement with the experiment, the ignition location is, in both cases, computed in the lee side with respect to the spray axis; this should be associated with the convection of fuel vapor toward the SCC periphery induced by the swirling air flow. Further, the distance of ignition location from nozzle tip increases at decreasing ambient air temperature (see Fig. 73), since multiple ignition spots are identified, shifted farther away from the nozzle tip. The exact location of ignition spot is evidently affected by the fuel quality, in particular evaporation tendency and aromaticity. This justifies the earlier (closer to the nozzle tip) ignition of HFO #3, characterized by a higher vapor pressure and lower CCAI, in comparison to HFO #1a.



Fig. 72. Computed and measured ignition delay times versus chamber air temperature for Case 5 (915 K, 91.5 bar), Case 6 (800 K, 80 bar) and Case 7 (780 K, 78 bar), all corresponding to gas density of 34.7 kg/m³, for HFO #1a and HFO #3.



Fig. 73. Computed and measured ignition location (distance from nozzle tip) versus chamber air temperature for Case 5 (915 K, 91.5 bar), Case 6 (800 K, 80 bar) and Case 7 (780 K, 78 bar), all corresponding to gas density of 34.7 kg/m³, for HFO #1a and HFO #3.



Fig. 74. Shadow images taken at the ignition initiation for Case 5 (915 K, 91.5 bar), Case 6 (800 K, 80 bar) and Case 7 (780 K, 78 bar), for HFO #1a and HFO #3. Corresponding visualizations of CFD results are also presented, including the iso-surface of $C_{ig} = 1.0$.

6.3.1 Effect of HFO preheating in SCC reactive flow

In the present study, the impact of HFO preheating on ignition delay and location is investigated, using the representative Case 5, for HFO #1a. Here, three values of initial HFO temperature, namely, 80 °C, 120 °C and 157 °C, are considered. A very good agreement between experiment and simulation for different Cases and a preheating temperature of 120 °C has already been demonstrated in Fig. 72. Fig. 75 and Fig. 76 present the computed ignition delay and location. The present results verify that decreasing preheating temperature increases ignition delay time (Fig. 75) and the displacement of ignition spot with respect to nozzle tip (Fig. 76); the differences are minimized at high values of preheating temperature (compare data points for 120 °C and 157 °C). In more detail, Fig. 77 presents visualizations of the spray at ignition, for the three preheating temperatures, including the iso-surface of $C_{ig} = 1.0$ (ignition location). The effect of swirl on ignition location, already identified in the spray visualizations of Fig. 74, is verified for all cases of HFO preheating investigated.

Fig. 78 presents computational results in terms of temperature iso-contours at the chamber mid-plane, using HFO #1a, at a time instant of 20 ms after SOI, at which the flame has developed, for the three values of fuel preheating temperature considered (reactive Case 5). The temperature distributions demonstrate the flame lift-off, and illustrate an increase of lift-off at decreasing initial HFO temperature (Goldsworthy 2006). It is noted that a similar evolution of reactive flow for HFO #3 is attained for the same value of fuel viscosity due to preheating; for instance, preheating HFO #1a and HFO #3 to 157 °C and 120 °C, respectively, gives a kinematic viscosity of 13 cSt in both cases, and results in a similar flow development.



Fig. 75. Case 5 (915 K, 91.5 bar): Computed and measured ignition delay times versus chamber air temperature for HFO #1a. Three values of fuel preheating temperature are considered.



Fig. 76. Case 5 (915 K, 91.5 bar): Computed and measured ignition location (distance from nozzle tip) versus chamber air temperature for HFO #1a. Three values of fuel preheating temperature are considered.

	Case 5 (reactive case) - Different HFO preheating temperature for HFO #1a						
	80 °C	120 °C	157 °C				
Time after SOI	1.27 ms	0.8 ms	0.78 ms				
Ignition event			*				

Fig. 77. Case 5 (915 K, 91.5 bar): Bottom view of computed HFO #1a spray structure at ignition, including the iso-surface of C_{ig} = 1.0. Three values of fuel preheating temperature are considered.

	Case 5 (34.5 kg/m ³) - Different HFO preheating temperature for HFO #1						
Time: 20 ms after SOI	80 °C	120 °C	157 °C				
Temperature	Temperature [K] 2000 1500 1000 500	Temperature [K] 2000 1500 1000 500	Temperature [K] 2000 1500 1000 500				

Fig. 78. Case 5 (915 K, 91.5 bar): color-coded contours of temperature for preheating temperatures of HFO #1a at 20 ms after SOI, in a plane located at the height of the injector. Three values of fuel preheating temperature are considered.

This page is intentionally left blank.

7. CFD studies of HFO combustion in a two-stroke marine engine

The HFO modeling developed in the present study is utilized in detailed CFD studies in a large two-stroke marine engine, in particular the RT-flex58T-B engine of Winterthur Gas & Diesel Ltd (Kontoulis et al. 2019). Here, a computational mesh of 85000 cells is implemented, for one cylinder; its adequacy has been confirmed in previous studies (Stratsianis et al. 2016). Each cylinder has three identical injectors, installed symmetrically on the periphery of the engine cylinder head; each injector has five orifices, of different diameter and orientation. The engine is characterized by uniflow scavenging, i.e., it is equipped with a central exhaust valve, while a strong air swirl motion is achieved by means of liner port geometry. Here, the closed part of the engine cycle is calculated, at full load. The main engine characteristics are given in Table 30.

Engine characteristic	Value
Bore [m]	0.58
Stroke [m]	2.416
Speed [rpm]	105
Exhaust valve closing [°CA ATDC]	-96
Exhaust valve opening [°CA ATDC]	120

T	able	30.	Engine	characteristics.

In the present study, engine CFD calculations are performed using HFO #1 a and HFO #3, and results are referred to those using MDO (Kontoulis et al. 2019). Table 31 presents important operational parameters and injection characteristics for the different fuels considered, including fuel preheating temperatures. For both HFO #1a and HFO #3, the kinematic viscosity of injected fuel is 13 cSt.

Table 31.	Engine	operational	parameters	and injection	characteristics	for	HFO	#1a,	HFO	#3
and MDO.	,									

Engine parameters	HFO #1a	HFO #3	MDO
Intake pressure [MPa]	0.352	0.352	0.352
Intake temperature [K]	330	330	330
Start of injection [°CA ATDC]	1.0	1.2	2.0
Injection duration [°CA]	15.32	15.31	15.2
Total injected mass [% of MDO case]	105.2	104.67	100
Fuel preheating temperature [°C]	157	120	50

Injection profiles have been determined for a rail pressure close to 1100 bar, utilizing the shape of a reference MDO experimental profile. For consistency, all simulations performed are characterized by the same total fuel energy input, i.e., the same product of LHV and fuel mass (resulting in different values of injected fuel mass). Hence, the injection duration of HFOs is greater than that of MDO. To attain the same peak in combustion pressure at full load (15 MPa), an earlier SOI is necessary for HFO; this is associated with the reduced evaporation rates and longer chemical ignition times of HFO (Kontoulis et al. 2019). Fig. 79 presents the corresponding values of SOI and injected fuel mass, for the three fuels considered. The corresponding injection profiles are presented in Fig. 80.



Fig. 79. Total injected mass (left y-axis) and SOI (right y-axis) versus LHV (HFO #1a, HFO #3 and MDO), for two-stroke marine engine simulations at full load.



Fig. 80. Computed injection profiles for HFO #1a, HFO #3. The experimental injection profile for the case of MDO is also included.
In the present study, the thermophysical properties of n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) are utilized for the simulation of MDO (Stratsianis et al. 2016). The computational results of cylinder pressure history for HFO #1a, HFO #3 and $C_{14}H_{30}$ are compared with the measured pressure trace for MDO in Fig. 81. All computed pressure traces are close to each other, as well as to the experimental trace. The corresponding normalized rate of heat release traces are presented in Fig. 82, including an experimental curve for HFO (de Hoog et al. 2010). It is noted that experimental rate of heat release traces are based on measured signals, processed via a thermodynamic model. All curves presented in Fig. 82 exhibit two local maxima, associated with the interaction of spray jets with the swirling motion of combustion products. The two experimental curves are characterized by close values for the first local maximum, while the value of the second maximum is higher for MDO combustion. Overall, the present modeling results in a good agreement of combustion development in comparison to experiment, including ignition delay.



Fig. 81. Computed cylinder pressure traces for HFO #1a, HFO #3 and $C_{14}H_{30}$. The pressure history for experiment with MDO is also included (Stratsianis et al. 2016).



Fig. 82. Computed rate of heat release traces for HFO #1a, HFO #3 and $C_{14}H_{30}$. The corresponding histories for MDO and HFO experiments are also included (Stratsianis et al. 2016, de Hoog et al. 2010).

Next, the effect of HFO preheating on engine performance is evaluated (Kontoulis et al. 2019). Fuel preheating temperature directly affects the values of kinematic viscosity and surface tension, and thus spray atomization and combustion. Fig. 83 presents the computed pressure histories for HFO #1a, for the three values of preheating temperature used, namely, 80 °C, 120 °C and 157 °C. Fig. 83 verifies that the combustion pressure decreases at increasing initial fuel kinematic viscosity. Accordingly, the same holds for the normalized heat release rate curves, with the second local maximum practically disappearing for the highest fuel viscosity value (see Fig. 84). In the case of high fuel viscosity, reduced intensity of spray break-up, evaporation rate and dispersion is attained. This results in reduced rate of heat release and pressure levels, and a noted loss of useful work of 10%. It is noted that similar behavior has been obtained for HFO #3.



Fig. 83. Computed pressure history for HFO #1a, for three values of fuel preheating temperature.



Fig. 84. Computed rate of heat release traces for HFO #1a, for three values of fuel preheating temperature.

The effect of HFO preheating on emission formation is also evaluated (Kontoulis et al. 2019). With reference to sections 5.10 and 5.11, modeling of NO_x formation is based on a modified version of the extended Zeldovich model (Weisser 2001), while a modified version of the phenomenological model of Hiroyasu et al. (1983) is implemented for predicting soot formation and oxidation (Kontoulis et al. 2019, Stratsianis et al. 2016, and references therein). The computed histories of space-averaged NO_x concentrations for HFO #1a and C₁₄H₃₀, as well as a measured value of final NO_x concentration with MDO, are presented in Fig. 85. Burning of HFO #1a is characterized by higher concentration than MDO, for a sufficiently high preheating temperature (corresponding to a kinematic viscosity of 13 cSt). For MDO, the

computed final NO_x concentration is in good agreement with the experimental value (Fig. 85). Fig. 86 presents the calculated histories of total soot mass, for HFO #1a and $C_{14}H_{30}$; two values of HFO preheating temperature are also considered. HFO #1a combustion favors a higher soot formation rate in comparison to $C_{14}H_{30}$, however, the final exhaust soot values are similar, due to soot oxidation (Fig. 86). The total soot mass remains higher in the case of low HFO preheating temperature, throughout the process.



Fig. 85. Computed histories of space-averaged NO_x concentrations for HFO #1a, for two values of fuel preheating temperature. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included, as well as a measured value of final NO_x concentration with MDO.



Fig. 86. Computed histories of total soot mass for HFO #1a, for two values of fuel preheating temperature. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included.

Fig. 87 shows color-coded contours of temperature and equivalence ratio for HFO #1a and $C_{14}H_{30}$ combustion. A horizontal plane very close to the injectors is considered, at selected time instants, in particular, 8°, 10° and 20° of engine rank angle (CA). Taking into account that HFO #1a preheated at 157 °C is injected 1° CA earlier than C₁₄H₃₀, the local temperature values are similar (slightly elevated for HFO #1a), justifying the similarity in resulting cylinder pressure (Fig. 81). In the context of the interaction between the spray jets of each injector and the swirling combustion products, initiated shortly before a crank angle of 10° CA, the local values of equivalence ratio are greater in case of HFO #1a, compared to $C_{14}H_{30}$; thus, oxygen availability in front of the three injectors is poor for HFO #1a. This contributes to a reduced level of the second local maximum in the rate of heat release curve (see Fig. 82). Results for HFO #1a preheated at 80 °C are also included in Fig. 87; the presented snapshots demonstrate longer penetration lengths of the liquid fuel, and suggest low evaporation rates, resulting in the higher local values of equivalence ratio, compared to those of the sufficiently preheated HFO (and C14H30. This poor HFO evaporation tendency contributes to delayed mixing and combustion, which thus becomes more intense at late crank angles, associated with lower temperature levels, due to expansion. Correspondingly, in the earlier stages of combustion, reduced peak levels of heat release rate and pressure are attained (Fig. 84 and Fig. 83). As indicated in Fig. 87, combustion of HFO #1a preheated at 80 °C is characterized by low local temperature values, accompanied by high local values of equivalence ratio; this justifies the low emission formation of NO_x , as well as the low soot oxidation rates (Fig. 85, Fig. 86).

Fig. 88 presents corresponding color-coded contours of NOx mole fraction and soot density for $C_{14}H_{30}$ and HFO #1a, while Fig. 89 presents the static temperature - equivalence ratio (T- ϕ) maps for the selected time instants of 10°, 20° and 30° CA. Static T- ϕ maps constitute a useful post-processing tool for the characterization of combustion in the frame of NO_x and soot formation (without accounting for soot oxidation) (Stratsianis et al. 2016; Kontoulis et al. 2008, and references therein). Here, the computed values of T and φ are presented for all computational cells, in a proper static chart illustrating iso-contours of NO. and soot concentration. The present static map has been obtained for a pressure of 6.0 MPa and a residence time of 2 ms (Kitamura et al. 2002); the time of 2 ms corresponds to 1.3° CA for the engine speed of 105 rpm considered in the present study (see Table 30). As indicated in Fig. 87, higher temperatures, in a larger spatial extent, are present in the case of sufficiently preheated HFO #1a combustion, in comparison to those for C₁₄H₃₀ combustion, an outcome of the difference in thermophysical properties and the resulting engine aerothermochemistry. Due to the higher temperature levels, oxidation rates are higher for sufficiently preheated HFO #1a combustion (Fig. 86); therefore, the differences in soot concentration at 15° CA diminish at 20° CA (Fig. 88). Further, combustion of sufficiently preheated HFO #1a is characterized by higher concentration of NO_x in comparison to $C_{14}H_{30}$ (see Fig. 85), as justified by the higher number of computational cells present in the NO_x producing regime (Fig. 89). Further, Fig. 88 and Fig. 89 illustrate the enhanced soot formation accompanied by a milder NOx formation, for the case of HFO #1a preheated at 80 °C, in comparison to the cases of sufficiently preheated HFO #1 and C₁₄H₃₀ (see also Fig. 85, Fig. 86).



Fig. 87. Color-coded contours of temperature and equivalence ratio for C₁₄H₃₀, and HFO #1a at two values of fuel preheating temperature. A horizontal plane very close to the injectors is considered, at selected time instants.



Fig. 88. Color-coded contours of NO_x mole fraction and soot density for $C_{14}H_{30}$, and HFO #1a at two values of fuel preheating temperature. A horizontal plane very close to the injectors is considered, at selected time instants.



Fig. 89. HFO #1a at two values of fuel preheating temperature and $C_{14}H_{30}$: T- ϕ maps, including T, ϕ values of all computational cells, at selected time instants.

8. Advanced HFO injection strategies in a two-stroke marine engine

The reduction of pollutant emissions from the marine industry, as well as the improvement of vessel performance, are of utmost importance for the protection of the environment and human health. Thus, Annex VI of the MARPOL convention has provided specific regulations and guidelines that motivate engine manufacturers and the research community to improve the design and operation of marine engines. In the present work, the simultaneous reduction of Specific Fuel Oil Consumption (SFOC) and the exhaust concentrations of NO_X and soot of the large-bore two-stroke marine engine RT-flex58T-B operating with HFO is investigated at conditions of full load, by implementing a three-pulse fuel injection strategy (pilot-, main- and post-injection). The present study consists the first CFD-based optimization of a large two-stroke marine engine with HFO.

The implementation of pilot-injection contributes to combustion with minimal NO_x formation close to TDC and potential mixture dilution, with lower local combustion temperature values in the expansion stroke. For engine operation with MDO, recent CFD studies of the effect of pilot-injection on the performance of the RT-flex58T-B engine revealed significant reduction in SFOC with the same NO_x emission levels and a reducing trend in soot concentration (Kontoulis et al. 2008). Further, Andreadis et al. (2011) concluded that, in optimizing the engine operation with split injection in terms of pilot- and main-injection, while also imposing constraints in terms of both maximum pressure and minimum work output, small reductions in NO_x emissions, of up to 15%, can be attained, for the same SFOC levels as those of continuous injection (soot emissions were not considered). Recent constrained optimization studies in the frame of implementing Partially Premixed Compression Ignition (PPCI) combustion in the RT-flex58T-B engine have demonstrated a reduction in the final NO_x concentration of about 15%, without a penalty in SFOC (Pananakis et al. 2013).

As far as post-injection is concerned, it is expected to reduce both the NO_x and soot final concentrations, at a reduced useful work, due to the retarded injection and combustion in the expansion stroke; the work reduction could be diminished by a suitable adjustment of the start of the previous injection pulses. Stratsianis et al. (2016) performed CFD optimization studies for the RT-flex58T-B engine operating with MDO, and investigated the effect of post-injection on the production of NO_x and soot, as well as on SFOC. For the case of constrained optimization, in terms of maximum pressure and useful work, the conclusions revealed that NO_x and soot can be reduced by more than 20% and 30%, respectively, without a penalty in SFOC. Particularly, a long dwell between the end of main-injection and start of post-injection lowers the in-cylinder temperature values, and thus NO_x formation, as the reduction in ROHR is considerable. Further, soot production is reduced, as new liquid fuel does not enter the combustion chamber (since the main injection event is shorter), while the strong swirling motion of gas convects a mixture which is rich in oxygen in front of the injectors. Thus, the subsequently injected fuel (post injection) experiences enhanced mixing with air, and it is burned under conditions of local stoichiometry that result in increased soot oxidation rates, at minimal further production of NO_x.

Building on the work of Kontoulis et al. (2008), Andreadis et al. (2011), Pananakis et al. (2013) and Stratsianis et al. (2016), the present work investigates the potential of a threepulse HFO injection strategy (pilot-, main- and post-injection) on reducing SFOC and the exhaust concentrations of NO_X and soot in the RT-flex58T-B engine; both an unconstrained and a constrained multi-objective optimization problem are considered. The present modified version of the KIVA-3 CFD code is utilized, in conjunction with the HFO model developed, and is coupled with an optimization tool based on Evolutionary Algorithms (EAs). A representative HFO grade is utilized, and its thermophysical properties calculated by using the present model. The fuel injection profile, consisting of pilot-, main- and post-injection pulse, is properly parameterized by means of five design variables, while three objective functions, accounting for SFOC and the final concentrations of NO_X and soot, are introduced. Results are referred to a nominal design of HFO continuous injection, and indicate that significant reductions in both NO_X and soot are feasible.

8.1 HFO thermophysical properties

In the present optimization study, the new thermophysical properties model of Kontoulis et al. (2018) is used, in terms of a Graphics User Interface (GUI) developed in the course of the present work (see Fig. 90). The model is applied to a HFO grade utilized in the sea trials of the RT-58T-B marine engine, referred to here as HFO #4. The measured properties consisting the input values to the model have been obtained from a record of the author of the present thesis. The input data and the resulting values of main properties are shown in Fig.90, while they are also listed in Table 32. The computed temperature dependence of density and kinematic viscosity is presented in Fig. 91 and Fig. 92, respectively, while the corresponding dependence of dynamic viscosity and vapor pressure, including the pseudocritical point, is shown in Fig. 93 and Fig. 94, respectively. Fig. 95 and Fig. 96 show the temperature dependence of heat of evaporation and sensible enthalpy, respectively, while the corresponding curves of surface tension and mass diffusivity (fuel vapor to air) are presented in Fig. 97 and Fig. 98, respectively. In all cases, data regarding the thermophysical properties of n-tetradecane ($C_{14}H_{30}$) are also included (API 1997), with the comparison indicating the substantial difference between the values corresponding to light and heavy fuels. The fuel library of the KIVA-3 code has been extended with the properties of HFO #4.



Fig. 90. GUI format of the HFO thermophysical properties model reported in Kontoulis et al. (2018): Measured and computed values of thermophysical properties of HFO #4, used in the sea trials of the RT-58T-B marine engine. Corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are included for reference (API 1997).

Table 32. Measured and computed, utilizing the model reported in Kontoulis et al. (2018), values of thermophysical properties of HFO #4, used in sea trails. Corresponding values for $C_{14}H_{30}$ are included for reference (API 1997).

	Thermophysical property	HFO #4	$C_{14}H_{30}$	
Input data	Density at 288.15 K	982.7 kg/m ³	765.7 kg/m ³	
	Kinematic viscosity at 323.15 K	340 cSt	1.84 cSt	
	Kinematic viscosity at 373.15 K	35.4 cSt	1.01 cSt	
	Sulfur weight content	3.73%	-	
	Molecular weight	520.15 gr/mole	198.39 gr/mole	
	Carbon-to-hydrogen atomic ratio	0.91	0.467	
Dooulto	Specific heat capacity at 298.15 K	2.30 KJ/kgK	1.639 KJ/kgK	
Results	Enthalpy of formation at 298.15 K	597.2 KJ/kg	-1675.7 KJ/kg	
	LHV	40155.5 KJ/kg	44019.6 KJ/kg	
	CCAI	845	-	



Fig. 91. Computed temperature dependence of density of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 92. Computed temperature dependence of kinematic viscosity of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 93. Computed temperature dependence of dynamic viscosity of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 94. Computed temperature dependence of vapor pressure of HFO #4, including the pseudo-critical point. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 95. Computed temperature dependence of heat of evaporation of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 96. Computed temperature dependence of sensible enthalpy of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 97. Computed temperature dependence of surface tension of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).



Fig. 98. Computed temperature dependence of mass diffusivity (fuel to air) of HFO #4. The corresponding curve for $C_{14}H_{30}$ is also included (API 1997).

8.2 Injection profile parameterization

In the present optimization study, engine CFD calculations are performed using HFO #4; Table 33 presents the operational parameters and injection characteristics of a reference case characterized by continuous injection. Determination of this reference injection profile of HFO follows the same approach as described in Chapter 7 and presented in Fig. 79. Thus, the basic shape of a reference MDO experimental profile determined for a rail pressure close to 1100 bar is adopted, while the same total fuel energy input is maintained in the case of HFO. The continuous injection profiles of HFO #4 and MDO are presented in Fig. 99; the injection duration of HFO #4 is longer than that of MDO, with earlier SOI. The present optimization results for a three-pulse injection are evaluated against the reference case of continuous injection of HFO #4.

 Table 33. Engine operational parameters and injection characteristics for a reference case of continuous injection of HFO #4.

Engine parameters	Value
Intake pressure [MPa]	0.352
Intake temperature [K]	330
Start of injection [°CA ATDC]	1.0
Injection duration [°CA]	15.35
Total injected mass [% of MDO case]	106.84
Fuel preheating temperature [°C]	135
Kinematic viscosity of injected fuel [cSt]	13.4



Fig. 99. Computed reference injection profile of continuous injection of HFO #4. The experimental injection profile for the case of MDO is also included.

The entire three-pulse injection profile, which comprises the pilot-, main- and post-injection pulse, is calculated in terms of the injection rate shape and the total injected mass. The dynamics of the valve opening and closing is based on information from the injection profile of

the reference case. Further, the maximum of the injection rate of the reference case, directly affected by the rail pressure, is maintained. Thus, the three-pulse injection profile can be fully defined in terms of five design parameters:

(i) Start Of Pilot Injection (SOPil) in crank angle degrees [deg.]

(ii) Pilot Mass Fraction (PiMF) [%], accounting for the percentage of total fuel mass injected in pilot injection

(iii) Pilot Dwell (PiDwell) in crank angle degrees [deg.], corresponding to the delay between the end of the pilot injection and the start of main injection

(iv) Post Dwell (PoDwell) in crank angle degrees [deg.], corresponding to the delay between the end of the main injection and the start of post injection

(v) Post Mass Fraction (PoMF) [%], accounting for the percentage of total fuel mass injected in post injection.

It is noted that in the present study the injected total fuel mass is the same as that of the reference case of continuous HFO #4 injection. The above five design parameters of the injection profile are also used as the design parameters of the present optimization problem, and are illustrated in the injection profile sketch of Fig. 100.



Fig. 100. Sketch of a three-pulse injection profile with pilot, main and post injection; the five design variables (SOPil, PiMF, PiDwell, PoMF) are indicated with arrows.

8.3 Formulation of optimization problems

In the present work, unconstrained and constrained multi-objective optimization problems are formulated to maximize the positive effects of three-pulse injection (pilot-, main- and post-injection) on the performance and emissions of the large two-stroke marine engine RT-flex58T-B. The goal of optimization is to identify injection profiles that result in optimal reductions in SFOC, as well as in the final values of NO_X and soot concentration. To this end, the KIVA-3 code, as modified here for engine operation with HFO, has been coupled with the EASY optimization software (Karakasis and Giannakoglou 2006, Kampolis and Giannakoglou 2008), which is based on EAs.

EAs are semi-stochastic methods, based on an analogy with Darwin's laws of natural selection. In the frame of EAs, successive generations are created and evaluated. Each generation consists of candidate solutions called individuals (or chromosomes). Individuals are composed of genes, which are the problem design variables, binary encoded using a floating-point representation in the form of bit strings. In optimizing injection, the design variables fully define the injection profile (Andreadis et al. 2011, Pananakis et al. 2013, Stratsianis et al. 2016). In the present work, each of the five design variables defining the injection profile is encoded by a bit string of a length of 10 bits; thus, the total length of an individual is $5 \times 10 = 50$ bits.

The initial population consists of individuals created in a random way enabled by a Pseudo-Random-Number Generator (PRNG). For all generations, individuals are evaluated based on the corresponding values of objective functions resulting from KIVA-3 simulations. Based on these values, individuals are ranked, and those ranked highly are selected as parents, from which a new generation of individuals is created (offspring). In the present implementation, each generation consists of 120 individuals, 30 of which are selected as parents, creating offspring via the operations of uniform crossover and mutation. Here, solutions were evolved for a total of 15 generations for the unconstrained problem (15 \times 120 = 1800 individuals), and 14 generations for the constrained problem (14 x 120 = 1680) individuals). Both problems were run for three different initializations of the population, enabled by a proper initialization in the PRNG. In both cases, convergence to practically the same Pareto front was verified, for all three initializations. For engine applications, a multiobjective optimization approach has been also followed by Hiroyasu et al. (2002), and Shi and Reitz (2008). Each of the KIVA-3 simulations of the present study has required approximately 9.5 hours on a 1.8 GHz CPU core. Characteristics of the EA methodology implemented in the present work are presented in Table 34.

Method	Parent population size	Offspring population size	Parents of one offspring	Mutation probability	Crossover probability	Elite probability
EA	30	120	3	0.33	0.95	0.1

 Table 34. Basic characteristics of the EA methodology.

8.3.1 Design variables

The design variables of the present multi-objective optimization problems are the five parameters that fully determine the three-pulse injection rate shape. The choice of search space for each variable has considered the results of first studies for the RT-flex58T-B engine, for operation with MDO (Andreadis et al. 2011, Pananakis et al. 2013, Stratsianis et al. 2016); the following values have been chosen:

 $-5^{\circ} \leq SOPiI \leq 5^{\circ}$ $1\% \leq PiMF \leq 50\%$ $0.5^{\circ} \leq PiDwell \leq 20^{\circ}$ $0.5^{\circ} \leq PoDwell \leq 10^{\circ}$ $1\% \leq PoMF \leq 30\%$ (85)

The characteristics of binary coding, including accuracy, of the five design variables are presented in Table 35.

Binary	Design variables of injection profile								
coding	SOPil [deg.]	PiMF [%]	PiDwell [deg.]	PoDwell [deg.]	PoMF [%]				
bits	8	12	9	8	12				
Accuracy	0.04	0.012	0.04	0.04	0.007				

Table 35. Characteristics of binary coding of design variables, including accuracy.

8.3.2 Objective functions

In the present implementation, three objective functions are considered, namely an estimated value of SFOC, and the final space-averaged NO_x and soot concentrations. All values of objective functions are expressed in a non-dimensional form, in particular, they are normalized with respect to the corresponding value of the reference (continuous injection) case of HFO #4. The calculation of SFOC takes into account the computed work output corresponding to the closed part of the cycle. Thus, SFOC is estimated as the ratio of the total injected fuel mass to the work integral, and is normalized with the corresponding ratio of the reference case of HFO #4. It is noted that the open part of the cycle, not considered here, may affect intake conditions, as well as SFOC, through the interaction with the turbocharger. The present results are thus subject to this limitation.

8.3.3 Constraints

In the present work, two optimization problems are considered: (i) An unconstrained problem, aiming at identifying the potential for reducing SFOC and pollutant emissions. (ii) A problem constrained by the real requirements of imposing an upper limit in the maximum cylinder pressure (to avoid excessive mechanical strain on the engine components) and a minimum work output per engine cycle (to secure a minimum power output of the engine). Here, a limit of 15 MPa, suggested by the manufacturer, has been imposed for the pressure, while the work output of the reference case of HFO #4 has been chosen to account for the requirement in minimum work. To enable convergence to a good number of solutions, the constraint regarding the work output has been slightly relaxed (1%).

8.4 Optimization results

In the present study, the marine engine RT-flex58T-B is optimized for operation with HFO at full load, in terms of a proper identification of three-pulse injection profiles. The thermophysical properties of HFO #4 are considered, and are calculated using the model developed in the present work. Three objective functions are considered, namely an estimated value of SFOC, and the final space-averaged NO_X and soot concentrations, all normalized with the corresponding values of the reference case of HFO #4. The goal of multi-objective optimization is to identify the set of non-dominated solutions, which form the Pareto front. Both an unconstrained and a constrained optimization problem have been considered. Next, the optimization results are presented and discussed.

8.4.1 Unconstrained optimization problem

The unconstrained problem considered in the present work is formulated as follows:

$$\begin{cases} objective \ function: \min \vec{F}(\vec{x}) = \left(NO_{X}(\vec{x}), soot(\vec{x}), SFOC(\vec{x})\right)^{T} \\ \vec{x} = \left(SOPiI, \ PiMF, PiDwell, PoDwell, \ PoMF\right) \end{cases}$$
(86)

Fig. 101 presents the computed Pareto front in terms of the normalized values of NO_x concentration and SFOC for the unconstrained problem, while Fig. 102 shows the same Pareto front in terms of the normalized values of soot concentration and SFOC. In both presentations of the Pareto front, the extreme solutions, Case A and Case B, are marked. Case A is characterized by the maximum increase of 21% in NO_x emissions, with a gain of 1.7 % in SFOC and about 10% reduction in soot, compared to the reference case for HFO #4. The mechanical strain for Case A is higher than permitted (engine limit is 15 MPa), as the computed maximum pressure is 16.6 MPa. On the other hand, Case B results in the minimal NO_x production, 7.5% of the reference case, with the maximum penalty in SFOC, of about 33%, a low value of maximum cylinder pressure, equal to 14.3 MPa, and an increase of 292% in soot emissions, in comparison to the reference case of HFO #4. These extreme solutions are also marked in Fig. 103, which presents the unconstrained problem Pareto front in terms of the normalized values of NOx and soot concentrations. The computed Pareto front indicates the trade-off between NO_x and soot emissions; conditions favoring the reduction of NO_x contribute to the increase of soot, and vice versa. Table 36 presents the values of all design variables, objective functions, as well as computed maximum cylinder pressure and normalized work output, for all optimal solutions of the unconstrained problem Pareto front. The values of objective functions clearly indicate that a significant improvement in SFOC is hardly obtained, while a substantial reduction in work per cycle is computed, even though the maximum cylinder pressure exceeds that of the reference case (Cases a, b, c, d, e, f and g). The increase in maximum pressure with respect to the reference case is caused by the earlier injection of considerable pilot fuel mass (pilot-pulse is characterized by more than 34% of total injected mass), and the initiation of combustion at before TDC. It is noted that all optimal solutions correspond to injection profiles with start of injection before TDC (SOPil<0 deg.). Both the maximum cylinder pressure and work per cycle evidently decrease with the increase of the interval between the first and second injection pulse (PiDwell), which results in the delayed start of main injection. For delayed main injection, SFOC deteriorates, final NOx concentration decreases and soot concentration elevates. For delayed start of main injection,

the injected mass of the main pulse, of more than 43% of the total mass, is burnt at a later stage after TDC and under cylinder conditions of low pressure and low temperature, which do not favour work output and NO_X production, as well as soot oxidation. The role of post injection is shown to be important in the final results, as the suitable choice of post injected mass (PoMF) and start of post injection (via PoDwell) can result in vast simultaneous reduction in NO_X and soot emissions, even though the resulting mechanical strain may not be acceptable, and the corresponding SFOC penalty may be substantial (Cases b, d and e).



Fig. 101. Pareto front, presented in terms of normalized values of final NO_X concentration and SFOC, for the unconstrained optimization problem.



Fig. 102. Pareto front, presented in terms of normalized values of final soot concentration and SFOC, for the unconstrained optimization problem.



Fig. 103. Pareto front presented in terms of normalized values of final NO_X and soot concentrations (NO_X - soot trade-off), for the unconstrained optimization problem.

	Design variables							Obj	bjective functions	
	PiMF [%]	SOPil [deg.]	PiDw [deg.]	PoMF [%]	PoDw [deg.]	Cylinder pressure [MPa]	Work [%ref.case]	SFOC [%ref.case]	NOx [%ref.case]	Soot [%ref.case]
Case A	31.872	-3.667	0.767	7.345	3.890	16.643	101.75%	98.28%	120.57%	90.06%
Case a	46.925	-2.882	1.568	3.762	9.516	16.619	100.23%	99.77%	95.69%	125.35%
Case b	27.265	-4.294	1.492	28.053	8.808	16.539	98.64%	101.37%	85.04%	93.54%
Case c	45.944	-3.588	4.011	20.617	5.120	16.932	97.99%	102.06%	74.27%	128.69%
Case d	39.135	-3.980	7.712	2.799	6.908	16.605	97.88%	102.17%	63.87%	91.53%
Case e	46.327	-0.804	10.231	1.085	5.827	15.31	93.07%	107.44%	50.97%	89.16%
Case f	41.923	-1.549	9.773	27.805	6.200	15.494	90.37%	110.66%	38.74%	156.76%
Case g	34.193	-1.667	11.185	3.833	4.337	15.044	90.02%	111.09%	34.89%	118.35%
Case h	21.055	-4.059	13.093	5.979	3.518	14.799	87.29%	114.56%	27.66%	170.83%
Case i	30.364	-2.373	14.810	23.315	7.653	15.092	83.84%	119.28%	24.42%	160.30%
Case j	18.231	-4.647	15.764	2.998	5.790	14.628	83.10%	120.33%	17.41%	221.07%
Case k	22.132	-3.353	17.481	5.979	7.541	14.706	79.25%	126.18%	11.90%	333.12%

8.100

0.761

3.145

77.97%

76.92%

75.44%

128.26%

130.00%

132.56%

15.175

14.189

14.291

22.359

18.039

17.656

-4.765

-3.118

-3.667

19.084

18.130

19.542

25.517

21.920

4.895

Case I

Case m

Case B

Table 36. Values of design variables, objective functions, as well as computed maximum cylinder pressure and normalized work output, for all optimal solutions of the unconstrained optimization problem, which constitute the Pareto front.

228.83%

277.90%

392.37%

13.24%

9.18%

7.46%

Fig. 104 presents the injection profiles for the optimal Cases A and B, along with that of reference case of HFO #4. Both Case A and Case B are characterized by the same start of pilot injection (SOPiI) and similar delay between the end of main injection and the start of post injection. The delay between end of pilot injection and the start of main injection (PiDwell) constitutes the major difference between the three-pulse injection profiles of Case A and Case B. This difference contributes to the extreme figures of resulting objective functions, as well as maximum cylinder pressure and work output. Thus, useful conclusions can be attained by comparing the two limiting solutions A and B.



Fig. 104. Unconstrained optimization using HFO #4: fuel injection profiles for optimal cases A and B, and for reference case.

Fig. 105 shows the computed histories of cylinder pressure for the optimal Cases A and B, as well as that of the reference case of HFO #4. The effect of the amount of pilot injected mass on maximum cylinder pressure is evident; the considerable pilot mass fraction of about 32% of Case A results in higher pressure levels, in comparison to Case B and reference case. It is noted that the maximum cylinder pressure is achieved during main injection in Case A, in contrast to Case B, in which pilot injection only contributes to maximum cylinder pressure, due to the effect of retarded start of main injection (longer PiDwell). These trends are also confirmed in Fig. 106, which presents the corresponding computed normalized ROHR histories, including an experimental curve for HFO (de Hoog et al. 2010). A good agreement of combustion development in comparison to experiment is noted for the reference case of HFO #4, including ignition delay.

Fig. 107 and Fig. 108 present the computed history of space-averaged NO_x concentration and total soot mass, respectively, for Case A and Case B, as well as for reference case. Case A is characterized by NO_x formation during all three pulses, resulting in an increase of 21% with respect to the reference case. Soot formation is accompanied by intense soot oxidation, due to the uninterrupted burning rate and the resulting high local cylinder temperature values. On the other hand, for Case B, NO_x formation is not favoured during the pilot pulse, while corresponding soot produced is fully oxidized till termination of the first combustion event (see Fig. 106). Thus, NO_x and soot development occurs during the (retarded) main and post combustion events. As illustrated in Fig. 107 and Fig. 108, the corresponding conditions of pressure and temperature within the cylinder do not favour NO_x formation and soot oxidation. Overall, the results of the unconstrained optimization problem indicate that the effect of three-pulse injection (pilot-, main- and post-injection) on engine operation can be substantial, depending on its characteristics. In particular, a significant reduction in both NO_X and soot emissions can be attained at a penalty in work output and SFOC, which is associated with decreased maximum cylinder pressure. Possibly, a suitable choice of pilot and post injection characteristics may counterweight this loss, while it may be accompanied by reduced emissions. Thus, formulation and solution of an optimization problem, constrained in terms of useful work and maximum pressure, is essential.



Fig. 105. Unconstrained optimization using HFO #4: Computed cylinder pressure traces for optimal cases A and B, and for reference case.



Fig. 106. Unconstrained optimization using HFO #4: Computed ROHR traces for optimal cases A and B, and for reference case. An experimental ROHR trace for HFO operation is also included (de Hoog et al. 2010).



Fig. 107. Unconstrained optimization using HFO #4: Computed histories of space-averaged NO_X concentration for optimal cases A and B, and for reference case.



Fig. 108. Unconstrained optimization using HFO #4: Computed histories of total soot mass for optimal cases A and B, and for reference case.

8.4.2 Constrained optimization problem

The constrained optimization problem is formulated as follows:

$$\begin{cases} objective \ function: \min \vec{F}(\vec{x}) = \left(NO_{X}(\vec{x}), soot(\vec{x}), SFOC(\vec{x})\right)^{T} \\ constraints: \ \vec{g}(\vec{x}) = \left(P_{\max}(\vec{x}), W(\vec{x})\right) \\ \vec{x} = \left(SOPiI, \ PiMF, PiDwell, PoDwell, \ PoMF\right) \end{cases}$$
(87)

Fig. 109 shows the computed Pareto front in terms of the normalized values of final NO_x concentration and SFOC, for both the unconstrained and constrained problem. The Pareto fronts are also presented in Fig. 110, in terms of the normalized final soot concentration and SFOC. The trade-off between NO_x and soot concentrations is illustrated in the presentation of Pareto fronts of Fig. 111. Table 37 includes all values of design variables, objective functions, as well as variables subject to constraints, for all optimal (Pareto front) solutions of the constrained optimization problem. All optimal constrained solutions are characterized by pilot injection before TDC (SOPil<0 deg.), in accordance with the unconstrained problem solutions (see Table 36). The three-pulse injection profile of Case C has favorable characteristics compared to the reference case of HFO #4, corresponding to a reduction of 15% in NO_x and 11% in soot emissions, with a penalty in work output of nearly 1% (within the relaxed limit adopted in the present optimization) and a maximum pressure slightly below the imposed limit of 15.0 MPa.



Fig. 109. Pareto fronts in terms of normalized values of final NO_X concentration and SFOC, for both the unconstrained and constrained optimization problem.



Fig. 110. Pareto fronts in terms of normalized values of final soot concentration and SFOC, for both the unconstrained and constrained optimization problem.



Fig. 111. Pareto fronts in terms of normalized values of final NO_X and soot concentrations (NO_X - soot trend-off), for both the unconstrained and constrained optimization problem.

	Design variables					Constraints		Objective functions		
_	PiMF [%]	SOPil [deg.]	PiDw [deg.]	PoMF [%]	PoDw [deg.]	Max. Pressure [MPa]	Work [%ref.case]	SFOC [%ref.case]	NOx [%ref.case]	Soot [%ref.case]
Case n	1.156	-1.784	1.912	13.804	3.704	14.924	99.59%	100.41%	89.42%	89.82%
Case o	20.157	-4.333	3.820	12.076	3.555	14.797	99.07%	100.94%	97.73%	86.36%
Case p	3.405	-1.784	1.607	10.830	4.896	14.665	99.07%	100.94%	86.35%	92.75%
Case C	1.634	-1.314	1.301	24.561	4.114	14.884	99.03%	100.98%	85.13%	88.71%
Case D	20.074	-3.196	2.523	9.831	3.853	14.980	99.00%	101.01%	104.93%	77.66%

Table 37. Values of design variables, objective functions, as well as computed maximum cylinder pressure and normalized work output, for all optimal solutions of the constrained optimization problem, which constitute the Pareto front.

Further insight into the computed optimal solution of Case C can be gained by means of a characterization of engine Thermodynamics, as well as by T- ϕ maps and visualization of computed flow fields. Fig. 112 presents the fuel injection profile of Case C, along with that of the reference case of HFO #4. A pilot-injected mass fraction of 1.6% of the total injected mass is introduced in the cylinder at -1.3° CA ATDC, while the start of the second pulse nearly coincides with the start of continuous injection of the reference case (+1° CA ATDC). It is noted that the presence of post injection characterized by PoMF equal to 24.6% and PoDwell equal to 4.1° CA results in a start of post injection at a value of engine crank angle higher than that of the end of continuous injection of the reference case.



Fig. 112. Constrained optimization using HFO #4: Fuel injection profiles for optimal Case C and for reference case.

Fig. 113 presents the computed histories of cylinder pressure for the optimal Case C and for the reference case with HFO #4. For both cases, the maximum cylinder pressure is achieved during main injection (see Figure 112), at the same value of engine crank angle. Subsequently, the pressure becomes slightly lower for Case C, due to the termination of the main injection pulse. The onset of post-injection combustion gradually smooths out the discrepancy between the two pressure traces. Fig. 114 shows the corresponding computed normalized ROHR histories, including an experimental curve for HFO (de Hoog et al. 2010). The presence of non-zero burning rate at TDC in Case C is evidently associated with pilot injection. As the pilot injected mass of Case C is only 1.6% of the total injected mass and the start of main injection hardly differs in the two cases, the subsequent development of combustion is nearly identical. For Case C, the ROHR trace further drops at the termination stage of the main pulse, and begins to rise again due to burning of the post-injected fuel. The two traces converge to low values, and further diminish in the very late stages of combustion.

Fig. 115 and Fig. 116 present the computed history of space-averaged NO_X concentration and total soot mass, respectively, for Case C and for reference case. NO_X formation during pilot injection is not favoured. NO_X are formatted at the early stage of combustion during main injection, for both cases. During the interval between the end of the injection and the start of post injection (PoDwell), for Case C, NO_X and soot are characterized by lower levels, associated with the decreased burning rate (see Figure 114). During post injection, soot mass increases again, due to soot formation from the burning of the newly injected fuel. Temperature levels resulting from the combustion of post-injected fuel contribute to soot oxidation, without favoring NO_X formation. As a result, the final NO_X and soot emissions are both lower for Case C.



Fig. 113. Constrained optimization using HFO #4: Computed cylinder pressure traces for optimal Case C and for reference case.



Fig. 114. Constrained optimization using HFO #4: Computed ROHR traces for optimal Case C and for reference case. An experimental ROHR trace for HFO operation is also included (de Hoog et al. 2010).



Fig. 115. Constrained optimization using HFO #4: Computed histories of space-averaged NO_X concentration for optimal Case C and for reference case.



Fig. 116. Constrained optimization using HFO #4: Computed histories of total soot mass for optimal Case C and for reference case.

Fig. 117, Fig. 118, and Fig. 119 present computational results in terms of iso-contours of oxygen mole fraction, temperature, equivalence ratio, NO_X mole fraction and soot density, at a plane very close to the injectors, for Case C and for the reference case with HFO #4, at representative crank angles, namely 5°, 10°, 15°, 20° and 30° CA ATDC.

Fig. 117 shows that the timing of optimal pilot and post dwells (PiDwell and PoDwell) characterizing the injection profile of Case C enable the convection of oxygen in the areas in front of the three injectors, considering the strong swirling motion of the mixture; this enhances fuel-air mixing and changes the local stoichiometry, thus supporting burning, and giving elevated product temperatures that favour soot oxidation.

In Fig. 118, the visualization of the flow field at 5° CA, and 10° CA indicates similar computational results for local temperature and equivalence ratio, even though pilot injection has been terminated for Case C. In Fig. 119, the zero NO_X concentration at 5° CA for Case C proves that there has been no NO_X formation during combustion of pilot injected fuel. Subsequently, local temperature and equivalence ratio values differ, since the main injection for Case C terminates at 15° CA, while the continuous injection of reference case is still in progress (see also Fig. 112). Thus, Case C is characterized by lower levels of NO_X and soot at 15° CA (see also Fig. 115 and Fig. 116). At higher values of crank angle, the equivalence ratio and soot values are elevated for Case C, as post injection is in progress at 20° CA. Finally, for Case C, lower NO_X levels are illustrated at 30° CA, with respect to the reference case. This indicates that combustion of the post-injected fuel results in temperature levels that do not favour intense NO_X formation. The locally increased values of equivalence ratio and soot for Case C are associated with the retarded post-injection.

Fig. 120 presents corresponding T- ϕ maps for Case C, as well as for reference case. The present T- ϕ maps confirm the similar behavior of Case C and reference case at the early stages of combustion, i.e. at 5° CA and 10° CA after TDC; pilot injection does not contribute to NO_X and soot formation. Subsequently, lower levels of NO_X and produced soot are observed for Case C at 15° CA ATDC, associated with the termination of main injection and the presence of post dwell (4.1° CA). At 20° CA, the higher burning rate corresponding to Case C (see Figure 114), caused by combustion of the post-injected fuel, results in soot formation. At the crank angle of 30° CA, engine operation is characterized by low levels of produced pollutants, for both cases.

The present results thus point out the simultaneous reduction in NO_X and soot emissions, by 15% and 11%, respectively; engine operation is however still far from meeting the strict requirements of Tier III regarding NO_X. Therefore, in-cylinder measures should be complemented by other measures, as Exhaust Gas Recirculation (EGR), water addition and exhaust gas after-treatment.



Fig. 117. Reference case and optimal Case C (constrained optimization) using HFO #4: color-coded contours of oxygen mole fraction at a horizontal plane very close to the injectors, at selected time-instants.



Fig. 118. Reference case and optimal Case C (constrained optimization) using HFO #4: color-coded contours of temperature and equivalence ratio at a horizontal plane very close to the injectors, at selected time-instants.


Fig. 119. Reference case and optimal Case C (constrained optimization) using HFO #4: color-coded contours of NO_X mole fraction and soot density at a horizontal plane very close to the injectors, at selected time-instants.



Fig. 120. Reference case and optimal Case C (constrained optimization) using HFO #4: T-φ maps, including local T, φ values of all computational cells, at selected time-instants.

9. Novelty of the present work and contribution to scientific research

9.1 Proposed methodology

The following methodology has been proposed and followed here in the context of flow and combustion in large marine engines operating with HFO:

- Development and validation of an integrated model of marine HFO thermophysical properties, accounting for different HFO qualities, for engineering CFD studies in marine engines (Kontoulis et al. 2018). The new thermophysical properties model is also available in GUI format, as shown in Fig. 121.

HF	O thermophysical p	properties model	V2014.1 NAME/DME NTUA
Measured input values Density @ 15 deg. Celsius: 1001.1 kg/m3 Kinematic viscosity @ 50 deg. Celsius: 1255 cSt Kinematic viscosity @ 15 deg. Celsius: 42504.5 cSt Sulphur weight content: 0.886 % Calculation of HFO preheating temperature Desired value of kinematic viscosity in cSt 35.631	Ploting Property: Vinematic vis	10 ³ 001 10 ²	HFO C ₁₄ H ₅₀
Resulting temperature: 120 deg. Cetalus SG (60F/60F) API gravity 1.00 9.72 CCAL Jantison quality		10 ⁻¹⁰ -10 ⁻¹⁰	100 425 450 475 600
EVEX generation grammy 65.33 Moderate - Poor LHV [K/kg] Heat of formation [K//kg] Cp [K//kg] 4082.62.4 1075.03 1.41 * 26 deg. Celsius, 1 Am	Boiling point Tc Pc [bar] 829.71 996.81 9.23 deg. Kelvin 👻	MW [gr/mole] Watson factor Acentri 554.84 11.41	c factor CH atomic ratio 1.27 0.97

Fig. 121. GUI format of the HFO thermophysical properties model reported in Kontoulis et al. (2018).

- Proper extension of the fuel library of KIVA-3 CFD code with several HFO qualities.

- Proper adaptation of the CAB spray model. Implementation in the KIVA-3 CFD code for HFO spray simulations.

- Introduction of a new kinetic model accounting for HFO aromaticity. Implementation in KIVA-3 CFD code (Kontoulis et al. 2019).

- Implementation of three-pulse injection profiles (pilot-, main- and post-injection) in CFD optimization studies of marine engines.

9.2 New findings of the present thesis

The models developed have been applied in CFD studies of flow and combustion, in the context of marine engines operating with HFO. The main findings can be summarized as follows:

- The new integrated model of marine HFO thermophysical properties accurately predicts a large set of fuel properties relevant for CFD studies, such as molecular weight, normal boiling point, carbon-to-hydrogen ratio, pseudo-critical pressure and temperature values, LHV, enthalpy of formation, specific heat capacity, CCAI, Watson characterization factor, acentric factor, as well as the temperature dependence of density, viscosity, vapor pressure, heat of evaporation, surface tension, mass diffusion coefficient and sensible enthalpy. The computed results for four different HFO qualities, as well as HFO qualities prescribed by the ISO 8217:2010, namely 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK, have been presented (Kontoulis et al. 2018).

- CFD studies aiming at characterizing the dynamics of non-reactive and reactive HFO sprays under conditions relevant for large marine engines have been performed. Very good agreement against experiments has been achieved. The low evaporation tendency of HFO, as well as the effects of HFO preheating on spray development have been demonstrated (Kontoulis et al. 2019).

- CFD studies aiming at formulating a reference case using HFO in the marine Diesel engine RT-flex58T-B have been performed. Very good agreement between computational results and experiments has been achieved, in terms of pressure, heat release rate and pollutant emissions. The effect of HFO preheating has also been demonstrated (Kontoulis et al. 2019).

- CFD studies of HFO combustion in the marine Diesel engine RT-flex58T-B have been performed, implementing a three-pulse HFO injection profile (pilot-, main- and post-injection) in the frame of multi-objective optimization studies, aiming at the simultaneous minimization of engine emissions and SFOC. For constrained optimization, the results show that NO_X and soot can be reduced by 15% and 11%, respectively, without a penalty in SFOC.

9.3 Journal publications

The main core of present work has been presented in the following journal publications:

- [1] 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, DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000576.
- [2] Kontoulis, P., Kaiktsis, L., von Rotz, B., and Boulouchos, K. (2019). "CFD modeling and experimental spray studies for different Heavy Fuel Oil qualities with respect to large twostroke marine engines", J. Energy Eng., in press, DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000610.

The author of the present thesis is also a co-author of the following journal publication:

[3] Stratsianis, V., Kontoulis, P., and Kaiktsis, L. (2016). "Effects of fuel post injection on the performance and pollutant emissions of a large marine engine", J. Energy Eng., 142(2), E4016001 1-19, DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000337.

9.4 Refereed conference publications

Two referred conference papers and one poster have resulted from the work presented in this thesis:

- [1] Kontoulis, P., D. Kazangas, and Kaiktsis, L. (2013). "A new model for marine Heavy Fuel Oil thermophysical properties: validation in a constant volume spray chamber", Paper No 63, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Chania, Greece.
- [2] Kontoulis, P., Kaiktsis, L., von Rotz, B., Schmid, A., Weisser, G., Herrmann, K., and Boulouchos, K. (2014). "CFD and experimental studies of Heavy Fuel Oil sprays for marine engine applications", Paper No ABS-288, 26th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Bremen, Germany.
- [3] Kontoulis, P., D. Kazangas, and Kaiktsis, L. (2015). "Development and validation of a new model for marine Heavy Fuel Oil thermophysical properties", Poster session, 5th Annual TRC – Idemitsu Workshop, Abu Dhabi, UAE.

The author of the present thesis is also a co-author of the following referred conference paper:

[4] Pananakis, E., Kontoulis, P., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2013). "Investigation of fuel injection strategies for partially premixed compression ignition combustion in two-stroke marine diesel engines", Paper No 72, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Chania, Greece.

10. Concluding remarks

Marine HFOs are blending products of residue and light fractions, commonly referred to as IFOs, and handled using heating. The quality of commercially available modern marine fuels is continuously deteriorating, due to the adaptation of complex refining process for boosting the light petroleum products. The poor quality of marine HFO causes problems during onboard vessel fuel handling, as well as ignition and combustion problems.

It is widely accepted today that CFD studies can substantially contribute to understanding and optimizing engine aerothermochemistry, provided the key in-cylinder processes such as spray break-up, evaporation, fuel-air mixing, ignition and combustion, are properly described. The effectiveness of CFD modeling depends crucially on the precision of fuel thermophysical properties utilized, which previously posed limitations with respect to the applicability of CFD simulations to marine engine operation, considering that HFO is the predominant fuel in this industry. In order to overcome those limitations, a detailed model of HFO thermophysical properties has been developed in the course of the present Ph.D. thesis, serving as the first step towards CFD flow and combustion studies in marine engines. A major objective of the present investigation has been to develop a general model that can account for any IFO quality stored onboard a vessel. To this end, the new model has been developed under the assumption that HFO is a blended heavy petroleum fraction of undefined composition. The present modeling has adopted the one-component approach, an approach widely used in CFD for distillate fuels. The required input of the present model consists in four values of fuel bulk thermophysical properties: (a) density at a given temperature, (b) kinematic viscosity values at two values of temperature, and (c) sulfur weight content. The input setting has been selected intentionally, since these pronounced values are provided during bunkering, and characterize the quality of HFO. The model predicts a large set of fuel properties relevant for CFD studies, such as molecular weight, normal boiling point, carbon-to-hydrogen ratio, pseudo-critical pressure and temperature values, LHV, enthalpy of formation, specific heat capacity, CCAI, Watson characterization factor, acentric factor, as well as the temperature dependence of density, viscosity, vapor pressure, heat of evaporation, surface tension, mass diffusion coefficient and sensible enthalpy. Validation of the new model has utilized new series of thermochemical and thermophysical property measurements for two different HFO samples, provided to us by Winterthur Gas & Diesel and SGS Greece; the first HFO has been used in recent experimental spray studies, while the second one is representative of HFOs stored onboard a vessel. Further, the model was tested and compared against measured HFO thermophysical properties reported in the literature, and was referred to values for ntetradecane ($C_{14}H_{30}$). Moreover, applying the new model, the thermophysical properties of seven representative marine HFO qualities, prescribed by the ISO 8217:2010, namely 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK, have been computed.

The model results in terms of density, kinematic and dynamic viscosity and LHV closely match corresponding experimental measurements; a good agreement has been also obtained for surface tension. The agreement is also good regarding all other properties considered here. The capability of the model to predict a wide range of marine HFO qualities has been demonstrated.

The new model has been applied to calculate the properties of two different HFO qualities which have been utilized in SCC experiments, generating valuable data with regard to spray morphology and combustion dynamics under conditions representative of large two-stroke marine engines. The calculated HFO properties have been implemented in the fuel library of a modified KIVA-3 CFD code. Further, a new extension of a validated kinetic ignition model based on Arrhenius type correlations has been proposed, accounting for HFO aromaticity (CCAI). The ignition model constants have been optimized based on new series of experiments using both HFOs, for a constant pressure value of 90 bar. The present modeling has been further validated by deploying extensive CFD simulations of non-reactive and

reactive sprays in the SCC, under conditions similar to those of large marine engines. To this end, a proper adaptation of the CAB spray model has been achieved, accounting for the initial droplet size distribution, as well as for the number and size of droplets resulting from secondary break-up.

For non-reactive sprays, computational results have demonstrated a very good agreement against experiments for the spray penetration length and overall spray development. The present computational modeling yields a proper representation of the fragmented liquid core near the nozzle tip, while also predicting the low evaporation tendency of HFO. Further, the effects of HFO preheating on spray development, in particular penetration length, SMD distribution and evaporation rate, have been properly predicted by considering three representative temperature values. Minimal cascade break-up and evaporation rate, resulting in a longer penetration length, have been calculated for the lowest HFO preheating temperature (80 $^{\circ}$ C).

Further, the present modeling has been applied to reactive spray flow. Experimental results of reactive HFO sprays have first presented, for a chamber air density of 34.7 kg/m³, including ignition delay and location. The present CFD simulations accurately reproduce the experimentally identified HFO ignition characteristics for fuels with different CCAI (ignition quality), and also verify the strong effects of HFO preheating. Specifically, ignition delay decreases for higher levels of initial HFO temperature. Ignition location is strongly affected by the gas swirling motion. Overall, the present modeling constitutes a substantial step towards reliable engineering CFD studies in marine engines operating with HFO.

New computational results for HFO combustion in a large two-stroke marine engine have been presented and compared against experimental data for HFO and MDO. The effect of HFO preheating on cylinder pressure, rate of heat release and emission formation has been quantified. Visualization of in-cylinder flow field, supported by post-processing in the frame of T- ϕ maps, has been performed, justifying and interpreting the trends arising from computed global quantities. By properly advancing SOI, HFO combustion results in rate of heat release and pressure traces similar to those of MDO. Combustion of sufficiently preheated HFO is characterized by higher NO_x concentrations and soot oxidation rates, in comparison to MDO. Insufficient HFO preheating is associated with strong negative effects on pressure and engine work output, while also increasing soot emissions.

Multiple fuel injection strategies have been proven to be effective for reducing pollutant emissions in marine engines. Aiming at the improvement of performance with simultaneous reduction of pollutant emissions of a large bore two-stroke marine engine, advanced injection strategies, characterized by the presence of a pilot-, a main- and a post-injection pulse, were investigated in the present work, by means of CFD. Here, the fuel injection profile, consisting of three pulses, has been parameterized in terms of five design variables: (i) Start Of Pilot Injection (SOPiI), (ii) Pilot Mass Fraction (PiMF), (iii) Pilot Dwell (PiDwell), (iv) Post Dwell (PoDwell), and (v) Post Mass Fraction (PoMF). The thermophysical properties of the HFO used in these applications have been calculated using the present new HFO model. Results have been evaluated against a reference case characterized by continuous injection of HFO.

The optimization studies performed consisted in formulating and solving both an unconstrained and a constrained multi-objective optimization problem. Here, the parameters defining the injection profile have constituted the problem design variables. Optimization has aimed at minimizing SFOC, as well as the final NO_X and soot emissions, expressed properly by corresponding objective functions. To this end, the KIVA-3 CFD code has been coupled with the EASY optimization tool, which is based on EAs. In the case of constrained optimization, the maximum cylinder pressure and the minimum work output per engine cycle were the problem constraints. The results of optimization have shown that, for the unconstrained problem, significant reductions in both NO_X and soot can be achieved, with a penalty in work output and an excess in the engine mechanical strain. For constrained

optimization, the results suggest that NO_X and soot can be reduced by 15% and 11%, respectively, at no penalty in SFOC.

To interpret the above results, thermodynamic and T- φ map analysis, as well as visualization of the computed fields, has been utilized. This investigation has verified that combustion of pilot injected fuel does not contribute to NO_X and soot formation. The pilot injection is characterized by start of injection before TDC, contributing to maintaining a high level of useful work per engine cycle. The choice of start of main injection, as well as the characteristics of post injection, i.e. post injected mass and start of post injection, can result in substantial simultaneous reduction in NO_X and soot emissions. Specifically, a suitable choice of these parameters can lower in-cylinder temperatures, due to the significant reduction in ROHR, thus suppressing NO_X formation. Further, soot production is reduced, as new liquid fuel does not enter the combustion chamber (termination of main pulse), while the strong swirling motion of gas convects a mixture rich in oxygen in front of the injectors. Thus, the subsequently injected fuel (post injection) experiences enhanced mixing with air, and it is burned under conditions of local stoichiometry that result in increased soot oxidation rates, at minimal further production of NO_X.

It is underlined that these reductions attained via constrained optimization are still far from meeting the strict requirements of Tier III regulations regarding NO_x . Thus, in-cylinder measures should be complemented by other measures as EGR, water addition, and exhaust gas after-treatment. The approach developed and utilized here can be very helpful in exploiting the potential of an optimal implementation of such measures, in conjunction with in-cylinder ones.

Overall, the present development constitutes a solid basis for CFD studies of flow and combustion in large marine engines operating with HFO.

This page is intentionally left blank.

11. Suggestions for future work

Suggestions for future work, following the present study, should aim at a further development of the present HFO modeling, as well as at an extension of computational studies, as follows:

- Collection of a high number of samples of different marine HFO qualities, aiming at a further validation of the present model of thermophysical properties. In particular, emphasis can be placed on surface tension measurements, with the goal of introducing an improved formula.

- Extension of the present multi-objective optimization studies by introducing one more design variable in determining the three-pulse injection profile, as follows:

Mass Reduction (MR), accounting for the reduction in total injected fuel mass with respect to the reference case:

$$MR = \frac{m_{ref} - m_{inj}}{m_{ref}} \cdot 100\%$$
 (88)

- Multi-objective optimization studies of advanced injection strategies in marine engines in the presence of EGR, water addition and exhaust gas after-treatment, both for two-stroke and four-stroke marine engines.

This page is intentionally left blank.

References

American Petroleum Institute - API (1997). "Technical data book, petroleum refining".

Amsden, A.A. (1992). "KIVA-3: A KIVA program with block-structured mesh for complex geometries", Los Alamos National Laboratory, LA-12503-MS.

Amsden, A.A., O'Rourke, P.J., and Butler, T.D. (1989). "KIVA-II: A computer program for chemically reactive flows with sprays", Los Alamos National Laboratory, LA-11560-MS.

Aström, G., Daniels, A., and Aabo, K. (2005). "Marine diesel engines, catalytic fines and a new standard to ensure safe operation: separation performance standard", Technical paper written by Alfa Laval, BP Marine and MAN B&W Diesel.

Ancheyta, J. (2013). "Modeling of processes and reactors for upgrading of heavy petroleum", Taylor & Francis Group, CRC Press.

Andreadis, P., Zompanakis, A., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2011). "Effects of the fuel injection parameters on the performance and emissions formation in a large bore marine diesel engine", Int. J. of Eng. Res., 12, 14-29.

Arcoumanis, C., Gavaises, M., and French, B. (1997). "Effect of fuel injection processes on the structure of Diesel sprays", SAE paper, 970799.

ASTM. 2012. Standard test method for interfacial tension of oil against water by the ring method. ASTM D971. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2016a. Standard test method for determination of water in petroleum products, lubricating oils, and additives by coulometric Karl Fischer titration. ASTM D6304. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2016b. Standard test method for dynamic viscosity and density of liquids by Stabinger viscometer (and the calculation of kinematic viscosity). ASTM D7042. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2017a. Standard test method for acid number of petroleum products by potentiometric titration. ASTM D664. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2017b. Standard test method for heat of combustion of liquid hydrocarbon fuels by bomb calorimeter. ASTM D240. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2018a. Standard test method for corrosiveness to copper from petroleum products by copper strip test: Corrosiveness to copper - Copper strip test for your support. ASTM D130/IP154. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2018b. Standard test method for density, relative density, and API gravity of liquids by digital density meter. ASTM D4052. West Conshohocken, PA: ASTM.

Baert, R.S.G. (1989). "Autoignition of a diesel spray at high pressures and temperatures", SAE Technical paper 890417.

Bartok, W., and Sarofim, A.F. (1991). "Fossil fuel combustion: A source book", New York: Wiley.

Baumgarten, C. (2006). "Mixture formation in internal combustion engines", Springer, Germany.

Bolla, M., Cattin, M.A., Wright, Y.M., Boulouchos, K., and Schulz, R. (2012). "3D-CFD Lagrangian spray simulations for large two stroke marine Diesel engines compared with experimental data of a spray combustion chamber", Paper ICES2012-81016, Proceedings of the ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Spring Technical Conference, Torino, Italy.

Borman, G.L., and Johnson, J.H. (1962). "Unsteady vaporization histories and trajectories of fuel drops injected into swirling air", SAE Technical paper 598 C.

Chryssakis, C., Pantazis, K., and Kaiktsis, L. (2010). "Combustion modeling with Heavy Fuel Oil for large marine Diesel engine applications", Paper No. 236, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

de Hoog, P., Steernberg, K., and Forget, S. (2010), "Investigating the ignition properties of marine fuels by the Fuel Ignition Analyser and its comparison to marine engines", Paper No. 70, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

Demmerle, R., and Heim, K. (2004). "The evolution of the Sulzer RT-flex common rail system", In Proc., CIMAC Congress, Kyoto, Japan.

Douladiris, K. (2010). "Computational study of soot formation in marine diesel engines." Diploma thesis, National Technical Univ. of Athens (NTUA), Greece.

Dukowicz, J.K. (1980). "A particle-fluid numerical model for liquid sprays", J. Computational Physics, Vol. 35, No. 3, pp. 229-253.

Eyring, V., Stevenson, D.S., Lauer, A., Dentener, F.J., Butler, T., Collins, W.J., Ellingsen, K., Gauss, M., Hauglustaine, D.A., Isaksen, I.S.A., Lawrence, M.G., Richter, A., Rodriguez, J.M., Sanderson, M., Strahan, S.E., Sudo, K., Szopa, S., van Noije, T.P.C., and Wild, O. (2007). "Multi-model simulations of the impact of international shipping on atmospheric chemistry and climate in 2000 and 2030", Atmospheric Chemistry and Physics, 757-780.

Faeth, G.M., Hsiang, L.P., and Wu, P.K. (1995). "Structure and Breakup Properties of Sprays", International Journal Multiphase Flow, Vol. 21, Suppl., pp. 99–127.

Fenimore, C.P. (1971). "Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbon flames." 13th Symp. Int. Comb., 373-379.

Fink, C., Buchholz, B., Niendorf, M., and Harndorf, H. (2008). "Injection spray analyses from medium speed engines using marine fuels", Paper ILASS08-6-9, 22nd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Como Lake, Italy.

Garaniya, B.V. (2009). "Modeling of Heavy Fuel Oil spray combustion using continuous thermodynamics", Ph.D. Thesis, University of Tasmania, Australia.

Garaniya, B.V., and Goldsworthy, L. (2007). "Vaporization and pyrolysis modelling of a single droplet of Heavy Fuel Oil using continuous thermodynamics", ANZIAM Journal, 49, C116-C138.

Garaniya, B.V., Goldsworthy, L., and McWilliam, D. (2011). "Thermal cracking and polymerization modelling of a single Heavy Fuel Oil droplet", CHEMECA.

Goldsworthy, L. (2006). "Computational fluid dynamics modeling of residual fuel oil combustion in the context of marine diesel engines", Int. J. Eng. Res. 7 (2): 181–199. https://doi.org/10.1243/146808705X30620.

Gray, J.A., Holder, G.D., Brady, C.J., Cunningham, J.R., Freeman, J.R., and Wilson, G.M. (1985). "Thermo-physical properties of coal liquids: vapor pressure and heat of vaporization of narrow boiling coal liquid fractions", Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 24, 97-107.

Hardenberg, H. O., and Hase, F. W. (1979). "An empirical formula for computing the pressure rise delay of a fuel from its cetane number and from the relevant parameters of direct-injection diesel engines", SAE Technical paper 790493.

Haynes, B.S., and Wagner, H.G. (1981). "Soot formation", Prog. Energy Comb. Sc., 7, 229-273.

Henrik, R., Rojgaard, C., Jensen, O., and Englund, M. (2013). "Onboard fuel oil cleaning, the ever neglected process How to restrain increasing cat-fine damages in two-stroke marine engines", Paper No. 51, CIMAC Congress, Shanghai, China.

Herrmann, K., Kyrtatos, A., Schulz, R., Weisser, G., von Rotz, B., Schneider, B., and Boulouchos, K. (2009). "Validation and initial application of a novel spray combustion chamber representative of large two-stroke Diesel engine combustion systems", Paper No 005, 11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS), Vail, Colorado, USA.

Herrmann, K., Schulz, R., and Weisser, G. (2007). "Development of a reference experiment for large diesel engine combustion system optimization", Paper No. 98, CIMAC Congress, Vienna, Austria.

Herrmann, K., von Rotz, B., Schulz, R., Weisser, G., Boulouchos, K., and Schneider, B. (2010). "Reference data generation of spray characteristics in relation to large 2-stroke marine diesel engines using a novel spray combustion chamber concept", Paper No 139, 23rd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Brno, Czech Republic.

Herrmann, K., von Rotz, B., Schulz, R., Weisser, G., Schneider, B., and Boulouchos, K. (2011). "A Spray Combustion Chamber facility for investigations in relation to large 2-stroke marine Diesel engine combustion system optimization", International Symposium on Marine Engineering (ISME), Kobe, Japan.

Heywood, J.B. (1988). "Internal combustion engines fundamentals", USA: McGraw Hill.

Hiroyasu, H., and Arai, M. (1990). "Structures of fuel sprays in Diesel engines", Warrendale, PA: Society of Automotive Engineers, SAE paper. 900475.

Hiroyasu, H., Kadota, T., and Arai, M. (1983). "Development and use of a spray combustion modeling to predict Diesel engine efficiency and pollutant emissions, part 1: Combustion modeling", Bull JSME 26: 569 – 575.

Hiroyasu, T., Miki, M., Kamiura, J., Watanabe, S., and Hiroyasu, H. (2002). "Multi-objective optimization of diesel engine emissions and fuel economy using genetic algorithms and phenomenological model." SAE paper, 2002-01-2778.

Hsiang, L., and Faeth, G. M. (1992). "Near-limit drop deformation and secondary break-up", Int. J. Multi-phase Flow 18 (5): 635–652. <u>https://doi.org/10.1016/0301-9322(92)90036-G</u>.

International Organization for Standardization (ISO) (2010). "Petroleum products – Fuels (class F) – Specifications of marine fuels", Reference number ISO 8217:2010(E).

Kampolis, I.C., and Giannakoglou, K.C. (2008). "A multilevel approach to single- and multiobjective aerodynamic optimization." *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, 197, 2963-2975.

Karakasis, M., and Giannakoglou, K.C. (2006). "On the Use of Metamodel-Assisted Multi-Objective Evolutionary Algorithms." *Eng. Opt.*, 38(8), 941-957.

Klianis, L.C., Nikolos, I.K., and Sideris I.A. (2002). "Internal combustion engines (Vol. 1)", Seafarer's Library, Eugenides Foundation.

Kong, S.-C., Z. Han, and Reitz., R.D. (1995). "The development and application of a Diesel ignition and combustion model for multidimensional engine simulation", SAE Technical paper 950278.

Kontoulis, P., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2008). "Evaluation of pilot injections in a large two-stroke marine diesel engine, using CFD and T-φ mapping", 7th Int. Conf. on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA), Sapporo, Japan.

Kontoulis, P., Kaiktsis, L., von Rotz, B., and Boulouchos, K. (2019). "CFD modeling and experimental spray studies for different Heavy Fuel Oil qualities with respect to large twostroke marine engines", J. Energy Eng., publication in progress, accepted with DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000610.

Kontoulis, P., Kaiktsis, L., von Rotz, B., Schmid, A., Weisser, G., Herrmann, K., and Boulouchos, K. (2014). "CFD and experimental studies of Heavy Fuel Oil sprays for marine engine applications", Paper No ABS-288, 26th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Bremen, Germany.

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, DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000576.

Kyrtatos, N.P. (1993). "Marine diesel engines – design and operation", Symmetria.

Kyrtatos, N.P., Hellberg, L., and Poensgen, C. (2010). "HERCULES-B: The continuation of a major r&d effort torwards the next-generation marine diesel engines", Paper No. 32, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

Kyrtatos, N.P., Hellberg, L., and Poensgen, C. (2013). "Ten years after: Results from the major programme HERCULES A-B-C on marine engine R&D", In Proc., CIMAC Congress, Shanghai, China.

Kyrtatos, N.P., Kleimola, M., and Marquard, R. (2007). "The HERCULES Project: A major R&D effort for marine engines of high efficiency and low emissions", Paper No. 31, CIMAC Congress, Vienna, Austria.

Kyriakides, N., Chryssakis, C., and Kaiktsis L. (2009). "Influence of heavy fuel properties on spray atomization for marine Diesel engine applications", SAE Technical paper, 2009-01-1858.

Launder, B.E., and Spalding, D.B. (1972). "Mathematical models of turbulence", Academic Press, New York.

Lavoie, G.A., Heywood, J.B., and Keck, J.C. (1970). "Experimental and theoretical investigation of nitric oxide formation in internal combustion engines." *Comb. Sc. and Techn.*, 1, 313-326.

Liao, Z.W., Zhao, J., Creux, P., and Yang C.P. (2009). "Discussion on the structural features of asphaltene molecules", Energy & Fuels, 23, 6272-6274.

Lin, C.Y., Pan, T.C., and Chen, C.S. (1995). "A calculation method for transport properties for the predictions of combustion characteristics of marine fuel oils", J. of Marine Science and Technology, 3, 29-34.

Liu, A.B., and Reitz, R.D. (1993). "Mechanisms of air-assisted liquid atomization", Atomization and Sprays, 3: 55-75.

Malte, P.C., and Pratt, D.T. (1974). "The role of energy-releasing kinetics in NO_x formation: Fuel-lean, jet-stirred CO-air combustion." Combust. Sci. Technol., 9(5–6), 221–231.

O'Rourke, P.J., and Amsden, A. A. (1987). "The TAB method for numerical calculation of spray droplet break-up", SAE Technical paper 872089.

Pananakis, E., Kontoulis, P., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2013). "Investigation of fuel injection strategies for partially premixed compression ignition combustion in two-stroke marine diesel engines", Paper No 72, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Chania, Greece.

Pedersen, M.F, Andreasen, A., and Mayer, S. (2010). "Two-Stroke engine emission reduction technology: State-of-the-art", Paper No. 85, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

Pitzer, K.S., Lippmann, D.Z., Curl, R.F., Huggins, C.M., and Persen, D.E. (1995). "The volumetric and thermodynamic properties of fluids - II: Compressibility factor, vapor pressure and entropy of vaporization", J. of the American Chemical Society, 77, 3433-3440.

Pizza, G., Wright, Y.M., Weisser, G., and Boulouchos, K. (2007). "Evaporating and nonevaporating diesel spray simulation: comparison between the ETAB and wave break-up model", Int. Journal of Vehicle Design, 45: 80-99.

Pundir, B.P. (2007). "Engine emissions: pollutant formation and advances in control technology", Alpha Science International Limited.

Rahimi, P., and Gentzis, T. (2006). "The chemistry of bitumen and heavy oil processing", In Practical advances in petroleum processing, edited by C. S. Hsu and P. R. Robinson, 597–634. New York: Springer.

Ranz, W.E., and Marshall, W.R. (1952). "Internal combustion engine modeling", New York: Hemishere.

Riazi, M.R. (2005). "Characterization and properties of petroleum fractions", ASTM USA.

Schenk, C., Stassen, W.J.M., and Lewis, C.P.G. (1998). "Ignition quality of residual fuel oils", Vol. 2, CIMAC Congress, Copenhagen, Denmark.

Schmid, A., von Rotz, B., Bombach, R., Weisser, G., Herrmann, K., and Boulouchos, K. (2012). "Ignition behavior of marine Dieasel sprays: Investigation of marine Diesel ignition and combustion at engine-like conditions by means of OH* chemiluminescence and soot incandescence, 8th Int. Conf. on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA), Fukuoka, Japan.

Shi, Y., and Reitz, R.D. (2008). "Assessment of optimization methodologies to study the effects of bowl geometry, spray targeting and swirl ratio for a heavy-duty Diesel engine operated at high-load." SAE paper, 2008-01-0949.

Shyu, R., Chen, C.S., Goudie, G.O., and El-Wakil, M.M. (1972). "Multi-component heavy fuel oil drop histories in a high temperature flow field", Fuel, 51, 135-145.

Stamoudis, N., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2014). "A two-component heavy fuel oil evaporation model for CFD studies in marine diesel engines", Fuel 115: 145–153. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.06.035.

Stiesch, G. (2003). "Modeling engine spray and combustion proccesses", Springer, Germany.

Stratsianis, V., Kontoulis, P., and Kaiktsis, L. (2016). "Effects of fuel post injection on the performance and pollutant emissions of a large marine engine", J. Energy Eng. 142 (2): E4016001. <u>https://doi.org/10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000337</u>.

Struckmeier, D. (2010). "Combustion characteristics of marine diesel fuels", Ph.D. Thesis, Kyushu University, Japan.

Struckmeier, D., Tsuru, D., Kawauchi, S., and Tajima, H. (2009). "Multi-component modeling of evaporation, ignition and combustion processes of heavy residual fuel oil", SAE paper, 2009-01-2677.

Struckmeier, D., Tsuru, D., and Tajima, H. (2010). "New application and modeling of low ignitability fuel for marine engines", Paper No. 117, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

Takasaki, K., Tajima, H., Nakashima, M., Ishida, H., and Osafune, S. (2011). "Combustion characteristics of trouble-making bunker fuel oil", Proceedings, 620-629, CIMAC Congress, Hamburg, Germany.

Tanner, F.X. (1997). "Liquid jet atomization and droplet break-up modeling of non-evaporating diesel fuel sprays", SAE Technical paper 970050.

Tanner, F.X. (2004). "Development and validation of a cascade atomization and drop breakup model for high-velocity dense sprays", Atomization and Sprays, 14, 211-242. <u>https://doi.org/10.1615/AtomizSpr.v14.i3.20</u>.

Tanner, F.X., and Weisser, G.A. (1998). "Simulation of liquid jet atomization for fuel sprays by means of a cascade drop break-up model", SAE Technical paper 980808.

Taşkiran, Ö.O., and Ergeneman, M. (2011). "Experimental study on diesel spray characteristics and autoignition process", J. of Combustion, 528146.

Turns, S.R. (1996). "An Introduction to Combustion – Concepts and Applications", McGraw-Hill, pp. 80-87.

Twu, C.H., Coon, J.E., and Cunningham, J.R. (1994). "A generalized vapor pressure equation for heavy hydrocarbons", Fluid Phase Equilibria, 96, 19-31.

Vandersickel, A., Hartmann, M., Vogel, K., Wright, Y.M., Fikri, M., Starke, R., Schulz, C., and Boulouchos, K. 2012. The autoignition of practical fuels at HCCI conditions: High-pressure shock tube experiments and phenomenological modeling. Fuel, 93: 492-501.

Vermeire, M.B. (2007) "Everything You Need To Know About Marine Fuels", Chevron Global Marine Products, Ghent, Belgium.

von Rotz, B. (2015). "Experimental investigation of spray characteristics and ignition processes at conditions representative of large two-stroke marine diesel engine", Ph.D. Thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, Switzerland.

von Rotz, B., Herrmann, K., Weisser, G., Cattin, M., Bolla, M., and Boulouchos, K. (2011). "Impact of evaporation, swirl and fuel quality on the characteristics of sprays typical of large 2stroke marine Diesel engine combustion systems", 24th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Estoril, Portugal.

Walther, C. (1931) "The evaluation of viscosity data", Erdöl und Teer, 7, 382-384.

Wauquier, J.P. (1995). "Petroleum refining, crude oil, petroleum products, process flowsheets", Institute Francais Du Petrole (IFP).

Weisser, G. (2001). "Modelling of combustion and nitric oxide formation for medium - speed DI diesel engines: a comparative evaluation of zero- and three - dimensional approaches", Ph.D. Thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, Switzerland.

Weisser, G., Tanner, F. X., and Boulouchos, K. (1998). "Modeling of ignition and early flame development with respect to large Diesel engine simulation", SAE Technical paper 981451.

www.epri.com, Electric Power Research Institute.

www.imo.org, International Maritime Organization.

This page is intentionally left blank.



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΝΑΥΠΗΓΩΝ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΤΟΜΕΑΣ ΝΑΥΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΙΑΣ

Υπολογιστική Μελέτη και Βελτιστοποίηση Φαινομένων Ροής και Καύσης Βαρέος Ναυτιλιακού Καυσίμου σε Ναυτικούς Κινητήρες

ΕΚΤΕΝΗΣ ΠΕΡΙΛΗΨΗ ΣΤΗΝ ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΤΗΣ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ

Για τη Βαθμίδα του Διδάκτορα της Φιλοσοφίας

Παρουσιασθείσα από τον

Παναγιώτη Ι. Κοντούλη

(Διπλωματούχο Ναυπηγό Μηχανολόγο Μηχανικό Ε.Μ.Π.)

Γεννηθέντα την 7^η Δεκεμβρίου 1981 Έλληνα Πολίτη

Συμβουλευτική Επιτροπή της Διδακτορικής Διατριβής

Λ. Καϊκτσής, Καθηγητής Ε.Μ.Π. (Επιβλέπων) Ν. Κυρτάτος, Καθηγητής Ε.Μ.Π. Κ. Μπουλούχος, Καθηγητής Ομοσπονδιακού Πολυτεχνείου Ζυρίχης Κενή σελίδα

Περίληψη

Το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο (Heavy Fuel Oil - HFO) είναι το κυρίαρχο ναυτιλιακό καύσιμο. Η μελλοντική χρήση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου θα επηρεαστεί σημαντικά από τον κανονισμό που αφορά στη μέγιστη επιτρεπόμενη επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα του θείου στο καύσιμο. Αναφορικά με την ωκεανοπορεία, το ισχύον όριο είναι 3.5%, ενώ από την 1/1/2020 έχει προγραμματιστεί από τον Διεθνή Ναυτιλιακό Οργανισμό (International Maritime Organization - IMO) αυτό να μειωθεί στο 0.5%. Σήμερα, η υπολογιστική μελέτη φαινομένων ροής και καύσης σε ναυτικούς κινητήρες Diesel μπορεί να υποστηριχθεί από τη χρήση εργαλείων Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (Computational Fluid Dynamics - CFD). Η Υπολογιστική Ρευστοδυναμική συμβάλλει σημαντικά στην κατανόηση και βελτιστοποίηση των θερμορευστομηχανικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στον κύλινδρο των ναυτικών μηχανών. Επίσης, η αξιόπιστη αποτύπωση της θερμορευστομηχανικής σε εφαρμογές ναυτικών κινητήρων είναι στόχος υψηλού ενδιαφέροντος αλλά και υψηλής δυσκολίας, καθώς απαιτεί την ανάπτυξη φυσικών μοντέλων για την περιγραφή: (α) της τύρβης στην αέρια φάση, (β) της διφασικής ροής του spray καυσίμου (πρωτογενής και δευτερογενής διάσπαση, εξάτμιση), (γ) της έναυσης, και (δ) της καύσης. Η παρούσα διδακτορική διατριβή αποτελεί μια εκτενή μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής που αφορά στη μη-αντιδρώσα (non-reactive) και στην αντιδρώσα (reactive) ροή του spray του βαρέος καυσίμου σε εφαρμογές ναυτικών κινητήρων. Επίσης, περιλαμβάνει μελέτες βελτιστοποίησης του προφίλ έγχυσης του βαρέος καυσίμου μεγάλων δίχρονων ναυτικών κινητήρων Diesel. Η αξιολόγηση των αριθμητικών αποτελεσμάτων της παρούσας εργασίας βασίζεται στη σύγκριση αυτών με πειραματικά δεδομένα.

Σε αυτό το πλαίσιο, στην παρούσα διδακτορική διατριβή αναπτύχθηκε ένα νέο ολοκληρωμένο μοντέλο για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Το μοντέλο κάνει χρήση της παραδοχής μονοσυστατικού υγρού με μη προσδιορισμένη σύνθεση, απαιτεί δε ως είσοδο τέσσερις τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων οι οποίες είναι διαθέσιμες από την ανάλυση λαμβανόμενου κατά την πετρέλευση δείγματος. Με βάση τα συγκεκριμένα δεδομένα εισόδου, το αναπτυχθέν μοντέλο είναι ικανό να αναπαράγει τις θερμοφυσικές ιδιότητες οποιασδήποτε ποιότητας βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. То μοντέλο υπολογίζει τις τιμές ενός ευρέος φάσματος θερμοφυσικών ιδιοτήτων, συμπεριλαμβανόμενης της θερμοκρασιακής εξάρτησης αυτών. Περαιτέρω, για την πιστοποίηση του μοντέλου πραγματοποιήθηκαν εργαστηριακές μετρήσεις διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Εν συνεχεία, το νέο μοντέλο εφαρμόστηκε για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων επτά διαφορετικών, ευρέως χρησιμοποιούμενων, ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, όπως αυτές προδιαγράφονται από το διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010. Επίσης, η ακρίβεια του μοντέλου ελέγχθηκε με υπολογισμούς της μη αντιδρώσας και της αντιδρώσας ροής spray βαρέος καυσίμου σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου, με σύγκριση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων με αντίστοιχα πειραματικά. Στην παρούσα διατριβή, το μοντέλο spray που χρησιμοποιήθηκε στις προσομοιώσεις βασίζεται σε κατάλληλη προσαρμογή του μοντέλου CAB. Η σύγκριση των αριθμητικών αποτελέσματων που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις της μη-αντιδρώσας και της αντιδρώσας ροής σε μεγάλο θάλαμο καύσης σε σχέση με τα πειραματικά δεδομένα ήταν πολύ καλή.

Επιπροσθέτως, το νέο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων χρησιμοποιήθηκε για ενδελεχείς μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής που αφορούν στην έναυση και καύση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου και σε μεγάλο δίχρονο ναυτικό κινητήρα. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν συγκρίθηκαν με προϋπάρχοντα και νέα πειραματικά δεδομένα δύο διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Στη διατριβή αναπτύχθηκε ένα νέο μοντέλο χημικής κινητικής για τη μοντελοποίηση της έναυσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που αφορούν στην καθυστέρηση

έναυσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε μεγάλο θάλαμο καύσης είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα. Ακολούθως, καταδεικνύονται οι επιδράσεις της προθέρμανσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στην εξέλιξη της ροής του spray. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις σε μεγάλο δίχρονο ναυτικό κινητήρα είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα αναφορικά με: (α) την πίεση, (β) τη θερμοκρασία, (γ) τον ρυθμό έκλυσης θερμότητας, και (δ) τις εκπομπές των ρύπων. Το σύνολο των αριθμητικών αποτελεσμάτων όσον αφορά στη μοντελοποίηση των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου αλλά και στις εκτενείς μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής κατέδειξαν ότι η παρούσα προσέγγιση είναι κατάλληλη για προσομοιώσεις ροής και καύσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε ναυτικούς κινητήρες.

Τέλος, πραγματοποιήθηκε πολυκριτηριακή βελτιστοποίηση για τη διερεύνηση της επίδρασης της στρατηγικής έγχυσης με χρήση τριπλού παλμού του βαρέος καυσίμου (προέγχυση, κύρια έγχυση, μετέγχυση) στην ειδική κατανάλωση του καυσίμου (Specific Fuel Oil Consumption-SFOC), στα τελικά επίπεδα συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και στις εκπομπές των σωματιδίων αιθάλης (soot) σε έναν μεγάλο δίχρονο ναυτικό κινητήρα. Η διαδικασία βελτιστοποίησης πραγματοποιήθηκε με σύζευξη ενός κατάλληλα διαμορφωμένου κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, με βάση τον κώδικα KIVA-3, με έναν κώδικα βελτιστοποίησης βασισμένο σε Εξελικτικούς Αλγορίθμους (Evolutionary Algorithms - EAs). Η βελτιστοποίηση περιέλαβε βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς και βελτιστοποίηση με περιορισμούς. Τα αποτελέσματα που παρήχθησαν και από τα δύο προβλήματα της βελτιστοποίησης (πρόβλημα με περιορισμούς, πρόβλημα χωρίς περιορισμούς) κατέδειξαν σημαντική ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών των οξειδίων του αζώτου και των σωματιδίων αιθάλης σε σχέση με μια περίπτωση αναφοράς, χαρακτηριζόμενη από συνεχές προφίλ έγχυσης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Συγκεκριμένα, για την περίπτωση της βελτιστοποίησης με περιορισμούς η ταυτόχρονη μείωση των οξειδίων του αζώτου και των σωματιδίων της αιθάλης ήταν 15% και 11%, αντίστοιχα.

Η συνολική έρευνα της παρούσας διδακτορικής διατριβής συνοψίζεται ως ακολούθως:

- Δημιουργία ενός νέου μοντέλου για την παραγωγή των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Το παρόν μοντέλο δύναται να παραγάγει τις θερμοφυσικές ιδιότητες οποιασδήποτε ποιότητας βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Ο υπολογισμός των θερμοφυσικών ιδιοτήτων βασίζεται σε τέσσερις τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων, οι οποίες είναι διαθέσιμες από την ανάλυση λαμβανόμενου κατά την πετρέλευση δείγματος: (α) πυκνότητα, (β) κινηματικό ιξώδες σε δύο θερμοκρασίες, και (γ) επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα σε θείο.
- Αξιολόγηση του νέου μοντέλου πραγματοποιώντας πειραματικές μετρήσεις που αφορούν σε θερμοφυσικές ιδιότητες του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Εφαρμογή του παρόντος μοντέλου για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων που χρησιμοποιήθηκαν σε πειραματικές μετρήσεις που πραγματοποιήθηκαν από το Ομοσπονδιακό Πολυτεχνείο της Zupíχης (ETH Zürich) και τη Winterthur Gas & Diesel (πρόσφατη μετονομασία της Wärtsilä Switzerland Ltd., από τον Ιανουάριο του 2015 και εξής) σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου.
- Επέκταση της βιβλιοθήκης των καυσίμων του κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής KIVA-3, με πρόσθεση διαφόρων ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.
- Περαιτέρω ανάπτυξη του μοντέλου spray ETAB στο πλαίσιο του μοντέλου spray CAB στον κώδικα KIVA-3, ώστε να προβλέπεται ακριβέστερη εξέλιξη της διάσπασης του spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.
- Εφαρμογή του νέου μοντέλου για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου όπως αυτές προδιαγράφονται από το διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010: 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK.

- Μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής της μη-αντιδρώσας ροής του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου σε συνθήκες εξάτμισης. Η μελέτη συμπεριέλαβε και την αξιολόγηση της συμπεριφοράς του μοντέλου spray ETAB σε σχέση με τη συμπεριφορά του μοντέλου spray CAB.
- Ανάπτυξη ενός νέου μοντέλου χημικής κινητικής, λαμβάνοντας υπόψη την αρωματικότητα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Εφαρμογή του νέου μοντέλου χημικής κινητικής στον κώδικα KIVA-3 για τη μοντελοποίηση της έναυσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.
- Μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής της μη-αντιδρώσας ροής, μη-εξατμιζόμενης και εξατμιζόμενης, του spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου. Σύγκριση των αριθμητικών αποτελεσμάτων με πειραματικά δεδομένα των ομάδων του Ομοσπονδιακού Πολυτεχνείου της Zupíχης (ETH Zürich) και της Winterthur Gas & Diesel, καθώς και με δεδομένα της βιβλιογραφίας. Στη μελέτη περιλαμβάνεται και η επίδραση της προθέρμανσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στη δυναμική της ροής του spray.
- Μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής της καύσης ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου με χαμηλή και καλή ποιότητα ανάφλεξης σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου. Τα αριθμητικά αποτελέσματα συγκρίθηκαν με πειραματικά δεδομένα. Παρατηρήθηκε πολύ καλή σύγκλιση των αριθμητικών αποτελεσμάτων με τις πειραματικές μετρήσεις, όσον αφορά στον χρόνο καθυστέρησης έναυσης, καθώς και στην περιοχή της έναυσης.
- Μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής με στόχο τη δημιουργία μιας περίπτωσης αναφοράς για την καύση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε μεγάλο δίχρονο ναυτικό κινητήρα. Επιτεύχθηκε πολύ καλή σύγκλιση μεταξύ αριθμητικών αποτελεσμάτων και πειραματικών δεδομένων αναφορικά με: (α) την πίεση, (β) τον ρυθμό έκλυσης θερμότητας, και (γ) τις εκπομπές των ρύπων. Στη μελέτη συμπεριλήφθηκε η επίδραση της προθέρμανσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.
- Μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής για την καύση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου με χρήση προηγμένων τεχνικών έγχυσης του καυσίμου, στο πλαίσιο πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης με στόχο την ταυτόχρονη μείωση των ρύπων και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου.

Η παρούσα διδακτορική διατριβή αποτελείται από έντεκα κεφάλαια. Το Κεφάλαιο 1 πραγματεύεται την κατηγοριοποίηση των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων, και παρουσιάζει τα κίνητρα της παρούσας εργασίας. Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται μια λεπτομερής αναφορά στους αέριους ρύπους και στους σχετικούς κανονισμούς που έχει θεσπίσει ο Διεθνής Οργανισμός Ναυτιλίας. Η ανάπτυξη και αξιολόγηση του νέου ολοκληρωμένου μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων παρουσιάζεται στα Κεφάλαια 3 και 4, αντίστοιχα. Στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζονται πρόσφατες πειραματικές μετρήσεις, οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν για την αξιολόγηση των αριθμητικών αποτελεσμάτων της παρούσας διατριβής, καθώς και το συνολικό πλαίσιο της παρούσας μοντελοποίησης CFD, συμπεριλαμβανομένου του νέου μοντέλου έναυσης βαρέος καυσίμου. Στο Κεφάλαιο 6 παρουσιάζονται οι μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής που σχετίζονται με την μη-αντιδρώσα και την αντιδρώσα ροή βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου. Η μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής που αφορά στην καύση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε δίχρονο ναυτικό κινητήρα παρουσιάζεται στο Κεφάλαιο 7. Στο Κεφάλαιο 8 παρουσιάζεται η διαδικασία της πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης για δίχρονο ναυτικό κινητήρα ο οποίος λειτουργεί με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο, με στόχο την ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών ρύπων και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου. Η καινοτομία της παρούσας διατριβής αναλύεται στο Κεφάλαιο 9. Στο Κεφάλαιο 10 συνοψίζονται τα βασικά συμπεράσματα που προέκυψαν από την παρούσα έρευνα. Οι προτάσεις για μελλοντική έρευνα παρουσιάζονται στο Κεφάλαιο 11. Τέλος, παρατίθενται οι βιβλιογραφικές αναφορές.

Κενή σελίδα

Ευχαριστίες

Σε αυτή την παράγραφο έχω την ευκαιρία να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου προς τη γυναίκα μου, Ελένη, και τον υιό μου, Γιάννη-Μαρίνο, οι οποίοι υποστήριξαν και έδωσαν ώθηση στις προσπάθειές μου όλα αυτά τα χρόνια να ολοκληρώσω την παρούσα διδακτορική διατριβή.

Επίσης, εκφράζω τις ιδιαίτερες ευχαριστίες μου στον επιβλέποντα, Καθηγητή του Ε.Μ.Π. κ. Λ. Καϊκτσή, και στον φίλο και συνάδελφο κ. Δημήτρη Καζαγκά, για τη συνεχή υποστήριξη και πολύτιμη συνεισφορά τους.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες απευθύνονται επίσης στον Καθηγητή του Ε.Μ.Π. κ. Ν. Κυρτάτο και στον Καθηγητή του Ομοσπονδιακού Πολυτεχνείου της Ζυρίχης κ. Κ. Μπουλούχο, ως μέλη της συμβουλευτικής επιτροπής, για την υποστήριξη και τις εποικοδομητικές συζητήσεις μας. Επίσης, στα υπόλοιπα μέλης της επιτροπής εξέτασης της διατριβής, Καθηγητές του Ε.Μ.Π. κ. Δ. Καρώνη, κ. Γ. Τριανταφύλλου και κα Μ. Φούντη, και Καθηγητή του Α.Π.Θ. κ. Ζ. Σαμαρά.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Νηογνώμονα DNV-GL, για την οικονομική υποστήριξη της παρούσας διατριβής, ενώ ιδιαίτερη μνεία επιβάλλεται να γίνει για τον εκλιπόντα Ν. Μπουσούνη, ο οποίος καθιέρωσε ερευνητικά προγράμματα για την υποστήριξη διδακτορικών διατριβών. Η επιπρόσθετη χρηματική υποστήριξη από το ευρωπαϊκό ερευνητικό πρόγραμμα Marie Curie ITN ECCO-MATE (Grant No 607214) εκτιμάται ιδιαίτερα. Η αντίστοιχη υποστήριξη από την Καθηγήτρια κα Μ. Φούντη του Ε.Μ.Π. και από τον Δρ. Ρ.Τ. Doss ήταν ιδιαίτερα ουσιαστική. Ευχαριστώ επίσης, για την υποστήριξη και τη διάθεση εξοπλισμού, την ερευνητική ομάδα του European Bioenergy Research Institute (EBRI) του Πανεπιστημίου του Άστον, μέσω της ερευνητικής πρωτοβουλίας BRISK.

Η χρήσιμη συμβολή του Δρ. Β. von Rontz του Paul Scherrer Institute στο πλαίσιο των πειραματικών δεδομένων αναγνωρίζεται ιδιαίτερα, με πολλές ευχαριστίες. Οι εν λόγω πειραματικές μετρήσεις έγιναν στο πλαίσιο του Ευρωπαϊκού Ερευνητικού Προγράμματος HERCULES-C (Contract number SCP1-GA-2011-284354).

Είμαι επίσης ευγνώμων στους Καθηγητές της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Ε.Μ.Π. κα Χ. Καραγιάννη και κ. Δ. Καρώνη του Ε.Μ.Π., για την τεχνική υποστήριξη και τη διάθεση πειραματικού εξοπλισμού. Ευχαριστώ θερμά τον Καθηγητή της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών του Ε.Μ.Π. κ. Κ. Γιαννάκογλου, για τη διάθεση του λογισμικού βελτιστοποίησης EASY.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον φίλο κ. Ηλία Κυριακόπουλο, για την παροχή πρόσβασης στα δείγματα καυσίμου της εταιρείας SGS Greece.

Τέλος, θα ήθελα να εκφράσω την ευγνωμοσύνη και τις ευχαριστίες μου στους Δρ. G. Weisser, στον Καθηγητή κ. Κ. Herrmann, τον Δρ. Α. Schmid και τον Καθηγητή κ. F.X. Tanner, για την πολύτιμη υποστήριξη και συνεισφορά τους.

Κενή σελίδα

Πίνακας Περιεχομένων

Περίληψηi
Ευχαριστίεςν
Πίνακας Περιεχομένωννii
Πίνακας Υποτίτλων Εικόνωνix
Πίνακας Υποτίτλων Πινάκων
1. Βαρύ Ναυτιλιακό Καύσιμο – Κίνητρα της Παρούσας Διατριβής
2. Ρύπανση της Ατμόσφαιρας από τη Ναυτιλία
3. Μοντελοποίηση του βαρέος ναυτιλιακου καυσίμου
3.1 Επιστημονικό υπόβαθρο7
3.2 Πειραματικές μετρήσεις δύο ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου
3.3 Ανάπτυξη του μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλικού καυσίμου 11
3.3.1 Πυκνότητα, ειδικό βάρος 60F/60F και βάρος ΑΡΙ (API gravity)12
3.3.2 Κινηματικό και δυναμικό ιξώδες14
3.3.3 Κατώτερη Θερμογόνος Ικανότητα15
3.3.4 Δείκτης αρωματικότητας (CCAI)16
3.3.5 Μοριακό βάρος
3.3.6 Παράγοντας Watson και κανονικό σημείο βρασμού
3.3.7 Λόγος Άνθρακα προς Υδρογόνο19
3.3.8 Ψευδο-κρίσιμη θερμοκρασία και πίεση20
3.3.9 Ακεντρικός παράγοντας (acentric factor) και τάση ατμών
3.3.10 Λανθάνουσα θερμότητα23
3.3.11 Επιφανειακή τάση25
3.3.12 Συντελεστής διάχυσης (καυσίμου στον αέρα)
3.3.13 Ενθαλπία (αισθητή)
3.3.14 Ενθαλπία σχηματισμού
 Αξιολόγηση του νέου μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων για τα ναυτιλιακά καύσιμα του διεθνούς προτύπου ISO 8217:2010
5. Πειραματικές μετρήσεις βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου και Υπολογιστική Ρευστοδυναμική 33
5.1 Πειραματικές μετρήσεις βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου
5.2 Μοντελοποίηση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής
5.2.1 Κώδικας Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής ΚΙVΑ-3
5.2.2 Υπολογιστικό πλέγμα μεγάλου θαλάμου καύσης σταθερού όγκου (SCC) 36
5.3 Περιπτώσεις που εξετάστηκαν
5.4 Θερμοφυσικές ιδιότητες του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου
5.5 Μοντελοποίηση επιμέρους διεργασιών41
 Μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου

 Μελέτη της καύσης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε δίχρονο ναυτικό κινητήρα με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής45
 Εφαρμογή προηγμένων στρατηγικών έγχυσης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε δίχρονο ναυτικό κινητήρα
8.1 Θερμοφυσικές ιδιοτήτες59
8.2 Παραμετροποίηση του προφίλ έγχυσης61
8.3 Διαμόρφωση προβλημάτων βελτιστοποίησης63
8.3.1 Μεταβλητές σχεδίασης64
8.3.2 Αντικειμενικές συναρτήσεις64
8.3.3 Περιορισμοί
8.4 Αποτελέσματα βελτιστοποίησης66
8.4.1 Βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς66
8.4.2 Βελτιστοποίηση με περιορισμούς68
9. Καινοτομία και προσφορά στην επιστημονική έρευνα
9.1 Προτεινόμενη μεθοδολογία71
9.2 Καινοτομία της παρούσας διατριβής72
9.3 Δημοσιεύσεις σε Επιστημονικά Περιοδικά73
9.4 Δημοσιεύσεις σε Επιστημονικά Συνέδρια74
10. Συμπεράσματα
11. Προτάσεις για μελλοντική έρευνα
Βιβλιογραφία

Πίνακας Υποτίτλων Εικόνων

Εικόνα 1. Όρια εκπομπής οξειδίων του αζώτου (NO_x) ναυτικών κινητήρων συναρτήσει της μέγιστης ταχύτητας υπηρεσίας (<u>www.imo.org</u>).

Εικόνα 2. Μέγιστη επιτρεπόμενη επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα θείου στα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα συναρτήσει της ημερομηνίας επιβολής των κανονισμών (<u>www.imo.org</u>).

Εικόνα 3. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές της πυκνότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Εικόνα 4. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές της πυκνότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Εικόνα 5. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές του δυναμικού ιξώδους συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Εικόνα 6. Παράγοντας Watson συναρτήσει του βάρους ΑΡΙ και του μοριακού βάρους (ΑΡΙ 1997).

Εικόνα 7. Υπολογισθείσα τάση ατμών συναρτήσει της θερμοκρασίας (περιλαμβάνονται και οι τιμές στο ψευδο-κρίσιμο σημείο) για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Εικόνα 8. Υπολογισθείσα λανθάνουσα θερμότητα συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Εικόνα 9. Υπολογισθείσα επιφανειακή τάση συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b, #2 και του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀). Πειραματικές μετρήσεις για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b, #2 (παρούσα εργασία). Έχουν περιληφθεί και μετρήσεις της βιβλιογραφίας, για διάφορες ποιότητες βαρέος, καθώς και για μία ποιότητα ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (Fink et al. 2008).

Εικόνα 10. Υπολογισθείσες καμπύλες του συντελεστή διάχυσης μάζας εξατμισθέντος καυσίμου σε περιβάλλον αέρα συναρτήσει της θερμοκρασίας, σε πίεση 1 atm, για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Εικόνα 11. Υπολογισθείσα ενθαλπία (αισθητή) συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Έχει περιληφθεί και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C14H30) (API 1997).

Εικόνα 12. Σχηματική απεικόνιση του μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων που αναπτύχθηκε στην παρούσα διατριβή. Στο σχήμα αποτυπώνονται τα απαιτούμενα δεδομένα εισόδου και οι αξιολογημένες σχέσεις που εμπεριέχονται στο μοντέλο.

Εικόνα 13. Διάταξη μεγάλου θαλάμου καύσης σταθερού όγκου που αναπτύχθηκε στο πλαίσιο του ευρωπαϊκού ερευνητικού προγράμματος HERCULES από το Ομοσπονδιακό Πολυτεχνείο της Ζυρίχης και τη Winterthur Gas & Diesel (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

Εικόνα 14. Σχηματική αναπαράσταση της διάταξης του μεγάλου θαλάμου καύσης σταθερού όγκου (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

Εικόνα 15. Μεγάλος θάλαμος καύσης σταθερού όγκου (SCC) και αναγεννητής θερμότητας (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

Εικόνα 16. Πρόοψη και κάτοψη του πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε στις προσομοιώσεις της ροής spray στον μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου.

Εικόνα 17. Σκίτσο ενός υπολογιστικού κελιού στην ενεργή περιοχή του spray.

Εικόνα 18. Περίπτωση 1 (Case 1) (πυκνότητα αερίου ίση με 33.7 kg/m³, χρήση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a): υπολογισθέν μήκος διείσδυσης συναρτήσει του χρόνου για τρία διαφορετικά υπολογιστικά πλέγματα, με χρήση του μοντέλου CAB. Η τιμή του χρονικού βήματος είναι 10⁻⁵ s. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη πειραματική καμπύλη (von Rotz et al. 2011).

Εικόνα 19. Συνολική εγχυόμενη μάζα (αριστερός y-άξονας) και αρχή της έγχυσης (SOI) (δεξιός y-άξονας) συναρτήσει της κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας (LHV) για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a, #3 και το ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο (MDO), για προσομοιώσεις δίχρονου ναυτικού κινητήρα σε πλήρες φορτίο.

Εικόνα 20. Υπολογισθέντα προφίλ έγχυσης για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a και #3. Έχει περιληφθεί και το πειραματικό προφίλ έγχυσης του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (MDO).

Εικόνα 21. Υπολογισθείσες πιέσεις εντός του κυλίνδρου συναρτήσει της γωνίας στροφάλου για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a, #3 και το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀). Έχει περιληφθεί και η αντίστοιχη πειραματική καμπύλη για το ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο (MDO) (Stratsianis et al. 2016).

Εικόνα 22. Υπολογισθέντες ρυθμοί έκλυσης θερμότητας για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a, #3 και το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀) συναρτήσει της γωνίας στροφάλου. Έχουν περιληφθεί και οι αντίστοιχες πειραματικές καμπύλες ελαφρού και βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου (Stratsianis et al. 2016, de Hoog et al. 2010).

Εικόνα 23. Υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες της πίεσης συναρτήσει της γωνίας στροφάλου του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, για τρεις τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης του βαρέος καυσίμου.

Εικόνα 24. Υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες του ρυθμού έκλυσης θερμότητας συναρτήσει της γωνίας στροφάλου του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, για τρείς τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης του βαρέος καυσίμου.

Εικόνα 25. Υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες μέσων χωρικών συγκεντρώσεων των οξειδίων του αζώτου (NO_x) για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμό #1a, για δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Έχουν περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀), καθώς και η πειραματική τιμή της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) για χρήση ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου.

Εικόνα 26. Υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες της συνολικής μάζας των σωματιδίων αιθάλης για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a, για δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀).

Εικόνα 27. Ισοϋψείς καμπύλες θερμοκρασίας και λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα για το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀), και το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a σε δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Για την οπτικοποίηση θεωρήθηκε ένα οριζόντιο επίπεδο κοντά στο ύψος των εγχυτήρων σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές.

Εικόνα 28. Ισοϋψείς καμπύλες του μοριακού κλάσματος των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και της πυκνότητας των σωματιδίων αιθάλης, για το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀), και το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a σε δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Για την οπτικοποίηση θεωρήθηκε ένα οριζόντιο επίπεδο κοντά στο ύψος των εγχυτήρων σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές.

Εικόνα 29. Χάρτες θερμοκρασίας - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου αέρα (Τ-φ maps) για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a σε δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης και για το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀). Έχουν περιληφθεί οι τιμές της θερμοκρασίας και του λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα για όλα τα υπολογιστικά κελιά σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές.

Εικόνα 30. Μορφή Γραφικού Περιβάλλοντος (Graphical User Interface-GUI) του παρόντος μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που δημοσιεύτηκε στην εργασία των Kontoulis et al. (2018): Μετρηθείσες και υπολογισθείσες τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #4, που χρησιμοποιήθηκε σε δοκιμές επί θαλάσσης (sea trials) του ναυτικού κινητήρα (RT-58T-B). Έχουν περιληφθεί οι αντίστοιχες θερμοφυσικές ιδιότητες του δεκατετρανίου (C14H₃₀) (API 1997).

Εικόνα 31. Υπολογισθέν συνεχές προφίλ έγχυσης της περίπτωσης αναφοράς για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #4, και πειραματικό προφίλ έγχυσης ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (MDO).

Εικόνα 32. Σχηματική αναπαράσταση του προφίλ έγχυσης τριπλού παλμού με προ-, κύριακαι μετ-έγχυση. Οι πέντε μεταβλητές σχεδίασης: (1) Αρχή της προέγχυσης (2) Κλάσμα μάζας της προέγχυσης, (3) Χρόνος μεσολάβησης από την προέγχυση, (4) Χρόνος μεσολάβησης από την κύρια έγχυση, και (5) Κλάσμα μάζας της μετέγχυσης (SOPil, PiMF, PiDwell, PoDwell, PoMF) υποδεικνύονται με βέλη.

Εικόνα 33. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς.

Εικόνα 34. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης σωματιδίων αιθάλης και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς.

Εικόνα 35. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης, για το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς.

Εικόνα 36. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς και με περιορισμούς.

Εικόνα 37. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης των σωματιδίων αιθάλης και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς και με περιορισμούς.

Εικόνα 38. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης, για τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς και με περιορισμούς.

Εικόνα 39. Γραφικό περιβάλλον του μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που δημοσιεύτηκε στην εργασία των Kontoulis et al. (2018).

Πίνακας Υποτίτλων Πινάκων

Πίνακας 1. Προδιαγραφές βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων σύμφωνα με το διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010 (International Organization for Standardization 2010).

Πίνακας 2. Σημειογραφία σχετικά με τα δείγματα βαρέος ναυτιλικού καυσίμου που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα διδακτορική διατριβή.

Πίνακας 3. Σύνθεση των δειγμάτων των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1b και #2 με βάση τις παρούσες πειραματικές μετρήσεις. Συμπεριλαμβάνονται αντίστοιχες τιμές για το δείγμα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, που δημοσιεύτηκαν στην εργασία των von Rotz et al. (2011).

Πίνακας 4. Παρούσες πειραματικές μετρήσεις των δειγμάτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1b και #2, όσον αφορά στην ολική οξύτητα, στον δείκτη διάβρωσης, στην κατώτερη και ανώτερη Θερμογόνο Ικανότητα και σε αντιπροσωπευτικές θερμοφυσικές ιδιότητες. Συμπεριλαμβάνονται αντίστοιχες τιμές του δείγματος του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, που δημοσιεύτηκαν στην εργασία των von Rotz et al. (2011).

Πίνακας 5. Πειραματικές μετρήσεις των θερμοφυσικών ιδιοτήτων των δειγμάτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a (δημοσιεύτηκαν στην εργασία των von Rotz et al. (2011)), #1b και #2. Οι τιμές αποτελούν τα δεδομένα εισόδου που απαιτούνται για το αναπτυχθέν μοντέλο. Στον Πίνακα περιλαμβάνονται αντίστοιχες τιμές του δεκατετρανίου (C14H30), για λόγους σύγκρισης (API 1997).

Πίνακας 6. Ειδικό βάρος 60F/60F και βάρος API των δειγμάτων των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C14H30) (API 1997).

Πίνακας 7. Πειραματικές μετρήσεις της ανώτερης και κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας (ASTM D240 2017b) και υπολογισθείσες τιμές, των δειγμάτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η τιμή της κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 8. Αντιστοιχία μεταξύ του δείκτη αρωματικότητας και της ποιότητας έναυσης (Klianis et al. 2002).

Πίνακας 9. Υπολογισθείσες τιμές του δείκτη αρωματικότητας για τα δείγματα των ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2.

Πίνακας 10. Υπολογισθείσες τιμές του μοριακού βάρους των δειγματων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C14H30) (API 1997).

Πίνακας 11. Υπολογισθείσες τιμές του παράγοντα Watson και του κανονικού σημείου βρασμού για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνονται και οι αντίστοιχες τιμές του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 12. Υπολογισθείσες τιμές του ατομικού λόγου Άνθρακα προς Υδρογόνο για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 13. Υπολογισθείσες τιμές της ψευδο-κρίσιμης θερμοκρασίας και πίεσης για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 14. Υπολογισθείσες τιμές του ακεντρικού παράγοντα για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 15. Υπολογισθείσα ειδική θερμοχωρητικότητα για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2, στους 298.15 Κ. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 16. Υπολογισθείσα ενθαλπία σχηματισμού στους 298.15 Κ για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του (C14H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 17. Χαρακτηριστικά των υπολογιστικών πλεγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν.

Πίνακας 18. Υπολογισθείσες περιπτώσεις μη-αντιδρώσας ροής.

Πίνακας 19. Υπολογισθείσες περιπτώσεις αντιδρώσας ροής.

Πίνακας 20. Χαρακτηριστικά έγχυσης, αρχική θερμοκρασία και θερμοκρασία τοιχώματος του μεγάλου θαλάμου καύσης σταθερού όγκου.

Πίνακας 21. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων, με χρήση του αναπτυχθέντος νέου μοντέλου, για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a και #3. Περιλαμβάνονται και οι αντίστοιχες τιμές του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 22. Χαρακτηριστικά του κινητήρα.

Πίνακας 23. Παράμετροι λειτουργίας του κινητήρα και χαρακτηριστικά έγχυσης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #3, και του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου MDO.

Πίνακας 24. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές, με χρήση του παρόντος μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος καυσίμου (Kontoulis et al. 2018), του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #4, το οποίο χρησιμοποιήθηκε σε δοκιμές επί θαλάσσης (sea trials) του ναυτικού κινητήρα (RT-58T-B). Περιλαμβάνονται οι αντίστοιχες τιμές των ιδιοτήτων του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 25. Χαρακτηριστικά λειτουργίας του ναυτικού κινητήρα και χαρακτηριστικά έγχυσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #4 για μια περίπτωση αναφοράς με συνεχές προφίλ έγχυσης.

Πίνακας 26. Βασικά χαρακτηριστικά της διαδικασίας βελτιστοποίησης με Εξελικτικούς Αλγορίθμους.

Πίνακας 27. Χαρακτηριστικά δυαδικής κωδικοποίησής των μεταβλητών σχεδίασης. Περιλαμβάνεται και η ακρίβεια των μεταβλητών σχεδίασης.
Κενή σελίδα

Βαρύ Ναυτιλιακό Καύσιμο – Κίνητρα της Παρούσας Διατριβής

Το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο (Marine Heavy Fuel Oil - HFO) παράγεται από την ανάμιξη υπολείμματος πετρελαίου που έχει προκύψει από ιξωδόλυση με ελαφρά προϊόντα πετρελαίου και την προσθήκη ειδικών πρόσθετων, στο διυλιστήριο, με κατάλληλες διεργασίες θέρμανσης. Το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο είναι ευρέως γνωστό με την ονομασία ενδιάμεσο ναυτιλιακό καύσιμο (Intermediate Fuel Oil - IFO). Το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο χαρακτηρίζεται από υψηλό μοριακό βάρος, καθώς και από υψηλές τιμές της πυκνότητας και του κινηματικού ιξώδους σε θερμοκρασία περιβάλλοντος (Vermeire 2007). Το κύριο συστατικό του βαρέος ναυτιλιακού πετρελαίου, το υπόλειμμα που έχει προκύψει από την ιξωδόλυση, αποτελείται από περίπλοκες δομές υδρογονανθράκων (ασφαλτένια και ρητίνες), θείο (S) και μέταλλα, όπως το νάτριο (Na) και το βανάδιο (V). Λόγω μειωμένων αποθηκευτικών χώρων, τα διυλιστήρια προσφέρουν μια περιορισμένη ποσότητα ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, που συνήθως παίρνει το όνομά της από την τιμή του κινηματικού ιξώδους στη θερμοκρασία των 323.15 K (50 °C). Για παράδειγμα, το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο 380 (HFO 380) έχει κινηματικό ιξώδες 380 mm²/s (cSt) στους 50 °C (Ancheyta 2013).

Τα πλοία, που ως επί το πλείστον χρησιμοποιούν μηχανές εσωτερικής καύσης ως κύριο μέσο πρόωσης, χρησιμοποιούν ως καύσιμο το βαρύ ναυτιλιακό πετρέλαιο. Τα πλεονεκτήματα από τη χρήση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε δίχρονες και τετράχρονες ναυτικές μηχανές είναι το πολύ χαμηλό κόστος του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, καθώς και η μικρή φθορά που αυτό επιφέρει στις μηχανές. Το τελευταίο οφείλεται στην υψηλή αλκαλικότητα των κυλινδρελαίων, που εξουδετερώνουν τα οξέα που δημιουργούνται από την καύση των βαρέων ναυτιλιακών πετρελαίων που έχουν υψηλή περιεκτικότητα σε θείο. Σημειώνεται ότι οι κινητήρες διπλού καυσίμου, οι οποίοι έχουν διεισδύσει πρόσφατα στη ναυτιλία, είναι ικανοί να λειτουργήσουν με χρήση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στο πλαίσιο της ευελιξίας που διαθέτουν όσον αφορά στη χρήση του καυσίμου λειτουργίας τους. Η μελλοντική χρήση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στη ναυτιλία θα επηρεαστεί από τη νομοθεσία που υπαγορεύει την επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα του θείου στο βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Οι υπάρχουσες προδιαγραφές για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο περιλαμβάνονται στο διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010, σηματοδοτώντας τις εξελίξεις στην τεχνολογία των ναυτικών κινητήρων, στις διεργασίες διύλισης αργού πετρελαίου, καθώς και στους κανονισμούς για τις εκπομπές ρύπων.

Μολονότι η ποιότητα των διαθέσιμων βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων συνεχώς φθίνει, οφείλει να διατηρηθεί η υψηλή απόδοση των ναυτικών μηχανών, σε συνδυασμό με τη μείωση των εκπομπών ρύπων. Η καύση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου είναι το αντικείμενο λεπτομερούς μελέτης στο πλαίσιο εργαστηριακών μετρήσεων και της ανάπτυξης μοντέλων που να περιγράφουν επαρκώς τα θερμοχημικά φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κατά τη λειτουργία των ναυτικών κινητήρων με χρήση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Εν προκειμένω, η Υπολογιστική Ρευστοδυναμική είναι μείζονος σημασίας για τη μελέτη και βελτιστοποίηση της καύσης των ναυτικών κινητήρων. Για τον λόγο αυτόν, η αξιόπιστη παραγωγή των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου κρίνεται απαραίτητη για αξιόπιστες μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής. Οι βασικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στο κύλινδρο ενός ναυτικού κινητήρα είναι η διάσπαση και εξάτμιση του spray, η ανάμιξη του καυσίμου με το οξειδωτικό μέσο (δηλαδή τον αέρα), η έναυση και η καύση. Στις μελέτες της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής η απόδοση των φυσικών μοντέλων εξαρτάται ουσιωδώς από την ακρίβεια των τιμών των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του καυσίμου που χρησιμοποιούνται στο πλαίσιο των προσομοιώσεων. Οι θερμοφυσικές ιδιότητες περιλαμβάνουν:

- 1. Πυκνότητα
- 2. Συντελεστή διάχυση (καύσιμου στον αέρα)
- 3. Δυναμικό ιξώδες
- 4. Αισθητή ενθαλπία (sensible)
- 5. Ενθαλπία σχηματισμού
- 6. Λανθάνουσα θερμότητα
- 7. Μοριακό βάρος
- 8. Επιφανειακή τάση
- 9. Πίεση εξάτμισης

Η περίπλοκη χημική σύνθεση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου είναι εξαιρετικά δύσκολο να προσδιοριστεί, και είδικότερα το απόσταγμα (υπόλειμμα) που προκύπτει από την ιξωδόλυση, καθώς περιέχει περίπλοκες ενώσεις που είναι γνωστές και ως ασφαλτένια. Οι θερμοφυσικές ιδιότητες των ασφαλτενίων είναι πολύ δύσκολο να προσδιοριστούν σε ένα πρώτο επίπεδο και να υπολογιστούν σε ένα δεύτερο. Μια λεπτομερής περιγραφή της σύνθεσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου είναι δύσκολα εφικτή, καθώς το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο περιλαμβάνει ένα ευρύ φάσμα μοριακών βαρών και ανομοιόμορφες δομές (Rahimi and Gentzis 2006). Αναπόφευκτα, η μοντελοποίηση της σύνθεσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου από ένα συγκεκριμένο πλήθος υδρογονανθράκων αποτελεί μόνο μια προσέγγιση του πραγματικού καυσίμου.

Στο αγγλικό κείμενο γίνεται εκτενής αναφορά σε θέματα που αφορούν στο αργό πετρέλαιο, στην επίδραση της κλασματικής απόσταξης, στην ποιότητα των ναυτιλιακών καυσίμων, σε συνήθεις ποιότητες βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων που χρησιμοποιούνται σε ναυτικούς κινητήρες, σε σημαντικές ιδιότητες και χαρακτηριστικά των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων, καθώς και στην απαιτούμενη επεξεργασία του βαρέος καυσίμου επί πλοίου, πριν τη χρήση του στους ναυτικούς κινητήρες.

Σε σχέση με τις προδιαγραφές, κατηγοριοποίηση και ονοματολογία των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων, σημειώνουμε τα ακόλουθα. Στο παρελθόν, ο Οργανισμός Προτύπων Βρετανίας (British Standards Organization BS MA 100) και το Διεθνές συμβούλιο Κινητήρων και Καύσης (Conseil International de Machines à Combustion - CIMAC) δημοσίευσαν συγκεκριμένες προδιαγραφές όσον αφορά στις ιδιότητες των ναυτιλιακών καυσίμων. Στις μέρες μας, η προτυποποίηση και οι προδιαγραφές των ναυτιλιακών καυσίμων καθορίζονται από το διεθνές πρότυπο ISO, με στόχο την εξασφάλιση της τελικής ποιότητας του μίγματος που προκύπτει από το διυλιστήριο. Οι προδιαγραφές του ISO συνεχώς επικαιροποιούνται, προκειμένου να περιλαμβάνουν τις αλλαγές που λαμβάνουν χώρα στην τεχνολογία των ναυτικών κινητήρων, την επεξεργασία του πετρελαίου στο διυλιστήριο, καθώς και τους κανονισμούς που αφορούν στη μείωση των ρύπων. Συγκεκριμένα, οι προδιαγραφές του διεθνούς προτύπου ISO 8217:2010 προσδιορίζουν τις προδιαγραφές των καυσίμων που χρησιμοποιούνται στους ναυτικούς κινητήρες και τους λέβητες, με στόχο την καθοδήγηση των σχεδιαστών των ναυτικών εξαρτημάτων, των προμηθευτών του πετρελαίου και των μηχανικών των πλοίων. Ο Πίνακας 1 παρουσιάζει τις προδιαγραφές του διεθνούς προτύπου ISO 8217:2010 για τα βαρέα γαυτιλιακά καύσιμα.

Πρόσφατα, δημοσιεύτηκαν νέες προδιαγραφές στο διεθνές πρότυπο ISO 8217:2017, εισάγοντας σημαντικές αλλαγές στα ελαφρά ναυτιλιακά, συγκεκριμένα, επιτρέποντας τη χρήση καυσίμων βιο-diesel, με την αντίστοιχη μείωση στην επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα του θείου. Αναφορικά με το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο, οι προδιαγραφές του διεθνές προτύπου ISO 8217:2010 παρέμειναν και στο διεθνές πρότυπο ISO 8217:2017, με εξαίρεση την περιεκτικότητα του Χρησιμοποιημένου Λαδιού Λίπανσης (Used Lubricating Oil (ULO).)

Η παρούσα διδακτορική διατριβή έχει ως έναν κύριο στόχο τη δημιουργία ενός ολοκληρωμένου μοντέλου για την παραγωγή των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακου καυσίμου για χρήση σε μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής σε ναυτικούς κινητήρες. Για την ανάπτυξη του μοντέλου χρησιμοποιήθηκαν διαφορετικές πειραματικές και θεωρητικές μελέτες που αφορούν στα βαριά αποστάγματα του πετρελαίου. Επίσης, για την ανάπτυξη του συγκεκριμένου μοντέλου χρησιμοποιήθηκε η παραδοχή ότι το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο είναι ένα μονοσυστατικό βαρύ απόσταγμα πετρελαίου μη προσδιορισμένης σύνθεσης. Έτσι, το μοντέλο υιοθετεί μια ευρέως διαδεδομένη πρακτική στο πλαίσιο της χρήσης Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής για την προσομοίωση της καύσης ελαφρών αποσταγμάτων πετρελαίου (για παράδειγμα, προσσέγγιση των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του ελαφρού ναυτιλιακού κασίμου (Marine Diesel Oil - MDO) με εκείνες του δεκατετρανίου (C14H30) (Andreadis et al. 2011)). Ως εκ τούτου, η ποσοτικοποίηση της αναλογίας των διαφορετικών υδρογονθράκων που περιέχονται στο καύσιμο δεν είναι απαραίτητη για τη δημιουργία του συγκεκριμένου μοντέλου. Το αναπτυχθέν μοντέλο απαιτεί ως είσοδο τέσσερις τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων, διαθέσιμες κατά την πετρέλευση, και επιστρέφει ως έξοδο πρόσθετες θερμοφυσικές ιδιότητες του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, απαραίτητες για τη χρήση σε κώδικες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, συμπεριλαμβανόμενης της θερμοκρασιακής εξάρτησης.

Κύριοι στόχοι της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι: (α) η ανάπτυξη και αξιολόγηση ενός μοντέλου για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, (β) η κατάλληλη προσαρμογή του μοντέλου spray CAB για προσομοιώσεις βαρέος ναυτιλιακου καυσίμου, (γ) η δημιουργία κατάλληλου μοντέλου έναυσης, το οποίο να λαμβάνει η υπόψη την αρωματικότητα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, (δ) η κατανόηση και αποτύπωση των φαινομένων της μη-αντιδρώσα και αντιδρώσας ροής του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε συνθήκες αντιπροσωπευτικές της λειτουργίας των ναυτικών μηχανών, και (ε) η διερεύνηση της επίδρασης προηγμένων μεθόδων έγχυσης καυσίμου στην απόδοση των ναυτικών κινητήρων, στο πλαίσιο πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης με στόχο την ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση των εκπομπών ρύπων και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου.

Χαρ	οακτηριστικά	ιριστικά Μονάδες Όριο ISO 8217:2010 προδιαγραφές βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου													
				RMA	RMB	RMD	RME		RM	IG		RMK		Μέθοδος	
				IFO 10	IFO 30	IFO 80	IFO 180	IFO 180	IFO 380	IFO 500	IFO 700	IFO 380	IFO 500	IFO 700	
Κινηματι 50°C	ικό ιξώδες στους	mm²/s (cSt)	μέγ.	10	30	80	180	180	380	500	700	380	500	700	ISO 3104
Πυκνότη	τα στους 15°C	kg/m³	μέγ.	920	960	975	991		99	1			1010		ISO 3675
Δείκτης (CCAI)	Αρωματικότητας	-	μέγ.	850	860	860	860	870		870			Υπολογισθέν		
Θείο		% (m/m)	μέγ.					Νομα	θετημένες	απαιτήσε	Ξς				ISO 8754
Σημείο α	ανάφλεξης	°C	ελάχ.	60	60	60	60		6)			60		ISO2719
Υδρόθει	0	mg/kg	μέγ.	2	2	2	2	2 2				-			
Ολική οδ	ξύτητα	mg KOH/g	μέγ.	2.5	2.5	2.5	2.5	2.5		2.5			-		
Ολικό ίζι	ημα, γήρανση	% (m/m)	μέγ.	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1 0.1				ISO 10307-2			
Ανθρακα μίκρο	ούχο υπόλειμμα,	% (m/m)	μέγ.	2.5	10	14	15		18	3		20			ISO 10370
Σημείο	Χειμώνας	°C	μέγ.	0	0	30	30		30	C			30		ISO 3016
ροής	Καλοκαίρι	°C	μέγ.	6	6	30	30	30 30			ISO 3016				
Νερό		% (v/v)	μέγ.	0.3	0.5	0.5	0.5		0.	0.5 0.5			ISO 3733		
Τέφρα		% (m/m)	μέγ.	0.04	0.07	0.07	0.07		0.	1			0.15		ISO 6245
Βανάδιο)	mg/kg	μέγ.	50	150	150	150		350			450		ISO 14597	
Νάτριο		mg/kg	μέγ.	50	100	100	50	100		100			100		-
Αλουμίν	ιο + Πυρίτιο	mg/kg	μέγ.	25	40	40	50	60			60		ISO 10478		
Χρησιμα Λίπανσr	Χρησιμοποιημένο Λάδι Λίπανσης (ULO) μέγ. Το καύσιμο δεν πρέπει να περιέχει ULO							-							

Πίνακας 1. Προδιαγραφές βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων σύμφωνα με το διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010 (International Organization for Standardization 2010).

2. Ρύπανση της Ατμόσφαιρας από τη Ναυτιλία

Ο Διεθνής Ναυτιλιακός Οργανισμός (International Maritime Organization-IMO) είναι ο φορέας των Ηνωμένων Εθνών, ο οποίος έχει την ευθύνη για την ασφάλεια των πλοίων και την πρόληψη της ρύπανσης από τα πλοία.

Οι κανονισμοί του ΙΜΟ περιέχονται στη «Διεθνή Σύμβαση για την Πρόληψη της Ρύπανσης από τα Πλοία», γνωστή και ως "MARPOL 73/78". Στις 27 Σεπτεμβρίου 1997 η σύμβαση της MARPOL τροποποιήθηκε από το «Πρωτόκολλο του 1997», το οποίο περιλαμβάνει το Παράρτημα VI (Annex VI), με τίτλο «Κανονισμοί για την πρόληψη των Αέριων Ρύπων από τα πλοία». Το Παράρτημα VI της MARPOL θέτει όρια για τους ρύπους που αφορούν στα οξείδια του αζώτου (NO_x) και του θείου (SO_x), καθώς απαγορεύει τις εκπομπές ουσιών που συνεισφέρουν στη μείωση του πάχους του στρώματος του όζοντος.

Οι κανονισμοί που αφορούν στα οξείδια του αζώτου αναφέρονται και ως όρια Tier I, II, III. Το Tier I καθορίστηκε το 1997 στο Παράρτημα VI της MARPOL, ενώ τα όρια Tier II και Tier III εισήχθησαν στο Παράρτημα VI το 2008 (<u>www.imo.org</u>).

Τα όρια της εκπομπής NO_x για τις μηχανές Diesel εξαρτώνται από τη μέγιστη ταχύτητα υπηρεσίας. Τα όρια Tier I, II, III απεικονίζονται στην Εικόνα 1. Τα όρια Tier I και Tier II αφορούν στην ωκεανοπορεία, ενώ το όριο Tier III αφορά μόνο στις Περιοχές Ελέγχου Εκπομπών Ρύπων (Emission Control Areas - ECAs¹).



Εικόνα 1. Όρια εκπομπής οξειδίων του αζώτου (NOx) ναυτικών κινητήρων συναρτήσει της μέγιστης ταχύτητας υπηρεσίας (<u>www.imo.org</u>).

Οι κανονισμοί του Παραρτήματος VI της MARPOL περιλαμβάνουν ανώτατα όρια για την επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα του θείου στο καύσιμο, με σκοπό τον έλεγχο των εκπομπών των οξειδίων του θείου. Τα όρια όσον αφορά στην κατά βάρος περιεκτικότητα του θείου και οι αντίστοιχες ημερομηνίες εφαρμογής τους απεικονίζονται στην Εικόνα 2.

¹Υφιστάμενες Περιοχές Ελέγχου Εκπομπών Ρύπων (ECAs): Βαλτική Θάλασσα, Βόρεια Θάλασσα, Περιοχή της Βόρειας Αμερικής (περιλαμβάνει τη Βόρεια Αμερική και τον Καναδά), Περιοχή Ελέγχου της Καραϊβικής (περιλαμβάνει το Πουέρτο Ρίκο και τις Παρθένους νήσους), Κίνα (εσωτερικό εμπόριο).



Εικόνα 2. Μέγιστη επιτρεπόμενη επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα θείου στα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα συναρτήσει της ημερομηνίας επιβολής των κανονισμών (<u>www.imo.org</u>).

3. Μοντελοποίηση του βαρέος ναυτιλιακου καυσίμου

3.1 Επιστημονικό υπόβαθρο

Αρκετές ερευνητικές προσπάθειες έχουν γίνει για τη διερεύνηση των ιδιοτήτων και της καύσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Στην εργασία των Lin et al. (1995) αναπτύχθηκε μια μεθοδολογία για τον υπολογισμό σταθερών (ανεξάρτητων της θερμοκρασίας) τιμών των ιδιοτήτων του ναυτιλιακού καυσίμου. Οι ιδιότητες αυτές εφαρμόστηκαν σε ένα μοντέλο καύσης διπλού φίλμ για μια σταγόνα υγρού καυσίμου. Στην εργασία των Fink et al. (2008) πραγματοποιήθηκαν πειραματικές μετρήσεις με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο σε θάλαμο καύσης σταθερού όγκου σε συνθήκες παρόμοιες με εκείνες που επικρατούν κατά τη λειτουργία μεσόστροφων ναυτικών κινητήρων. Επίσης, στην ίδια εργασία πραγματοποιήθηκαν πειραματικές μετρήσεις του κινηματικού ιξώδους και της επιφανειακής τάσης συναρτήσει της θερμοκρασίας για διάφορες ποιότητες βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Οι μετρήσεις αυτές συγκρίθηκαν με αντίστοιχες τιμές για ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο (MDO). Στην εργασία των Kyriakides et al. (2009) προτάθηκε ένα μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων για υπόλειμμα βαρέος πετρελαίου χρησιμοποιώντας δεδομένα από ένα διυλιστήριο και δεδομένα από τη βιβλιογραφία. Οι ιδιότητες του υπολείμματος πετρελαίου χρησιμοποιήθηκαν στη μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής των Chryssakis et al. (2010) για θαλάμους καύσης σταθερού όγκου, και τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων συγκρίθηκαν με πειραματικές μετρήσεις που δημοσιεύονται στις εργασίεςτων Struckmeier et al. (2009) και Struckmeier (2010). Οι Υπολογιστικές μελέτες των Goldsworthy (2006), Struckmeier et al. (2009, 2010) και Stamoudis et al. (2014) χρησιμοποίησαν την παραδοχή των δύο συστατικών, με τα δύο συστατικά να αντιπροσωπεύουν το υπόλειμμα (βαρύ) και το ελαφρύ στοιχείο του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου αντίστοιχα. Τα δύο συστατικά (δηλαδή, βαρύ και ελαφρύ) προσδιορίζονται από διαφορετικές καμπύλες πίεσης εξάτμισης, και σταθερές ή θερμοκρασιακά εξαρτώμενες τιμές του κινηματικού ιξώδους, της πυκνότητας, λανθάνουσας θερμότητας, ειδικής θερμοχωρητικότητας και επιφανειακής τάσης. Τα αποτελέσματα της προσέγγισης αυτής κατέδειξαν ότι περιγράφεται επαρκώς η καύση του βαρέος πετρελαίου, όπως αποτυπώνεται και από τη σύγκριση με πειραματικά δεδομένα σε θαλάμους καύσης σταθερού όγκου (Takasaki et al. 2011) και ναυτικούς κινητήρες (Andreadis et al. 2011). Στις εργασίες των Garaniya και Goldsworthy (2007), Garaniya (2009) και Garaniya et al. (2011) υιοθετήθηκε μια πιο περίπλοκη αποτύπωση της σύνθεσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στο πλαίσιο της μοντελοποίησης SARA, η οποία θεωρεί το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο ως σύνθεση των Κορεσμένων (Saturates) χημικών ενώσεων, Αρωματικών (Aromatics) χημικών ενώσεων, Ρητινών (Resins) και των Ασφαλτενίων (Asphaltenes). Πρόσφατα, στην εργασία των Bolla et al. (2012), πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου (Herrmann et al. 2007, 2009, von Rotz et al. 2011) για τη μη-αντιδρώσα ροή βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, χρησιμοποιώντας μια προσέγγιση πέντε συστατικών. Τα αριθμητικά αποτελέσματα ήταν σε πολύ καλή συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις. Κάνοντας χρήση των δεδομέμων και συμπερασμάτων της σχετικής βιβλιογραφίας, η παρούσα ερευνητική εργασία στοχεύει στην ανάπτυξη ενός γενικευμένου μοντέλου υπολογισμού των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, το οποίο θα χαρακτηρίζεται από τα ακόλουθα:

- Υπολογισμός των θερμοφυσικών ιδιοτήτων για οποιαδήποτε ποιότητα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου
- Υπολογισμός της θερμοκρασιακής εξάρτησης των θερμοφυσικών ιδιοτήτων
- Δυνατότητα χρήση σε εφαρμογές Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής για την προσομοίωση της ροής και καύσης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου

3.2 Πειραματικές μετρήσεις δύο ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου

διατριβής, χρησιμοποιήθηκαν Στο πλαίσιο тпс παρούσας δείγματα δύο αντιπροσωπευτικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου για πειραματικές μετρήσεις των θερμοφυσικών τους ιδιοτήτων. Η διάθεση των δύο δειγμάτων έγινε από την εταιρεία Winterthur Gas & Diesel (πρόσφατη ονομασία της Wärtsilä Switzerland Ltd., από τον Ιανουάριο του 2015 και εξής) και την εταιρεία SGS Greece. Το πρώτο δείγμα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου χρησιμοποιήθηκε στη εργασία των von Rotz et al. (2011), η οποία αφορά σε πειραματικές μετρήσεις spray του εν λόγω βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Το δεύτερο δείγμα αποτελεί ένα τυπικό βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο που χρησιμοποιείται σε ναυτικούς κινητήρες. Η σημειογραφία όσον αφορά στα δείγματα των δυο βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων παρουσιάζεται στον Πίνακα 2. Σε αυτό το σημείο σημειώνεται ότι τα δείγματα #1a και #1b αντιστοιχούν στο ίδιο βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Η ανάλυση του δείγματος #1a παρουσιάζεται στη εργασία των von Rotz et al. (2011), ενώ το δείγμα #1b χρησιμοποιήθηκε για τις πειραματικές μετρήσεις της παρούσας εργασίας.

Πίνακας 2. Σημειογραφία σχετικά με τα δείγματα βαρέος ναυτιλικού καυσίμου που χρησιμοποι	ήθηκα ν
στην παρούσα διδακτορική διατριβή.	

Σημειογραφία	Προμηθευτής	Ανάλυση
HFO #1a	Winterthur Gas & Diesel	von Rotz et al. (2011)
HFO #1b	Winterthur Gas & Diesel	παρούσα εργασία
HFO #2	SGS Greece	παρούσα εργασία

Συνεπώς, η παρούσα ανάλυση αφορά στα δείγματα βαρέος πετρελαίου #1b και #2. Η ανάλυση των δειγμάτων περιλαμβάνει τον χημικό προσδιορισμό όσον αφορά στην περιεκτικότητα του άνθρακα, του υδρογόνου, του αζώτου, του θείου, του νερού, των μετάλλων και των ανόργανων στοιχείων (Al, Na, V and Si), όπως επίσης και τον προσδιορισμό της Θερμογόνου Ικανότητας (κατώτερη και ανώτερη), της ολικής οξύτητας και του δείκτη διάβρωσης. Οι μετρήσεις πραγματοποιήθηκαν στο Ευρωπαϊκό Ερευνητικό Ινστιτούτο Βιοενέργειας (European Bioenergy Research Institute (EBRI) του Πανεπιστημίου του Aston. Περαιτέρω, οι πειραματικές μετρήσεις της θερμοκρασιακής εξάρτησης της πυκνότητας, του κινηματικού ιξώδους και του δυναμικού ιξώδους πραγματοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια της παρούσας διατριβής στο Εργαστήριο Καυσίμων και Λιπαντικών της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου. Τέλος, οι πειραματικές μετρήσεις που αφορούν στη θερμοκρασιακή εξάρτηση της επιφανειακής τάσης πραγματοποιήθηκαν στον Τομέα Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Εθνικού

Για τον χαρακτηρισμό των δύο βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων χρησιμοποιήθηκαν οι ακόλουθες διαδικασίες:

α. στοιχειώδης ανάλυση CHN, με χρήση του αναλυτή FlashEA® 1112 Elemental Analyzer (Thermo Fisher Scientific, Waltham, Massachusetts),

β. προσδιορισμός της περιεκτικότητας των μεταλλικών και των ανόργανων χημικών στοιχείων, με χρήση του φασματογράφου Varian Vista MPX CCD Simultaneous axial ICP-OES (Varian, Palo Alto, California),

γ. προσδιορισμός της περιεκτικότητας του νερού μέσω της ογκομετρικής συσκευής Karl-Fischer titration (ASTM D6304 2016a), δ. προσδιορισμός της ανωτέρας και κατωτέρας Θερμογόνου Ικανότητας, με χρήση της συσκευής Parr 6100 oxygen bomb calorimeter (Parr Instrument Company, Moline, Illinois) (ASTM D240 2017b),

ε. προσδιορισμός της ολικής οξύτητας, με χρήση της συσκευής G20 Titrator (Mettler Toledo, Columbus, Ohio) (ASTM D664 2017a), and

ζ. προσδιορισμός του δείκτη οξύτητας σύμφωνα με το ASTM D130/IP154 (2018a).

Τα αποτελέσματα των πειραματικών μετρήσεων που πραγματοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια της παρούσας διατριβής (HFO #1b and HFO #2), όσον αφορά στις περιεκτικότητες των χημικών στοιχείων, παρουσιάζονται στον Πίνακα 3. Στον Πίνακα 4 παρουσιάζονται οι τιμές της ανωτέρας και κατωτέρας Θερμογόνου Ικανότητας, της ολικής οξύτητας και του δείκτη διάβρωσης. Στους Πίνακες 3 και 4 περιλαμβάνονται επίσης και οι τιμές του δείγματος του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, όπως αυτές αναφέρονται στην εργασία των von Rotz et al. (2011).

Ακολούθως, για τον προσδιορισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων συναρτήσει της θερμοκρασίας, ακολουθήθηκαν οι παρακάτω διαδικασίες μέτρησης:

(α) μετρήσεις της πυκνότητας σύμφωνα με το ASTM D4052 (2018b),

(β) οι μετρήσεις για του δυναμικού και του κινηματικού ιξώδους πραγματοποιήθηκαν σύμφωνα με το ASTM D7042 (2016b),

(γ) οι μετρήσεις για την επιφανειακή τάση πραγματοποιήθηκαν σύμφωνα με τη μέθοδο Du Noüy ring στη συσκευή KRÜSS K10T Digital Tensiometer (ASTM D971 2012).

Αντιπροσωπευτικές τιμές των εν λόγω θερμοφυσικών ιδιοτήτων σε διαφορετικές θερμοκρασίες παρουσιάζονται στον Πίνακα 4 για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1b και #2. Στον Πίνακα 4 περιλαμβάνονται επίσης και οι τιμές του δείγματος #1a, όπως αυτές αναφέρονται στην εργασία των von Rotz et al. (2011). Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειωθεί ότι διαπιστώθηκαν μικρές διαφορές μεταξύ των τιμών του δείγματος #1a που αναφέρονται στην εργασία των von Rotz et al. (2011) και των μετρήσεων του δείγματος #1b που πραγματοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια της παρούσας διατριβής. Αυτή η απόκλιση μεταξύ των μετρήσεων μπορεί να οφείλεται σε:

- Αβεβαιότητες στο πλαίσιο της διεξαγωγής των πειραματικών μετρήσεων
- Διαφορές στις διαδικασίες συλλογής των δειγμάτων καυσίμου
- Γήρανση του καυσίμου, επηρεάζοντας τα αποτελέσματα των παρόντων μετρήσεων
- Επιδράσεις από τη διαχείριση των καυσίμων (διήθηση και καθαρισμός)

Πίνακας 3. Σύνθεση των δειγμάτων των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1b και #2 με βάση τις παρούσες πειραματικές μετρήσεις. Συμπεριλαμβάνονται αντίστοιχες τιμές για το δείγμα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, που δημοσιεύτηκαν στην εργασία των von Rotz et al. (2011).

	С	Н	N	S	AI	Na	Si	V	H ₂ O		
	[wt.%]	[wt.%]	[wt.%]	[wt.%]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[mg/kg]	[wt.%]		
HFO #1a	87.2	10.2	1.0	0.81	<1.0	11.0	<1.0	28.0	<0.1		
HFO #1b	87.9	10.2	0.6	0.88	1.0	5.0	<1.0	29.0	<0.1		
HFO #2	85.8	10.1	0.4	3.4	3.0	29.0	<1.0	106.0	<0.1		

Πίνακας 4. Παρούσες πειραματικές μετρήσεις των δειγμάτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1b και #2, όσον αφορά στην ολική οξύτητα, στον δείκτη διάβρωσης, στην κατώτερη και ανώτερη Θερμογόνο Ικανότητα και σε αντιπροσωπευτικές θερμοφυσικές ιδιότητες. Συμπεριλαμβάνονται αντίστοιχες τιμές του δείγματος του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, που δημοσιεύτηκαν στην εργασία των von Rotz et al. (2011).

	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2
Ολική οξύτητα [mg KOH/g]	0.1	0.3	0.5
Δείκτης διάβρωσης	NA	1b	1b
Ανώτερη Θερμογόνος Ικανότητα [KJ/kg]	42740	42660	42330
Κατώτερη Θερμογόνος Ικανότητα [KJ/kg]	40580	40491	40182
Πυκνότητα στους 288.15 Κ [kg/m³]	1001.1	989.4	989.3
Κινηματικό ιξώδες στους 323.15 K [cSt]	1255.0	995.5	440.8
Δυναμικό ιξώδες στους 323.15 K [cP]	NA	963.3	426.3
Επιφανειακή τάση στους 313.15 K [mN/m]	NA	31.5	31.2

3.3 Ανάπτυξη του μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλικού καυσίμου

Τα διυλιστήρια αναμιγνύουν εν γένει διαφορετικά προϊόντα απόσταξης προκειμένου να παράγουν διαφορετικές ποιότητες βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Για τον λόγο αυτόν, ο πλήρης χαρακτηρισμός του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου δεν είναι εφικτός, καθώς το τελικό προϊόν περιέχει έναν μεγάλο αριθμό υδρογονθράκων, με περίπλοκη σύσταση και δομή. Έτσι, στη βιβλιογραφία αναφέρονται εκτενείς μετρήσεις διάφορων δειγμάτων αποσταγμάτων βαρέων πετρελαίων, οι οποίες υποστηρίζονται και από θερμοδυναμική ανάλυση, προκειμένου να καταστεί δυνατός ο εύκολος προσδιορισμός βασικών ιδιοτήτων όπως η πυκνότητα και το κινηματικό ιξώδες. Ακολούθως, οι ιδιότητες αυτές μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε σχέσεις για τον υπολογισμό θερμοφυσικών ιδιοτήτων, οι οποίες είναι είτε οικονομικά απαγορευτικό είτε πρακτικά αδύνατο να μετρηθούν πειραματικά. Οι ιδιότητες αυτές είναι το μοριακό βάρος, η κρίσιμη θερμοκρασία, η κρίσιμη πίεση και η ενθαλπία. Προς αυτό, μπορεί να βρεθεί στη βιβλιογραφία επαρκής αριθμός σχέσεων για τον χαρακτηρισμό των βαρέων του πετρελαίου (Ancheyta 2013, Riazi 2005, Wauquier 1995, API 1997, και εκεί βιβλιογραφικές αναφορές).

Στην παρούσα διατριβή, αναπτύχθηκε ένα ολοκληρωμένο μοντέλο για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Η ανάπτυξη του μοντέλου βασίσθηκε σε πιστοποιημένες έγκυρες σχέσεις της βιβλιογραφίας (Kontoulis et al. 2018), οι οποίες χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέων αποσταγμάτων του πετρελαίου. Εδώ, γίνεται η βασική παραδοχή ότι το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο είναι ένα μονοσυστατικό βαρύ απόσταγμα πετρελαίου. Με κατάλληλη προσαρμογή και σύνθεση των σχέσεων της βιβλιογραφίας, αναπτύχθηκε ένα υπολογιστικό εργαλείο υπολογισμού των θερμοφυσικών ιδιοτήτων οποιασδήποτε ποιότητας βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου για μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής σε ναυτικούς κινητήρες. Το αναπτυχθέν μοντέλο απαιτεί ως είσοδο **τέσσερις (4)** τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων, οι οποίες είναι διαθέσιμες από την ανάλυση λαμβανόμενου κατά την πετρέλευση δείγματος, συγκεκριμένα:

- α. πυκνότητα σε δεδομένη θερμοκρασία,
- β. κινηματικό ιξώδες στη θερμοκρασία Τ1,
- γ. κινηματικό ιξώδες στη θερμοκρασία Τ2 και
- δ. επι τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα σε θείο.

Το μοντέλο υπολογίζει τις τιμές ενός ευρέος φάσματος θερμοφυσικών ιδιοτήτων. Συγκεκριμένα, με χρήση του μοντέλου υπολογίζονται: (α) το μοριακό βάρος, (β) το κανονικό σημείο βρασμού, (γ) ο λόγος άνθρακα-υδρογόνου, (δ) η ψευδο-κρίσιμη πίεση και θερμοκρασία, (ε) η κατώτερη Θερμογόνος Ικανότητα, (ζ) η ενθαλπία σχηματισμού, (η) η ειδική θερμοχωρητικότητα, (θ) ο δείκτης αρωματικότητας, (ι) ο παράγοντας Watson (Watson characterization factor), και (κ) ο ακεντρικός παράγοντας (acentric factor). Ένα κύριο πλεονέκτημα του παρόντος μοντέλου είναι ο υπολογισμός ενός μεγάλου εύρους θερμοφυσικών ιδιοτήτων συναρτήσει της θερμοκρασίας, το οποίο είναι κρίσιμο για μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής. Οι θερμοφυσικές ιδιότητες που υπολογίζονται συναρτήσει της θερμοκρασίας είναι: (1) η πυκνότητα, (2) το κινηματικό ιξώδες, (3) το δυναμικό ιξώδες, (4) η τάση ατμών, (5) η λανθάνουσα θερμότητα, (6) η επιφανειακή τάση, (7) ο συντελεστής διάχυσης, και (8) η αισθητή ενθαλπία.

Στις επόμενες επιμέρους ενότητες παρουσιάζεται μια αναλυτική περιγραφή του παρόντος μοντέλου. Επίσης, παρουσιάζεται και η εφαρμογή του μοντέλου για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων των δύο διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που παρουσιάστηκαν στον Πίνακα 2. Στον Πίνακα 5 παρουσιάζονται μετρήσεις θερμοφυσικών ιδιοτήτων των δειγμάτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2 (βλ. Πίνακες 3 και 4),

οι οποίες αποτελούν την είσοδο του παρόντος μοντέλου. Στα διαγράμματα που ακολουθούν παρατίθενται επίσης και οι αντίστοιχες τιμές για το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀) (API 1997), ώστε να είναι σαφής η σύγκριση ανάμεσα σε βαρέα και ελαφρά ναυτιλιακά καύσιμα.

Πίνακας 5. Πειραματικές μετρήσεις των θερμοφυσικών ιδιοτήτων των δειγμάτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a (δημοσιεύτηκαν στην εργασία των von Rotz et al. (2011)), #1b και #2. Οι τιμές αποτελούν τα δεδομένα εισόδου που απαιτούνται για το αναπτυχθέν μοντέλο. Στον Πίνακα περιλαμβάνονται αντίστοιχες τιμές του δεκατετρανίου (C14H₃₀), για λόγους σύγκρισης (API 1997).

Δεδομένα Εισόδου:Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Πυκνότητα στους 288.15 Κ [kg/m³]	1001.1	989.4	989.3	765.7
Κινηματικό ιξώδες στους 323.15 K [cSt]	1255.0	995.49	440.84	1.84
Κινηματικό ιξώδες στους 373.15 K [cSt]	73.96	56.57	33.46	1.01
Κατά βάρος περιεκτικότητα του θείου [%]	0.81	0.88	3.4	-

3.3.1 Πυκνότητα, ειδικό βάρος 60F/60F και βάρος API (API gravity)

Η εξάρτηση της πυκνότητας από τη θερμοκρασία εκφράζεται από μια αρνητική κλίση. Συνεπώς, η πυκνότητα μειώνεται με αύξηση της θερμοκρασίας. Ο υπολογισμός της πυκνότητας ενός αποστάγματος βαρέος πετρελαίου συναρτήσει της θερμοκρασίας δίνεται από την παρακάτω σχέση που προτάθηκε από τους Denis et al. (Riazi 2005). Για τον πλήρη υπολογισμό της θερμοκρασιακής εξάρτησης απαιτείται η τιμή της πυκνότητας σε μία θερμοκρασία.

$$\frac{\Delta\rho}{\Delta T} = -(2.34 \cdot 10^{-3} - 1.9 \cdot \rho_T) \quad (1)$$

όπου,

 P_T είναι η πυκνότητα του καυσίμου στη θερμοκρασία T, σε Kg/m^3

Οι πειραματικές μετρήσεις και οι υπολογισθείσες τιμές της πυκνότητας για διαφορετικές ποιότητες βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, σε ατμοσφαιρική πίεση, συναρτήσει της θερμοκρασίας, παρουσιάζονται στην Εικόνα 3. Στην Εικόνα 3 παρατίθεται επίσης και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C14H30) (API 1997). Στην Εικόνα 3 παρατηρείται καλή σύγκλιση μεταξύ πειραματικών δεδομένων και υπολογιστικών αποτελεσμάτων.



Εικόνα 3. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές της πυκνότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C14H30) (API 1997).

Το ειδικό βάρος 60F/60F και το βάρος API (API gravity) είναι εναλλακτικοί τρόποι έκφρασης και προσδιορισμού της πυκνότητας.

Το ειδικό βάρος 60F/60F ενός καυσίμου είναι μια αδιάστατη ποσότητα, και ορίζεται ως ο λόγος της πυκνότητας του καυσίμου στους 60 βαθμούς Fahrenheit (15.6 °C) προς την πυκνότητα του νερού στην ίδια θερμοκρασία:

$$SG_{60F/60F} = \frac{\rho_{60F}^{fuel}}{\rho_{60F}^{water}}$$
(2)

όπου,

Το βάρος API είναι ακόμα μια έκφραση που συσχετίζει την πυκνότητα του πετρελαίου με αυτήν του νερού. Το βάρος API είναι αντιστρόφως ανάλογη ποσότητα με το ειδικό βάρος 60F/60F, επομένως είναι και αυτή μια αδιάστατη ποσότητα:

$$API = \frac{141.5}{SG_{60F/60F}} - 131.5 \quad (3)$$

Οι τιμές του ειδικού βάρους 60F/60F και του βάρους API για τις ποιότητες των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 αποτυπώνονται στον Πινακα 6.

Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	C ₁₄ H ₃₀
Ειδικό βάρος 60 F/60 F	1.002	0.9903	0.9902	0.7665
Βάρος ΑΡΙ	9.72	11.38	11.40	53.11

Πίνακας 6. Ειδικό βάρος 60F/60F και βάρος API των δειγμάτων των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

3.3.2 Κινηματικό και δυναμικό ιξώδες

Για τον υπολογισμό του κινηματικού ιξώδους συναρτήσει της θερμοκρασίας, χρησιμοπιήθηκε η σχέση του Walther (1931), η οποία θεωρείται ακριβής στο εύρος $2 \div 2 * 10^7 cSt$:

 $\log[\log(v_T + 0.7)] = A + B \cdot \log(T)$ (4)

όπου,

V_T είναι το κινηματικό ιξώδες του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στη θερμοκρασία T, σε cSt
 T είναι η θερμοκρασία σε βαθμούς Kelvin
 A και Β είναι σταθερές

Στην Εικόνα 4 απεικονίζονται οι πειραματικές μετρήσεις και τα υπολογιστικά αποτελέσματα του κινηματικού ιξώδους, για τις ποιότητες των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων 1#a, 1#b και #2, συναρτήσει της θερμοκρασίας. Στην Εικόνα 4 παρατίθεται επίσης και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997). Παρατηρείται πολύ καλή σύγκλιση μεταξύ πειραματικών δεδομένων και αριθμητικών αποτελεσμάτων. Από την Εικόνα 4 γίνεται φανερό ότι το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο απαιτεί επαρκή προθέρμανση (στην πράξη, μέχρι τους 430 K (160 °C)) προκειμένου το spray να διασπαστεί και να εξατμιστεί κατάλληλα εντός του θαλάμου καύσης του κινητήρα.



Εικόνα 4. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές της πυκνότητας συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Το δυναμικό ιξώδες μπορεί εύκολα να υπολογισθεί από τον ορισμό του:

$$\left[\mu = \nu \cdot \rho\right]_T \quad (5)$$

όπου, μ είναι το δυναμικό ιξώδες ν είναι το κινηματικό ιξώδες ρ είναι η πυκνότητα

Στην Εικόνα 5 απεικονίζονται οι πειραματικές μετρήσεις και τα αριθμητικά αποτελέσματα του δυναμικού ιξώδους, για τις ποιότητες των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2, συναρτήσει της θερμοκρασίας. Στην Εικόνα 5 παρατίθεται επίσης η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997). Παρατηρείται πολύ καλή σύγκλιση μεταξύ πειραματικών δεδομένων και αριθμητικών αποτελεσμάτων. Η Εικόνα 5 καταδεικνύει ότι το ιξώδες του βαρέος ναυτιλιακού καύσιμου είναι κατά δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από αυτό του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου, με τη η διαφορα να μειώνεται όσο αυξάνεται η θερμοκρασία (Bartok and Sarofim 1991).



Εικόνα 5. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές του δυναμικού ιξώδους συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C14H₃₀) (API 1997).

3.3.3 Κατώτερη Θερμογόνος Ικανότητα

Ο υπολογισμός της κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας στους 298.15 Κ και στη 1 atm, πραγματοποιείται, χρησιμοποιώντας μια σχέση που συνδέει την κατώτερη Θερμογόνο Ικανότητα με την πυκνότητα, ρ, σε kg/m^3 και την επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα του θείου στο καύσιμο, S%. Η σχέση αυτή για τον υπολογισμό της κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας προτάθηκε στην εργασία του Wauquier 1995:

 $\Delta h_c = 55500 - 14.4 \cdot \rho_{288.15K} - 320 \cdot S\% \tag{6}$

Οι πειραματικές μετρήσεις των ανώτερων Θερμογόνων Ικανοτήτων και των κατώτερων Θερμογόνων Ικανοτήτων με βάση το ASTM D240 (2017b) (βλ. Πίνακα 4), καθώς και οι υπολογισθείσες τιμές των κατώτερων Θερμογόνων Ικανοτήτων των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων 1#a, 1#b και #2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 7. Στον Πινακα 7 περιλαμβάνεται και η τιμή της κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997). Η σύγκριση μεταξύ των πειραματικών μετρήσεων και των υπολογιστικών αποτελεσμάτων καταδεικνύει ότι η ως άνω σχέση μπορεί να προσεγγίσει ικανοποιητικά την κατώτερη Θερμογόνων Ικανότητα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Οι τιμές των κατώτερων Θερμογόνων Ικανότήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου είναι αισθητά χαμηλότερες από εκείνη του δεκατετρανίου. Επίσης, η επίδραση της περιεκτικότητας του θείου στην τιμή της Θερμογόνου Ικανότητας αποτυπώνεται στον Πίνακα 7. Με δεδομένο ότι όλα τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα που παρουσιάζονται στον Πίνακα 7 έχουν παρόμοιες τιμές της πυκνότητας (βλ. Πίνακα 5)), το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #2 που εμπεριέχει την μεγαλύτερη ποσότητα θείου έχει τη χαμηλότερη κατώτερη Θερμογόνο Ικανότητα.

Πίνακας 7. Πειραματικές μετρήσεις της ανώτερης και κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας (ASTM D240 2017b) και υπολογισθείσες τιμές, των δειγμάτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η τιμή της κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	C ₁₄ H ₃₀
HHV (ASTM D240) [KJ/kg]	42740	42660	42330	-
LHV (ASTM D240) [KJ/kg]	40580	40491	40182	-
Υπολογισθείσα LHV [KJ/kg]	40826	40971	40166	44019.6

3.3.4 Δείκτης αρωματικότητας (CCAI)

Η φτωχή ποιότητα έναυσης και καύσης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων συνδέεται άμεσα με την υψηλή αρωματικότητα των ασφαλτενίων. Ο δείκτης αρωματικότητας (CCAI) αποτελεί ένα χρήσιμο μέτρο για την ταξινόμηση των ποιοτήτων του βαρέος ναυτικού καυσίμου, με βάση την καθυστέρηση έναυσης. Η αξιολόγηση του δείκτη αρωματικότητας ως μέτρο ταξινόμησης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων έχει εξεταστεί με πειραματικές μετρήσεις σε συσκευές ανάλυσης έναυσης καυσίμων και σε κινητήρες (Schenk et al. 1998, de Ηοog et al. 2010). Ο υπολογισμός του δείκτη αρωματικότητας βασίζεται σε μια εμπειρική

σχέση η οποία συνδέει την πυκνότητα (σε kg/m^3) με το κινηματικό ιξώδες (σε cSt) (Wauquier 1995):

 $CCAI = \rho_{15^{\circ}C} - 140.7 \cdot \log \left[\log \left(v_{50^{\circ}C} + 0.85 \right) \right] - 80.6$ (7)

όπου,

 ${\cal P}_{{\rm 15\,^\circ C}}$ είναι η πυκνότητα του βαρέος καυσίμου στους 15 °C, σε $\mathit{kg\,/\,m^3}$

 $V_{50^\circ C}$ είναι το κινηματικό ιξώδες στους 50 °C, σε cSt

Η σχέση μεταξύ του δείκτη αρωματικότητας και της ποιότητας της έναυσης παρουσιάζεται στον Πίνακα 8 (Klianis et al. 2002). Όσο χαμηλότερη είναι η τιμή του δείκτη αρωματικότητας, τόσο καλύτερα είναι τα χαρακτηρηστικά της έναυσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Πολλοί κατασκευαστές κινητήρων συνιστούν ένα άνω όριο του δείκτη αρωματικότητας στις προδιαγραφές του εκάστοτε κινητήρα. Έτσι, μια αντίστοιχη προδιαγραφή υπάρχει και στο

διεθνές πρότυπο ISO. Οι υπολογισθείσες τιμές του δείκτη αρωματικότητας των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων 1#a, 1#b και #2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 9, καταδεικνύοντας καλή έως μέτρια ποιότητα έναυσης για τα συγκεκριμένα καύσιμα.

Πίνακας 8. Αντιστοιχία μεταξύ του δείκτη αρωματικότητας και της ποιότητας έναυσης (Klianis et al. 2002).

Δείκτης Αρωματικότητας	Ποιότητα έναυσης
790 ÷ 830	Πολύ καλή ÷ Καλή
830 ÷ 850	Καλή ÷ Μέτρια
850 ÷ 870	Μέτρια ÷ Φτωχή
870 ÷ 950	Φτωχή ÷ Πολύ Φτωχή

Πίνακας 9. Υπολογισθείσες τιμές του δείκτη αρωματικότητας για τα δείγματα των ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2.

Θερμοφυσική Ιδ	διότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2
Δείκτης Αρωματ	Γικότητας	851	842	849

3.3.5 Μοριακό βάρος

Ο υπολογισμός του μοριακού βάρους των βαρέων αποσταγμάτων του πετρελαίου, σε gr/mole, μπορεί να βασιστεί στη σχέση που έχει προταθεί από τον Riazi 2005. Η συγκεκριμένη σχέση ισχύει για ένα μεγάλο εύρος τιμών του μοριακού βάρους. Συγκεκριμένα ισχύει για το εύρος 200÷800 gr/mole. Η σχέση εμπεριέχεται και στη διαδικασία API 2B2.3 (API 1997), και συνδέει το μοριακό βάρος με το κινηματικό ιξώδες (σε cSt) σε δύο συγκεκριμένες θερμοκρασίες και με το ειδικό βάρος 60 F/60 F του καυσίμου, ως ακολούθως:

 $MW = 223.56 \cdot v_{311.15K}^{(-1.2435+1.1228*SG_{60F/60F})} \cdot v_{372.15K}^{(3.4758-3.038*SG_{60F/60F})} \cdot SG_{60F/60F}^{-0.6665}$ (8)

όπου,

MW είναι το μοριακό βάρος, σε gr/mole

 $V_{311.15K}$ είναι το κινηματικό ιξώδες στους 311.15 βαθμούς Kelvin, σε cSt

 $V_{372.15K}$ είναι το κινηματικό ιξώδες στους 372.15 βαθμούς Kelvin, σε cSt

 $SG_{60F/60F}$ είναι το ειδικό βάρος 60F/60F

Το μοριακό βάρος των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων που υπολογίζεται από την παραπάνω σχέση, με βάση την παραδοχή του μονοσυστατικού καυσίμου, θεωρείται ως ο μέσος όρος των μοριακών βαρών των επιμέρους συστατικών που αποτελούν το καύσιμο. Οι υπολογισθείσες τιμές των μοριακών βαρών των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων 1#a, 1#b και #2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 10. Στον Πινακα 10 περιλαμβάνεται και η τιμή του μοριακού βάρους του (C₁₄H₃₀) (API 1997), αποτυπώνοντας την απόκλιση στις τιμές του μοριακού βάρους μεταξύ των βαρέων και ελαφρών καυσίμων.

Πίνακας 10. Υπολογισθείσες τιμές του μοριακού βάρους των δειγματων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	C ₁₄ H ₃₀
Μοριακό Βάρος [gr/mole]	554.84	531.08	468.06	198.388

3.3.6 Παράγοντας Watson και κανονικό σημείο βρασμού

Ο παράγοντας Watson είναι ένας δείκτης προσδιορισμού της παραφινικότητας (paraffinicity) ενός αποστάγματος πετρελαίου. Τιμές ανώτερες του 12 αντιστοιχούν σε αποστάγματα πετρελαίου με μεγαλύτερη πτητικότητα. Τα βαρέα ναυτιλιακα καύσιμα χαρακτηρίζονατι από τιμές του παράγοντα Watson μικρότερες του 12 (API 1997). Ο παράγοντας Watson είναι ένα χρήσιμο μέγεθος, καθώς χρησιμοποιείται σε σχέσεις για τον υπολογισμό θερμοφυσικών ιδιοτήτων των αποσταγμάτων του πετρελαίου, και κατ' επέκταση των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων. Ο προσδιορισμός του παράγοντα Watson βασίζεται στο κανονικό σημείο βρασμού και το ειδικό βάρος 60F/60F του καυσίμου. Το κανονικό σημείο βρασμού ορίζεται ως η θερμοκρασία στην οποία η πίεση εξάτμισης ενός υγρού είναι ίση με 1 atm. Συγκεκριμένα, ο παράγοντας Watson υπολογίζεται από την ακόλουθη σχέση (API 1997, Riazi 2005):

$$K_{w} = \frac{(1.8 \cdot T_{b})^{1/3}}{SG_{60F/60F}}$$
(9)

όπου,

 K_w παράγοντας Watson

 T_b είναι το κανονικό σημείο βρασμού σε βαθμούς Kelvin

 $SG_{60F/60F}$ είναι το ειδικό βάρος 60F/60F

Εν γένει, οι τιμές των ιδιοτήτων του δεξιού μέλους της σχέσης (9) μπορεί να μην είναι γνωστές. Ωστόσο, ο παράγοντας Watson μπορεί και πάλι να υπολογιστεί, εάν είναι γνωστό το μοριακό βάρος του καυσίμου και το βάρος API, σύμφωνα με την Εικόνα 6 (API 1997). Με γνωστή την τιμή του παράγοντα Watson καθορίζεται και η τιμή κανονικού σημείου βρασμού με εφαρμογή της σχέσης (9). Σε αυτό το σημείο αξίζει να σημειωθεί ότι το κανονικό σημείο βρασμού ενός βαρέος αποστάγματος του πετρελαίου θεωρείται ο μέσος όρος των κανονικών σημείων βρασμού των επιμέρους συστατικών που το αποτελούν. Οι υπολογισθείσες τιμές των παραγόνταν Watson των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 11. Στον Πίνακα 11 περιλαμβάνεται και η τιμή του παράγοντα Watson των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων έπιβεβαιώνουν ότι το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο χαρακτηρίζεται από τιμές του παράγοντα Watson μικρότερες του 12. Επίσης, οι τιμές των κανονικών σημείων βρασμού κείτονται εντός του εύρους 465÷854 Κ. Το εύρος αυτό θεωρείται αποδεκτό για τα βαριά ναυτιλιακά καύσιμα, όπως αναφέρεται και στην εργασία των Shyu et al. (1972).



Εικόνα 6. Παράγοντας Watson συναρτήσει του βάρους ΑΡΙ και του μοριακού βάρους (ΑΡΙ 1997).

Πίνακας 11. Υπολογισθείσες τιμές του παράγοντα Watson και του κανονικού σημείου βρασμού για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνονται και οι αντίστοιχες τιμές του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	C ₁₄ H ₃₀
Παράγοντας Watson	11.41	11.47	11.3	12.8
Κανονικό σημείο βρασμού [Κ]	829.7	813.6	780.5	526.7

3.3.7 Λόγος Άνθρακα προς Υδρογόνο

Ο λόγος βάρους Άνθρακα προς Υδρογόνο ορίζεται ως το συνολικό βάρος των ατόμων του άνθρακα προς το συνολικό βάρος των ατόμων του υδρογόνου που περιέχονται σε ένα συστατικό ή σε ένα μίγμα. Ο λόγος Άνθρακα προς Υδρογόνο παρέχει χρήσιμες πληροφορίες σχετικά με τον τύπο και την ποιότητα ενός καυσίμου. Στην παρούσα διατριβή, ο υπολογισμός του λόγου Άνθρακα προς Υδρογόνο υπολογίστηκε με βάση τη σχέση (10) (Riazi 2005). Η σχέση αυτή θεωρείται αποδεκτή για συστατικά ή μίγματα που χαρακτηρίζονται ως C₂₀ έως C₅₀.

$$CH_{weight} = 8.7743 \cdot 10^{-10} \cdot \left[\exp(7.176 \cdot 10^{-3} \cdot T_b + 30.06242 \cdot SG_{60F/60F} - 7.35 \cdot 10^{-3} \cdot T_b \cdot SG_{60F/60F}) \right] \cdot (10) \cdot T_b^{-0.98445} \cdot SG_{60F/60F}^{-18.2753}$$

όπου,

 $T_b\,$ είναι το κανονικό σημείο βρασμού σε βαθμούς Kelvin

 $SG_{60F/60F}$ είναι το ειδικό βάρος 60F/60F

Ο ατομικός λόγος Άνθρακα προς Υδρογόνο ορίζεται ως ο λόγος των συνολικών ατόμων του άνθρακα προς τον συνολικό αριθμό των ατόμων του υδρογόνου. Ο υπολογισμός του

ατομικού λόγου Άνθρακα προς Υδρογόνο πραγματοποιείται με βάση την τιμή του λόγου βάρους Άνθρακα προς Υδρογόνο μέσω της ακόλουθης σχέσης:

$$CH_{atomic} = \frac{A_H}{A_C} \cdot CH_{weight} \quad (11)$$

όπου,

 A_H και A_C είναι τα ατομικά βάρη του υδρογόνου και του άνθρακα, αντίστοιχα.

Οι υπολογισθείσες τιμές των ατομικών λόγων Άνθρακα προς Υδρογόνο των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 12. Στον Πίνακα 12 περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 12. Υπολογισθείσες τιμές του ατομικού λόγου Άνθρακα προς Υδρογόνο για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	C ₁₄ H ₃₀
Ατομικός λόγος Άνθρακα προς Υδρογόνο	0.977	0.932	0.973	0.467

Χρησιμοποιώντας τις υπογισθείσες τιμές του μοριακού βάρους και του λόγου Άνθρακα προς Υδρογόνο, είναι εφικτός ο υπολογισμός του αριθμού των ατόμων του άνθρακα και του υδρογόνου που εμπεριέχονται σε ένα αντιπροσωπευτικό μόριο ενός βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.

3.3.8 Ψευδο-κρίσιμη θερμοκρασία και πίεση

Οι κρίσιμες ιδιότητες ενός βαρέος αποστάγματος του πετρελαίου είναι δύσκολο να προσδιοριστούν. Για τον λόγο αυτόν, χρησιμοποιούνται οι ονομαζόμενες ψευδο-κρίσιμες ιδιότητες. Οι ψευδο-κρίσιμες ιδιότητες υπολογίζονται μέσω επαρκώς αξιολογημένων σχέσεων που υπάρχουν στη βιβλιογραφία. Στην παρούσα διατριβή, οι ψευδο-κρίσιμες τιμές της θερμοκρασίας και της πίεσης υπολογίστηκαν (σε βαθμούς Kelvin και bar αντίστοιχα) με βάση τις σχέσεις που έχουν προτείνει οι Lee and Kesler. Οι σχέσεις αυτές παράγουν ικανοποιητικά αποτελέσματα για συστατικα ή μίγματα που περιέχουν C5 έως C50 άτομα άνθρακα (Riazi 2005):

 $T_{pc} = 189.8 + 450.6 \cdot SG_{60F/60F} + (0.4244 + 0.1174 \cdot SG_{60F/60F}) \cdot T_b + (0.1441 - 1.0069 \cdot SG_{60F/60F} \cdot 10^5) / T_b$ (12)

 $P_{pc} = \exp(5.689 - 0.0566 / SG_{60F/60F} - (0.43639 + 4.1216 / SG_{60F/60F} + 0.21343 / SG_{60F/60F}^2) \cdot 10^{-3} \cdot T_b$ $+ (0.47579 + 1.182 / SG_{60F/60F} + 0.15302 / SG_{60F/60F}^2) \cdot 10^{-6} \cdot T_b^2 - (2.4505 + 9.9099 / SG_{60F/60F}^2) \cdot 10^{-10} \cdot T_b^3)$ (13)

όπου,

 T_{pc} είναι η ψευδο-κρίσιμη θερμοκρασία σε βαθμούς Kelvin

 P_{pc} είναι η απόλυτη ψευδο-κρίσιμη πίεση σε bar

 $T_b\,$ είναι το κανονικό σημείο βρασμού σε βαθμούς Kelvin

 $SG_{60F/60F}$ είναι το ειδικό βάρος 60F/60F

Οι υπολογισθείσες τιμές των ψευδο-κρίσιμων ιδιοτήτων της θερμοκρασίας και της πίεσης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 13. Στον Πίνακα 13 περιλαμβάνονται και οι αντίστοιχες κρίσιμες τιμές του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 13. Υπολογισθείσες τιμές της ψευδο-κρίσιμης θερμοκρασίας και πίεσης για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Ψεύδο-κρίσιμη Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Θερμοκρασία [Κ]	986.8	971.1	948.7	693 (κρίσιμες)
Πίεση [bar]	9.2	9.44	10.9	15.7 (κρίσιμες)

Οι υπολογισμοί που αφορούν στα βαρέα αποστάγματα του πετρελαίου συνήθως βασίζονται στα ανηγμένα μεγέθη της πίεσης και της θερμοκρασίας. Τα ανηγμένα μεγέθη ορίζονται ως ο λόγος της εκάστοτε θερμοκρασίας ή πίεσης προς τις αντίστοιχες κρίσιμες τιμές. Στην παρούσα διατριβή ο υπολογισμός των ανηγμένων μεγεθών πραγματοποιείται με βάση τις ψευδο-κρίσιμες τιμές, ως ακολούθως:

$$T_r = rac{T}{T_{pc}}$$
 είναι η ανηγμένη θερμοκρασία $\mathbf{P}_r = rac{P}{P_{pc}}$ είναι η ανηγμένη πίεση

3.3.9 Ακεντρικός παράγοντας (acentric factor) και τάση ατμών

Ο ακεντρικός παράγοντας (acentric factor) εκφράζει την απόκλιση της διαμοριακής συνάρτησης δυναμικού ενός συστατικού ή μίγματος από εκείνη των μονοατομικών αερίων. Ο ακεντρικός παράγοντας φανερώνει την εκκεντρότητα (μη-σφαιρικότητα) ενός μορίου, και οι τιμές του αυξάνονται όσο αυξάνεται το μήκος της αλυσίδας των ατόμων του άνθρακα. Για παράδειγμα, οι τιμές του ακεντρικού παράγοντα για το αργό (Ar) και το μεθάνιο (CH₄) είναι πολύ μικρές και ίσες με 0.001 και 0.011, αντίστοιχα. Ο ακεντρικός παράγοντας μπορεί να υπολογιστεί ως ακολούθως:

 $\omega = -\log[P_r^*]_{0.7} - 1$ (14)

όπου,

 $[\mathbf{P}_{r}^{*}]_{0.7}$ είναι η ανηγμένη πίεση εξάτμισης που αντιστοιχεί σε τιμή της ανηγμένης θερμοκρασίας ίση με 0.7.

Χρησιμοποιώντας την υπολογισθείσα τιμή του ακεντρικού παράγοντα, η πίεση εξάτμισης μπορεί να υπολογιστεί με βάση τη σχέση που πρότειναν οι Pitzer et al. (1995), η οποία παρέχει ικανοποιητικά αποτελέσματα για τιμές των ανηγμένων θερμοκρασιών μεγαλύτερες από 0.7. Μια επέκταση της παραπάνω θεώρησης έχει προταθεί από τους Twu et al. (1994). Η επέκταση αυτή δίνει τη δυνατότητα υπολογισμού της πίεσης εξάτμισης για τιμές της ανηγμένης θερμοκρασίας μεγαλύτερες από 0.5. Για τον λόγο αυτόν, η συγκεκριμένη επέκταση χρησιμοποιείται στην παρούσα διατριβή για τον υπολογισμό της τάσης ατμών. Συγκεκριμένα, το παρόν μοντέλο περιλαμβάνει τον τροποποιημένο ακεντρικό παράγοντα, ο οποίος ισχύει για τους βαρείς υδρογονάνθρακες, και ορίζεται ως:

$$\Omega = -\log[P_r^*]_{0.5} - \ln 10 \quad (15)$$

όπου,

 $[\mathbf{P}_{r}^{*}]_{0.5}$ είναι η ανηγμένη πίεση εξάτμισης που αντιστοιχεί σε τιμή της ανηγμένης θερμοκρασίας ίσης με 0.5

Ο υπολογισμός του τροποποιημένου ακεντρικού παράγοντα γίνεται χρησιμοποιώντας το κανονικό σημείο βρασμού ως σημείο αναφοράς. Επομένως, η τάση ατμών υπολογίζεται στο εύρος των ανηγμένων θερμοκρασιών μεταξύ 0.5 και 1.0, εφαρμόζοντας την ακόλουθη σχέση:

$$\ln P_{r} = \ln P_{r}^{(0)} + \Omega \cdot \ln P_{r}^{(1)}$$
 (16)

Η αναλυτική μορφή των σχέσεων που αφορούν στις σχέσεις $\ln P_r^{(0)}$ και $\ln P_r^{(1)}$ είναι (Twu et al. 1994):

$$\ln P_r^{(0)} = \frac{1}{T_r} \cdot \left[-5.95103 \cdot (1 - T_r) + 1.15236 \cdot (1 - T_r)^{1.5} - 0.492662 \cdot (1 - T_r)^3 - 1.36122 \cdot (1 - T_r)^6 \right]$$
(17)
$$\ln P_r^{(1)} = \frac{1}{T_r} \cdot \left[-1.59825 \cdot (1 - T_r) + 0.135518 \cdot (1 - T_r)^{1.5} - 2.99603 \cdot (1 - T_r)^3 - 1.63677 \cdot (1 - T_r)^6 \right]$$
(18)

Οι υπολογισθείσες τιμές του ακεντρικού παράγοντα των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 14. Στον Πίνακα 14 περιλαμβάνεται και η

αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997). Οι υπολογισθείσες καμπύλες της τάσης ατμών των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 παρουσιάζονται στην Εικόνα 7. Στην Εικόνα 7 εμπεριέχονται και οι αντίστοιχες ψευδο-κρίσιμες τιμές (βλ. Πίνακα 13) Η Εικόνα 7 περιέχει και την καμπύλη της τάσης ατμών του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997). Οι υπολογισθείσα μορφή των καμπυλών της τάσης ατμών είναι παρόμοια με εκείνη της εργασίας των Shyu et al. 1972.

Πίνακας 14. Υπολογισθείσες τιμές του ακεντρικού παράγοντα για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Ακεντρικός παράγοντας	1.272	1.244	1.132	0.643



Εικόνα 7. Υπολογισθείσα τάση ατμών συναρτήσει της θερμοκρασίας (περιλαμβάνονται και οι τιμές στο ψευδο-κρίσιμο σημείο) για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

3.3.10 Λανθάνουσα θερμότητα

Η λανθάσουσα θερμότητα ενός βαρέος αποστάγματος του πετρελαίου υπολογίζεται, σε KJ/Kg, χρησιμοποιώντας τη σχέση του Watson (Riazi 2005). Η λανθάνουσα θερμότητα, Δh_v , υπολογίζεται για μια συγκεκριμένη θερμοκρασία με βάση την τιμή της λανθάνουσας θερμότητας στο κανονικό σημείο βρασμού, $[\Delta h_v]_T$, ως ακολούθως:

$$\Delta h_{\nu} = \left[\Delta h_{\nu}\right]_{T_b} \cdot \left(\frac{1 - T_r}{1 - \frac{T_b}{T_c}}\right)^{0.38}$$
(19)

όπου,

- T_r είναι η ανηγμένη θερμοκρασία
- $T_{\scriptscriptstyle b}\,$ είναι το κανονικό σημείο βρασμού σε βαθμούς Kelvin,
- $T_{_c}$ είναι η ψευδο-κρίσιμη θερμοκρασία σε βαθμούς Kelvin

Στην παρούσα διατριβή η λανθάνουσα θερμότητα στο κανονικό σημείο βρασμού, $\left[\Delta h_{\nu} \right]_{T_b}$, υπολογίζεται από τη σχέση που έχει προταθεί από τον Riazi (2005):

$$\left[\Delta h_{v}\right]_{T_{b}} = 1.093 \cdot R \cdot T_{b} \cdot \frac{\ln P_{c} - 1.013}{0.93 - \frac{T_{b}}{T_{c}}}$$
(20)

όπου,

Rείναι η ειδική σταθερά του αερίου, σε KJ / $\mathit{kg}\cdot\mathit{K}$

- $T_{\scriptscriptstyle b}$ είναι το κανονικό σημείο βρασμού σε βαθμούς Kelvin
- $T_{_c}$ είναι η ψευδο-κρίσιμη θερμοκρασία σε βαθμούς Kelvin
- P_{c} είναι η ψευο-κρίσιμη πίεση σε bar

Οι υπολογισθείσες καμπύλες της λανθάνουσας θερμότητας των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 παρουσιάζονται στην Εικόνα 8. Η Εικόνα 8 περιέχει και την καμπύλη της πίεσης εξάτμισης του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997). Η Εικόνα 8 καταδεικνύει ότι σε υψηλές θερμοκρασίες τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα χαρακτηρίζονται από υψηλότερες τιμές της λανθάνουσας θερμότητας, σε σχέση με τις αντίστοιχες του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀), με την απόκλιση να αυξάνει με αύξηση της θερμοκρασίας. Τα αποτελέσματα που παρήχθησαν στο πλαίσιο της παρούσας διατριβής είναι πολύ κοντά σε αυτά της εργασίας των Shyu et al. (1972), και παρόμοια με τις πειραματικές μετρήσεις για βαρέα υγρά αποστάγματα που δημοσιεύθηκαν στην εργασία των Gray et al. (1985).



Εικόνα 8. Υπολογισθείσα λανθάνουσα θερμότητα συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C14H₃₀) (API 1997).

3.3.11 Επιφανειακή τάση

Η επιφανειακή τάση ενός βαρέος αποστάγματος πετρελαίου μη προσδιορισμένης σύστασης υπολογίζεται σύμφωνα με την διαδικασία 10Α3.2 του ΑΡΙ (ΑΡΙ 1997), ως ακολούθως:

$$\sigma = 673.7 \cdot \left[1 - T_r\right]^{1.232} \cdot K_w^{-1} \quad (21)$$

όπου,

 σ είναι η επιφανειακή ταση σε mN/m

T_r είναι η ανηγμένη θερμοκρασία

 K_w είναι ο παράγοντας Watson

Η Εικόνα 9 παρουσιάζει τις υπολογισθείσες τιμές της επιφανειακής τάσης συναρτήσει της θερμοκρασίας για διάφορες ποιότητες βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων. Η Εικόνα 9 περιέχει και την αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997). Για την αξιολόγηση του νέου μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων έγιναν στο πλαίσιο της παρούσας διατριβής πειραματικές μετρήσεις της επιφανειακής τάσης για τις ποιότητες των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων, καθώς και στίστοιχες πειραματικές μετρήσεις για διάφορες ποιότητες βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων, καθώς και για τις παρούσες πειραματικές μετρήσεις, και αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις για διάφορες ποιότητες βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων, καθώς και για ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο (HFO 160, HFO 380, HFO 570, καθώς και MDO), που έχουν δημοσιευτεί στην εργασία των Fink et al. (2008). Στην Εικόνα 9 φαίνεται ότι οι τιμές των πειραματικών μετρήσεων που πραγματοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια της παρούσας εργασίας είναι πολύ κοντά με αυτές που έχουν δημοσιευτεί στην εργασία των Fink et al. (2008). Στην εργασία των Fink et al. (2008). Επιπλέον, η Εικόνα 9 καταδεικνύει ότι οι υπολογισθείσες τιμές της επιφανειακής τάσης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 είναι κατά 10% μεγαλύτερες από αυτές των πειραματικών μετρήσεων. Η απόκλιση μεταξύ αριθμητικών αποτελεσμάτων και πειραματικών μετρήσεων της ίδιας τάξης μεγέθους αναφέρεται και στο ΑΡΙ (1997). Σημειώνεται ότι, για

συνθήκες που αφορούν στη λειτουργία των ναυτικών κινητήρων Diesel, οι υπολογισθείσες τιμές του αριθμού Weber αντιστοιχούν στην περιοχή της καταστροφικής διάσπασης του καυσίμου (catastrophic break-up regime), και η επίδραση της επιφανειακής τάσης στη συχνότητα της διάσπασης της σταγόνας είναι ελάσσονος σημασίας, σε σύγκριση με την επίδραση του ιξώδους. Σε όλες τις περιπτώσεις, η τιμή της επιφανειακής τάσης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων είναι αρκετά μεγαλύτερη από εκείνη των ελαφρών καυσίμων (C₁₄H₃₀). Τέλος, σημειώνεται ότι οι παρούσες υπολογισθείσες τιμές της επιφανειακής τάσης είναι πολύ κοντά σε αυτές που έχουν δημοσιευτεί από τους Bartok και Sarofim (1991).



Εικόνα 9. Υπολογισθείσα επιφανειακή τάση συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b, #2 και του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀). Πειραματικές μετρήσεις για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b, #2 (παρούσα εργασία). Έχουν περιληφθεί και μετρήσεις της βιβλιογραφίας, για διάφορες ποιότητες βαρέος, καθώς και για μία ποιότητα ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (Fink et al. 2008).

3.3.12 Συντελεστής διάχυσης (καυσίμου στον αέρα)

Η διάχυση της μάζας είναι η μεταφορά μιας ουσίας από ένα σημείο του ρευστού όπου η συγκέντρωση της είναι υψηλότερη προς ένα άλλο σημείο όπου η συγκέντρωση της είναι χαμηλότερη. Ο συντελεστής διάχυσης είναι η σταθερά αναλογίας μεταξύ της προκύπτουσας ροής της μάζας και της κλίσης (gradient) της συγκέντρωσης. Εν γένει, η διάχυση μάζας περιγράφεται από τον πρώτο νόμο του Fick για την απλής κατεύθυνσης διάχυση σε σύστημα δύο συστατικών.

Στην παρούσα διατριβή ο υπολογισμός του συντελεστή διάχυσης μάζας εξατμισθέντος καυσίμου σε περιβάλλον αέρα βασίζεται σε μια εμπειρική σχέση που προτείνεται από τη διαδικασία 13B1.2 του API (API 1997). Η σχέση αυτή συνδυάζει την πίεση και τη θερμοκρασία με το μοριακό βάρος και τους ατομικούς όγκους διάχυσης του καυσίμου και του αέρα, ως ακολούθως:

$$D_{fuel \ to \ air} = 1.015321 \cdot 10^{-3} \cdot \left(\frac{1}{MW_{fuel}} + \frac{1}{MW_{air}}\right)^{0.5} \cdot \left[\left(d_{fuel}\right)^{\frac{1}{3}} + \left(d_{air}\right)^{\frac{1}{3}}\right]^{-2} \cdot T^{1.75} \cdot P^{-1}$$
(22)

όπου,

 d_{fuel} και d_{air} είναι οι ατομικοί όγκοι διάχυσης του καυσίμου και του αέρα, αντίστοιχα

Όπως αποτυπώνεται στην παραπάνω σχέση, ο συντελεστής διάχυσης είναι αντιστρόφως ανάλογος με την απόλυτη πίεση. Ο ατομικός όγκος διάχυσης υπολογίζεται με βάση την παραδοχή ότι τα βαρέα αποστάγματα του πετρελαίου μπορούν να αναπαρασταθούν από έναν αντιπροσωπευτικό υδρογονάνθρακα με συγκεκριμένο ατομικό λόγο άνθρακα προς υδρογόνο. Η σχέση για τον υπολογισμό του ατομικού όγκου διάχυσης βασίζεται στη διαδικασία 13B1.2 του API (API 1997):

 $d_{fuel} = x \cdot d_{carbon} + y \cdot d_{hvdrogen}$ (23)

όπου,

x και y είναι ο αριθμός των ατόμων του άνθρακα και του υδρογόνου, αντίστοιχα d_{carbon} , $d_{hydrogen}$ είναι οι ατομικοί όγκοι διάχυσης του άνθρακα και του υδρογόνου, αντίστοιχα, όπως αυτοί δίνονται στον Πίνακα 13B1.3 του API (API 1997).

Στην Εικόνα 10 παρουσιάζονται οι προκύπτουσες καμπύλες του συντελεστή διάχυσης συναρτήσει της θερμοκρασίας σε πίεση 1 atm για τις ποιότητες των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2. Για λόγους σύγκρισης, στην Εικόνα 10 εμπεριέχεται η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C14H30). Τα ελαφρά καύσιμα χαρακτηρίζονται από μεγαλύτερες τιμές του συντελεστή διάχυσης σε σχέση με τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 10. Τέλος, σε όλες τις περιπτώσεις ο συντελεστής διάχυσης αυξάνει με την αύξηση της θερμοκρασίας.



Εικόνα 10. Υπολογισθείσες καμπύλες του συντελεστή διάχυσης μάζας εξατμισθέντος καυσίμου σε περιβάλλον αέρα συναρτήσει της θερμοκρασίας, σε πίεση 1 atm, για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

3.3.13 Ενθαλπία (αισθητή)

Στην παρούσα εργασία ο υπολογισμός της (αισθητής) ενθαλπίας ενός αποστάγματος πετρελαίου που βρίσκεται σε αέρια φάση βασίζεται στην παραδοχή του ιδανικού αερίου. Η ενθαλπία του ιδανικού αέριου εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία, και υπολογίζεται ως η διαφορά μεταξύ της τιμής της ενθαλπίας σε μια συγκεκριμένη θερμοκρασία με την τιμή της ενθαλπίας σε μια θερμοκρασία αναφοράς. Στην παρούσα διατριβή επιλέχθηκε ως θερμοκρασία αναφοράς για τον υπολογισμό της ενθαλπίας η θερμοκρασία Ο Κ (σε συμφωνία με τη βιβλιοθήκη καυσίμων του κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής KIVA-3). Η διαφορά των ενθαλπιών, σε J/mole, υπολογίζεται συναρτήσει της ειδικής θερμοχωρητικότητας του ιδανικού αερίου από την ακόλουθη σχέση:

$$\Delta H = \int_{T_{ref}}^{T_2} C_p(T) \cdot dT \qquad (24)$$

Η μοριακή ειδική θερμοχωρητικότητα ενός βαρέος αποστάγματος πετρελαίου υπολογίζεται χρησιμοποιώντας αναλυτικές σχέσεις με βάση τον παράγοντα Watson, K_w, και τον ακεντρικό παράγοντα, ω, όπως έχουν προταθει από τους Lee και Kesler για βαριά αποστάγματα πετρελαίου (Riazi 2005):

$$C_{p} = MW \cdot [A_{0} + A_{1} \cdot T + A_{2} \cdot T^{2} - C \cdot (B_{0} + B_{1} \cdot T + B_{2} \cdot T^{2})]$$
(25)

όπου,

 C_p είναι η μοριακή θερμοχωρητικότητα ενός βαρέου αποστάγματος πετρελαίου σε $J/\mathit{mole}\cdot K$

MW είναι το μοριακό βάρος ενός βαρέου αποστάγματος πετρελαίου σε gr / mole

Οι συντελεστές της σχέσης (25) υπολογίζονται ως ακολούθως:

$$A_{0} = -1.41779 + 0.11828 \cdot K_{w}$$
(26)

$$A_{1} = -(6.99724 - 8.69326 \cdot K_{w} + 0.27715 \cdot K_{w}^{2}) \cdot 10^{-4}$$
(27)

$$A_{2} = -2.2582 \cdot 10^{-6}$$
(28)

$$B_{0} = 1.09223 - 2.48245 \cdot \omega$$
(29)

$$B_{1} = -(3.434 - 7.14 \cdot \omega) \cdot 10^{-3}$$
(30)

$$B_{1} = -(7.2661 - 9.2561 \cdot \omega) \cdot 10^{-7}$$
(31)

$$C = \left[\frac{(12.8 - K_{w}) \cdot (10 - K_{w})}{10 \cdot \omega}\right]^{2}$$
(32)

Οι τιμές της ειδικής θερμοχωρητικότητας των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και #2 στους 298.15 K, παρουσιάζονται στον Πίνακα 15. Στην Εικόνα 11 απεικονίζεται η θερμοκρασιακή εξάρτηση της (αισθητής) ενθαλπίας, καθώς και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 15. Υπολογισθείσα ειδική θερμοχωρητικότητα για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2, στους 298.15 Κ. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	C ₁₄ H ₃₀
Ειδική θερμοχωρητικότητα στους 298.15 K [KJ/kgK]	1.412	1.423	1.394	1.639



Εικόνα 11. Υπολογισθείσα ενθαλπία (αισθητή) συναρτήσει της θερμοκρασίας για τα δείγματα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Έχει περιληφθεί και η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C14H30) (API 1997).

3.3.14 Ενθαλπία σχηματισμού

Η ενθαλπία σχηματισμού ενός υδρογονάνθρακα, $C_x H_y$, υπολογίζεται από την ακόλουθη σχεση:

$$\left[\Delta h_f = \Delta h_f^{liq} + \Delta h_v\right]_{298.15K}^{latm}$$
(33)

όπου,

 Δh_f είναι η ενθαλπία σχηματισμού σε KJ / kg Δh_f^{liq} είναι η ενθαλπία σχηματισμού στην υγρή φάση σε KJ / kg

 $\Delta h_{_{\!V}}$ είναι η λανθάνουσα θερμότητα σε $\, K\!J$ / kg

Η λανθάνουσα θερμότητα υπολογίζεται όπως έχει αναφερθεί στην ενότητα 3.3.10. Η ενθαλπία σχηματισμού στην υγρή φάση σε θερμοκρασία 298.15 Κ και πίεση 1 atm υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την κατώτερη Θερμογόνο Ικανότητα, σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση (API 1997):

$$\left[\Delta h_f^{liq} = \Delta h_c + x \cdot \frac{MW_{CO_2}}{MW_{C_xH_y}} \cdot \Delta h_{f,CO_2} + \frac{y}{2} \cdot \frac{MW_{H_2O}}{MW_{C_xH_y}} \cdot \Delta h_{f,H_2O}\right]_{298.15K}^{latm}$$
(34)

όπου,

 Δh_c είναι η κατώτερη Θερμογόνος Ικανότητα (LHV), σε KJ / kg

 $\Delta h_{f,CO_2}$ είναι η ενθαλπία σχηματισμού του διοξειδίου του άνθρακα σε KJ / kg

 $\Delta h_{f,H,O}$ είναι η ενθαλπία σχηματισμού του νερού σε $\, K\!J$ / kg

Χ και γ είναι ο αριθμός των ατόμων του άνθρακα και του υδρογόνου, αντίστοιχα, στο μόριο

 MW_{C,H_u} είναι το μοριακό βάρος του καυσίμου σε gr/mole

 MW_{CO_2} είναι το μοριακό βάρος του διοξειδίου του άνθρακα σε gr / mole

 $MW_{H,O}$ είναι το μοριακό βάρος του νερού σε gr / mole

Σημειώνεται ότι η παραπάνω σχέση εφαρμόζεται στο πλαίσιο της παραδοχής του μονοσυστατικού βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Οι υπολογισθείσες τιμές της ενθαλπίας σχηματισμού των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #1b και 2 παρουσιάζονται στον Πίνακα 16, ο οποίος περιέχει και την αντίστοιχη τιμή του δεκατετρανίου (API 1997). Οι θετικές τιμές της ενθαλπίας σχηματισμού των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων σφείλονται στον ατομικό λόγο Άνθρακα προς Υδρογόνο, οι τιμές του οποίου για τα βαριά ναυτιλιακά καύσιμα είναι κοντά στη μονάδα (βλ. Πίνακα 12).

Πίνακας 16. Υπολογισθείσα ενθαλπία σχηματισμού στους 298.15 Κ για τα δείγματα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, #1b και #2. Περιλαμβάνεται και η αντίστοιχη τιμή του (C₁₄H₃₀) (API 1997).

			(/
Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #1b	HFO #2	$C_{14}H_{30}$
Ενθαλπία σχηματισμού στους 298.15 K [KJ/kg]	1075.0	909.4	678.4	-1675.7

4. Αξιολόγηση του νέου μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων για τα ναυτιλιακά καύσιμα του διεθνούς προτύπου ISO 8217:2010

Το νέο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων περιγράφεται συνοπτικά στο παρόν κεφάλαιο και χρησιμοποιείται προκειμένου να υπολογιστούν οι θερμοφυσικές ιδιότητες βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων που χρησιμοποιούνται ευρέως στη ναυτιλία. Οι αντίστοιχες ποιότητες είναι οι ακόλουθες: 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK και 700RMK, όπως περιγράφονται στο διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010. Στην Εικόνα 12 συνοψίζεται το αναπτυχθέν μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, καταδεικνύοντας τα δεδομένα εισόδου του μοντέλου, καθώς επίσης τις σχέσεις που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων.

Λεπτομερή αποτελέσματα αναφορικά με την αξιολόγηση του μοντέλου στο πλαίσιο της θερμοκρασιακής εξάρτησης των θερμοφυσικών ιδιοτήτων των ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου του διεθνούς προτύπου ISO 8217:2010 παρουσιάζονται στο αγγλικό κείμενο της διατριβής. Τα αποτελέσματα αυτά καταδεικνύουν ότι το παρόν μοντέλο μπορεί να χαρακτηρίσει επαρκώς τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα που προδιαγράφονται στο διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010. Συνεπώς το νέο μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής για καύση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε ναυτικούς κινητήρες.



Εικόνα 12. Σχηματική απεικόνιση του μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων που αναπτύχθηκε στην παρούσα διατριβή. Στο σχήμα αποτυπώνονται τα απαιτούμενα δεδομένα εισόδου και οι αξιολογημένες σχέσεις που εμπεριέχονται στο μοντέλο.

5. Πειραματικές μετρήσεις βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου και Υπολογιστική Ρευστοδυναμική

5.1 Πειραματικές μετρήσεις βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου

Μια σημαντική εξέλιξη για τη διεξαγωγή πειραματικής έρευνας με ενδιαφέρον για εφαρμογές μεγάλων ναυτικών κινητήρων Diesel έλαβε χώρα στο πλαίσιο του ευρωπαϊκού ερευνητικού προγράμματος HERCULES. Το ερευνητικό πρόγραμμα HERCULES, με επιστημονικό υπεύθυνο τον Καθηγητή του Ε.Μ.Π. Ν. Κυρτάτο, αποτελεί μια μακροπρόθεσμη ερευνητική πρωτοβουλία, με στόχο την ανάπτυξη νέων τεχνολογιών για τη μείωση των ρύπων και τη βελτίωση της απόδοσης των ναυτικών κινητήρων (Kyrtatos et al. 2007, Kyrtatos et al. 2013). Σε αυτό το πλαίσιο, αναπτύχθηκε από το Ομοσπονδιακό Πολυτεχνείο της Ζυρίχης (ETH Zürich) και τη Winterthur Gas & Diesel μια σύγχρονη πειραματική διάταξη για την πειραματική μελέτη φαινομένων ροής spray και καύσης σε συνθήκες αντιπροσωπευτικές μεγάλων ναυτικών κινητήρων (βλ. Εικόνα 13) (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).



Εικόνα 13. Διάταξη μεγάλου θαλάμου καύσης σταθερού όγκου που αναπτύχθηκε στο πλαίσιο του ευρωπαϊκού ερευνητικού προγράμματος HERCULES από το Ομοσπονδιακό Πολυτεχνείο της Ζυρίχης και τη Winterthur Gas & Diesel (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

Συγκεκριμένα, OI διαστάσεις της παραπάνω πειραματικής διάταξης είναι αντιπροσωπευτικές εκείνων ναυτικών κινητήρων (διάμετρος του εμβόλου), όπως επίσης οι παράμετροι λειτουργίας (πίεση, θερμοκρασία) τα χαρακτηριστικά της ροής (swirl) και η χρήση καυσίμου χαμηλής ποιότητας (βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο). Συνεπώς, η δυνατότητα παραγωγής ποιοτικών πειραματικών αποτελεσμάτων μπορεί να υποστηρίξει μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής και βελτιστοποίησης της λειτουργίας των ναυτικών κινητήρων. Σε αυτό το σημείο αξίζει να σημειωθεί ότι η πλειονότητα των φυσικών μοντέλων που χρησιμοποιούνται σε μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής έχει αξιολογηθεί σε γεωμετρίες και συνθήκες αντιπροσωπευτικές μικρών ή βαρέως τύπου (heavy duty) κινητήρων (Takasaki et al. 2011, Pizza et al. 2007, Fink et al. 2008). Εντούτοις, οι συνθήκες λειτουργίας των ναυτικών κινητήρων και ειδικά των μεγάλων δίχρονων ναυτικών κινητήρων διαφέρουν σημαντικά, για τους παρακάτω λόγους (de Hoog et al. 2010):

- Η θέση των εγχυτήρων βρίσκεται στην περιφέρεια του κυλίνδρου, και όχι στο κέντρο.
- Χρησιμοποιούνται δύο ή τρείς εγχυτήρες (και όχι ένας) ανά κύλινδρο.
- Κάθε εγχυτήρας φέρει οπές διαφορετικής διαμέτρου.
- Η διάμετρος των οπών είναι μεγάλη (τάξης 1 mm).
- Ο απόλυτος χρόνος της έγχυσης και της καύσης είναι μεγάλος.

- Υπάρχει ισχυρή συστροφή του αέρα (swirl), λόγω των απαιτήσεων απόπλυσης.
- Η ποιότητα του καυσίμου και του λιπαντικού ελαίου είναι διαφορετική (MDO, MGO, HFO, κυλινδρέλαιο).
- Λόγω της χαμηλής ταχύτητας (μικρότερης των 200 rpm) και των μεγάλων διαστάσεων, οι χρονικές και χωρικές κλίμακες είναι μεγαλύτερες.

Η σχηματική αναπαράσταση της πειραματικής διάταξης παρουσιάζεται στην Εικόνα 14. Η διάταξη περιλαμβάνει έναν θάλαμο καύσης σταθερού όγκου σε σχήμα δίσκου, με διάμετρο 500 mm και ύψος 150 mm, στον οποίο είναι τοποθετημένη μία βαλβίδα εξαγωγής, ενώ υπάρχει η δυνατότητα θέρμανσης των τοιχωμάτων. Στο μέσο επίπεδο του θαλάμου καύσης σταθερού όγκου μπορεί να πραγματοποιηθεί περιφερειακή έγχυση σε περιβάλλον ισχυρής συστροφής του αέρα. Η οπτική πρόσβαση στον θάλαμο επιτυγχάνεται μέσω κατάλληλων παραθύρων (διαμέτρου 150 mm), που είναι τοποθετημένα σε περιστρεφόμενους υποδοχείς. Στην αρχή της έγχυσης (start of injection - SOI), επιτυγχάνονται συνθήκες όμοιες με εκείνες που επικρατούν σε ναυτικούς κινητήρες (πίεση 13 ΜΡα, θερμοκρασία 930 Κ). Οι συνθήκες αυτές επιτυγχάνονται με την εισαγωγή στον θάλαμο (μέσω κεκλιμένων καναλιών εισαγωγής που επιτυγχάνουν την επιθυμητή εγκάρσια συστροφή) πεπιεσμένου και θερμανθέντος αερίου που παρέχεται από αεριοφυλάκια συνδεδεμένα με ένα σύστημα αναγεννητή θερμότητας. Το σύστημα του αναγεννητή αποτελείται από ένα πλήθος ηλεκτρικά θερμαινόμενων πλακών, όπως φαίνεται στην Εικόνα 15, και συνδέεται με τον θάλαμο καύσης. Το αέριο μπορεί να είναι άζωτο ή αέρας. Η πειραματική διάταξη μπορεί να λειτουργήσει τόσο με ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο όσο και με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Σχετικά με τη λειτουργία με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο, η πειραματική διάταξη υποστηρίζεται από σύστημα επεξεργασίας του καυσίμου, καθώς και από σύστημα προθέρμανσης του καυσίμου (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).

Για την οπτικοποίηση της μακροσκοπικής μορφολογίας του spray εντός του θαλάμου καύσης χρησιμοποιείται μια βελτιωμένη μέθοδος «απεικόνισης σκιάς» ("shadow-imaging"), που κάνει χρήση μιας παλμικής πηγής φωτός λέιζερ διόδου (pulsed diode laser light source) και ενός κατάλληλου ζωνοπερατού φίλτρου (CWL 689.1 nm, T 60%, FWHM 10.6 nm) (Herrmann et al. 2011). Ένας πολύ σύντομος παλμός λέιζερ, με χρόνο έκθεσης 1 μs μιας κάμερας CMOS-camera (20 kHz frame rate, 512x512 pixels) υψηλής ταχύτητας, παρέχει υψηλό λόγο σήματος προς θόρυβο.

Για τον εντοπισμό της περιοχής της φλόγας στις περιπτώσεις αντιδρώσας ροής, έχει προστεθεί ένας ενισχυτής υψηλής ταχύτητας, που είναι συνδεδεμένος με μια δεύτερη κάμερα υψηλής ταχύτητας, προκειμένου να καταγράφονται ταυτόχρονα σκιασμένες εικόνες (shadow images) και υπεριώδης ακτινοβολία (UV) που εκπέμπεται από την καύση (Schmid et al. 2012). Για τον προσδιορισμό της περιοχής της έναυσης και του μήκος σταθεροποίησης της φλόγας χρησιμοποιείται μια κατάλληλα διαμορφωμένη διάταξη. Παράλληλα, το ολικό ευρυζωνικό σήμα φωτός καταγράφεται με μια φωτοδίοδο, επιτρέποντας η μέτρηση της καθυστέρησης έναυσης να είναι ανεξάρτητη από τον ρυθμό εγγραφής.



Εικόνα 14. Σχηματική αναπαράσταση της διάταξης του μεγάλου θαλάμου καύσης σταθερού όγκου (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).



Εικόνα 15. Μεγάλος θάλαμος καύσης σταθερού όγκου (SCC) και αναγεννητής θερμότητας (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015).
5.2 Μοντελοποίηση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής

Οι μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής μπορούν να συμβάλουν σημαντικά στην κατανόηση και βελτιστοποίηση των φαινομένων ροής και καύσης που λαμβάνουν χώρα στους κινητήρες. Σε αυτό το πλαίσιο, χρησιμοποιούνται μοντέλα για την περιγραφή των κύριων φυσικών φαινομένων που συμβαίνουν στον κύλινδρο των κινητήρων, όπως: (α) η διάσπαση και εξάτμιση του spray, (β) η ανάμιξη του καυσίμου με τον αέρα, (γ) η έναυση και η καύση. Οι προσομοιώσεις Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής συνίστανται στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων διατήρησης της μάζας, της ορμής και της ενέργειας με την προσέγγιση Reynolds (Reynolds Averaged Navier Stokes - RANS) (Stiesch 2003, Baumgarten 2006). Στην παρούσα διατριβή, χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής ΚΙVΑ-3 για την εφαρμογή του παρόντος μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Περαιτέρω, τα φυσικά μοντέλα (διάσπασης και επεκτάθηκαν κατάλληλα για να αποδώσουν επαρκώς τα φαινόμενα που σχετίζονται με το spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.

5.2.1 Κώδικας Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής ΚΙVΑ-3

Ο κώδικας KIVA-3 αποτελεί ένα ισχυρό υπολογιστικό εργαλείο Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής για την αριθμητική επίλυση της διδιάστατης και τρισδιάστατης αντιδρώσας ροής που λαμβάνει χώρα σε κινητήρες (Amsden et al. 1989, Amsden 1992). Για παράδειγμα, η ροή στον κύλινδρο των κινητήρων είναι μια τρισδιάστατη ροή εξατμιζόμενου spray που αλληλεπιδρά με την τυρβώδη ροή του αέρα. Ταυτόχρονα, κατά τη διάρκεια της λειτουργίας του κινητήρα λαμβάνουν χώρα και άλλα φυσικοχημικά φαινόμενα όπως: (1) η ανάμιξη αέρα-καυσίμου, (2) η μεταφορά θερμότητας, (3) η έναυση και η καύση. Μερικές από τις σημαντικές δυνατότητες του κώδικα KIVA-3 συνοψίζονται παρακάτω:

- Δυνατότητα χρήσης δομημένων πλεγμάτων.
- Δυνατότητα μοντελοποίησης μη απλών γεωμετριών.
- Δυνατότητα εφαρμογής οριακών συνθηκών εισροής-εκροής, για παράδειγμα εισαγωγή αέρα στον κύλινδρο μέσω θυρίδων.
- Μοντελοποίηση της τύρβης και μεταφοράς θερμότητας προς τα τοιχώματα.
- Δυνατότητα προσομοίωσης και άλλων εφαρμογών εκτός από κινητήρες, όπως καυστήρες Bunsen, φλόγες υδρογόνου-οξυγόνου, κ.α.

Στην παρούσα διατριβή γίνεται χρήση του μοντέλου k-ε για τη μοντελοποίηση της τύρβης (Launder and Spalding 1972).

5.2.2 Υπολογιστικό πλέγμα μεγάλου θαλάμου καύσης σταθερού όγκου (SCC)

Το υπολογιστικό πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε για τις παρούσες μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής αντιστοιχεί στον μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου που αναπτύχθηκε από το Ομοσπονδιακό Πολυτεχνείο της Ζυρίχης και τη Winterthur Gas & Diesel (Herrmann et al. 2007, 2009, 2010, von Rotz 2015). Το μέγεθος του θαλάμου είναι Ø500x150 mm, και ο εγχυτήρας βρίσκεται στην περιφέρεια του κυλίνδρου, 75 mm πάνω από το κάτω μέρος του θαλάμου, δηλαδή στο μέσο επίπεδο του θαλάμου. Λαμβάνοντας υπόψη το μεγάλο μέγεθος του θαλάμου και την παρουσία εγκάρσιας συστροφής του αέρα κατά τη φορά του spray, πραγματοποιήθηκαν αρχικές προσομοιώσεις προκειμένου να εντοπιστεί η ενεργή περιοχή του spray. Ο σκοπός αυτών των προσομοιώσεων ήταν να δημιουργηθούν δομημένα πλέγματα που να μπορούν να αποδώσουν ικανοποιητικά την εξέλιξη της ροής του spray διατηρώντας το υπολογιστικό κόστος σε λογικά επίπεδα (Amsden 1992). Το τελικό υπολογιστικό πλέγμα που προέκυψε αποτελούνταν από εξηντατρία μπλοκ σταθερής αζιμουθιακής ανάλυσης 2.0 μοιρών. Στην Εικόνα 16 φαίνονται η πρόοψη και η κάτοψη του υπολογιστικού πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα διατριβή. Στην περιοχή του spray μπροστά από τον εγχυτήρα τα υπολογιστικά κελιά στην κατεύθυνση x (ακτινική) και στην κατεύθυνση z (κατακόρυφη) είχαν την ίδια προσαύξηση. Τελικά, δημιουργήθηκαν πλέγματα διαφορετικού πυκνώματος κελιών, συγκεκριμένα πλέγματα με κελιά διαστάσεων 4x4 mm, 2x2 mm και 1x1 mm στην ενεργή περιοχή του spray (βλ. Εικόνα 17). Πληροφορίες σχετικά με τα τρία υπολογιστικά πλέγματα που χρησιμοποιήθηκαν στο πλαίσιο της μελέτης επίδρασης της χωρικής διακριτοποίησης παρουσιάζονται στον Πίνακα 17 (Kontoulis et al. 2014, Kontoulis et al. 2018, Kontoulis et al. 2019).



Εικόνα 16. Πρόοψη και κάτοψη του πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε στις προσομοιώσεις της ροής spray στον μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου.



Εικόνα 17. Σκίτσο ενός υπολογιστικού κελιού στην ενεργή περιοχή του spray.

Πλέγμα (Ø500x150 mm)	Αριθμός κελιών	Ανάλυση στην περιοχή του spray (Δx=4				
Αραιό	115,000	4mm				
Πυκνό	260,000	2mm				
Πολύ Πυκνό	720,000	1mm				

Πίνακας 17. Χαρακτηριστικά των υπολογιστικών πλεγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν.

5.3 Περιπτώσεις που εξετάστηκαν

Για την περίπτωση της μη αντιδρώσας ροής του spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου εξετάστηκαν: (α) η μη-εξατμιζόμενη ροή, και (β) η εξατμιζόμενη ροή. Οι περιπτώσεις της εξατμιζόμενης ροής αντιστοιχούν σε συνθήκες και χαρακτηριστικά έγχυσης που χρησιμοποιήθηκαν στην εργασία των von Rotz et al. (2011). Στη συνέχεια, έγιναν προσομοιώσεις για την αντιδρώσα ροή του spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, οι οποίες αντιστοιχούν στα πειραματικά δεδομένα από την εργασία του von Rotz, 2015. Στις περιπτώσεις της εξατμιζόμενης μη-αντιδρώσας ροής, χρησιμοποιήθηκαν τιμές της πυκνότητας του περιβάλλοντος αερίου (άζωτο) ίσες με 11.2, 22.5 and 33.7 kg/m³, και τα αποτελέσματα αξιολογήθηκαν με βάση τα πειραματικά δεδομένα που δημοσιεύτηκαν στην εργασία των von Rotz et al. (2011). Τα πειραματικά δεδομένα αφορούν στο μήκος διείσδυσης και στη γωνία του spray (cone angle). Τέλος, έγιναν προσομοιώσεις για την περίπτωση της αντιδρώσας ροής, για πυκνότητα του περιβάλλοντος αέρα ίση με 34.7 kg/m³ και θερμοκρασίες ίσες με 915, 800 και 780 Κ. Τα αριθμητικά αποτελέσματα συγκρίθηκαν με πειραματικά δεδομένα δύο διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Τα πειραματικά δεδομένα για την αντιδρώσα ροή αφορούν στον χρόνο καθυστέρησης έναυσης και στη θέση (σημείο) της έναυσης. Όλες οι περιπτώσεις χαρακτηρίζονται από ισχυρή συστροφή του αέρα κατά την έναρξη της έγχυσης, με τις ταχύτητες να περιγράφονται από μια συνάρτηση Bessel που αντιστοιχεί σε γωνιακή ταχύτητα περιστροφής ενός στερεού σώματος ίση με 100 rad/s. Οι περιπτώσεις μη-αντιδρώσας και αντιδρώσας ροής συνοψίζονται στους Πίνακες 18 και 19, αντίστοιχα. Τα δεδομένα εισόδου που αφορούν στο σύστημα έγχυσης (Demmerle and Heim 2004), καθώς και στο καύσιμο και στις οριακές συνθήκες, παρουσιάζονται στον Πίνακα 20 (Kontoulis et al. 2014, Kontoulis et al. 2018, Kontoulis et al. 2019).

Αέριο: Άζωτο (Ν₂) – μη-αντιδρώσα ροή					
Case (Περίπτωση)	1	2	3	4	
Θερμοκρασία αερίου [Κ]	900	(evaporat	ting)	400 (non-evaporating)	
Πίεση αερίου [bar]	90	60	30	40	
Πυκνότητα αερίου [kg/m³]	33.7 22.5 11.2 33.7				
Γωνιακή ταχύτητα συστροφής [rad/s]	100 (Προφίλ συνάρτησης Bessel)				

Πίνακας 18. Υπολογισθείσες περιπτώσεις μη-αντιδρώσας ροής.

Πίνακας 19. Υπολογισθείσες περιπτώσεις αντιδρώσας ροή

Αέριο: αέρας – αντιδρώσα ροή					
Case (Περίπτωση)	5	6	7		
Θερμοκρασία αερίου [Κ]	915	800	780		
Πίεση αερίου [bar]	91.5	80	78		
Πυκνότητα αερίου [kg/m³]	34.7				
Γωνιακή ταχύτητα συστροφής [rad/s] 100 (Προφίλ συνάρτησης Bes			ης Bessel)		

Πίνακας 20. Χαρακτηριστικά έγχυσης, αρχική θερμοκρασία και θερμοκρασία τοιχώματος του μεγάλου θαλάμου καύσης σταθερού όγκου.

Σύστημα έγχυσης	Κοινού Συλλέκτη
Πίεση ψεκασμού [bar]	1000
Αριθμός οπών εγχυτήρα	1
Διάμετρος οπής εγχυτήρα [mm]	0.875
Προσανατολισμός έγχυσης	Φορά συστροφής
Θερμοκρασία προθέρμανσης βαρέος καυσίμου [°C]	120
Θερμοκρασία τοιχωμάτων [Κ]	453

5.4 Θερμοφυσικές ιδιότητες του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου

Στις προσομοιώσεις Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής η απόδοση των φυσικών μοντέλων που περιγράφουν τις διεργασίες που λαμβάνουν χώρα στον κύλινδρο των κινητήρων εξαρτάται ουσιωδώς από την ακρίβεια των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του καυσίμου. Στις παρούσες προσομοιώσεις που αφορούν σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου, το αναπτυχθέν νέο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων συναρτήσει της θερμοκρασίας. Το μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων εφαρμόστηκε για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων δύο διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν σε πειραματικές μετρήσεις. Συγκεκριμένα υπολογίστηκαν οι ιδιότητες των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a και #3, με τα δεδομένα εισόδου του μοντέλου να προέρχονται από πειραματικές μετρήσεις των εν λόγω καυσίμων. Τα δεδομένα εισόδου και οι τιμές των κύριων ιδιοτήτων του καυσίμου παρουσιάζονται στον Πίνακα 21. Τα δεδομένα για καύσιμο #1a έχουν παρουσιαστεί σε προηγούμενο κεφάλαιο, και το βαρύ συμπεριλαμβάνονται εδώ για λόγους σύγκρισης. Λεπτομερή αποτελέσματα της εφαρμογής του μοντέλου στο πλαίσιο της θερμοκρασιακής εξάρτησης των θερμοφυσικών ιδιοτήτων των καυσίμων #1a και #3 παρουσιάζονται στο αγγλικό κείμενο.

Η παρούσα μοντελοποίηση αποτυπώνει τη διαφορά στην ποιότητα του καυσίμου #3 σε σχέση με το καύσιμο #1a (Kontoulis et al. 2014, Kontoulis et al. 2019), όπως καταδεικνύουν και οι τιμές του Πίνακα 21. Οι υπολογισθείσες θερμοφυσικές ιδιότητες των δύο καυσίμων εισήχθησαν στη βιβλιοθήκη καυσίμων του κώδικα KIVA-3.

	Θερμοφυσική Ιδιότητα	HFO #1a	HFO #3	C ₁₄ H ₃₀
π	Πυκνότητα στους 288.15 Κ	1001.1 kg/m³	967.8 kg/m ³	765.7 kg/m ³
μέν δου	Κινηματικό ιξώδες στους 323.15 Κ	1255 cSt	186.8 cSt	1.841 cSt
εðο εισό	Κινηματικό ιξώδες στους 373.15 Κ	73.96 cSt	23.89 cSt	1.01 cSt
⊲ ∞	Κατά βάρος περιεκτικότητα θείου [%]	0.806%	1.8%	-
ατα	Μοριακό βάρος	554.84 gr/mole	497.79 gr/mole	198.388 gr/mole
	Ατομικός λόγος Άνθρακα προς Υδρογόνο	0.977	0.864	0.467
έσμ	Ειδική θερμοχωρητικότητα στους 298.15 Κ	1.412 KJ/kgK	1.4484 KJ/kgK	1.639 KJ/kgK
Αποτελ	Ενθαλπία σχηματισμού στους 298.15 Κ	1075 KJ/kg	597.2 KJ/kg	-1675.7 KJ/kg
	Κατώτερη Θερμογόνος Ικανότητα	40826.2 KJ/kg	40987.7 KJ/kg	44019.6 KJ/kg
	Δείκτης αρωματικότητας	851	837	-

Πίνακας 21. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων, με χρήση του αναπτυχθέντος νέου μοντέλου, για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a και #3. Περιλαμβάνονται και οι αντίστοιχες τιμές του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

5.5 Μοντελοποίηση επιμέρους διεργασιών

Στις παρούσες προσομοιώσεις η μοντελοποίηση του spray καυσίμου πραγματοποιείται με κατάλληλη προσαρμογή του μοντέλου spray CAB, ώστε να περιγράφεται με ακρίβεια τη διάσπαση του spray βαρέος καυσίμου. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή του μοντέλου CAB συγκρίθηκαν με τα αποτελέσματα του μοντέλου ΕΤΑΒ. Τα μοντέλα ΕΤΑΒ και CAB είναι επεκτάσεις του μοντέλου TAB, το οποίο εισήχθη από τους O'Rourke & Amsden (1987). Στο μοντέλο ΤΑΒ γίνεται η παραδοχή ότι η φυσική των φαινομένων που οδηγούν στη διάσπαση μιας σταγόνας υγρού μπορεί να αποδοθεί από έναν ταλαντωτή που εκτελεί εξαναγκασμένη ταλάντωση με απόσβεση. Στο αγγλικό κείμενο γίνεται μια εκτενής παρουσίαση του μοντέλου CAB, καθώς και της προσαρμογής του στο πλαίσιο της παρούσας διατριβής, με στόχο τη χρήση του στη μοντελοποίηση spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Επιπλέον, περιγράφονται το μοντέλο σύγκρουσης σταγόνων καυσίμου, καθώς και το μοντέλο εξάτμισης σταγόνας καυσίμου. Ακολούθως, περιγράφεται το μοντέλο έναυσης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που αναπτύχθηκε στην παρούσα διατριβή, καθώς και το χρησιμοποιηθέν μοντέλο καύσης χαρακτηριστικού χρόνου. Τέλος παρουσιάζονται το μοντέλο σχηματισμού οξειδίων του αζώτου, και το μοντέλο σχηματισμού και οξείδωσης σωματιδίων αιθάλης.

Κενή σελίδα

6. Μελέτη Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου

Στην παρούσα διατριβή έγινε ανάλυση των αποτελεσμάτων για διαφορετική χωρική και χρονική διακριτοποίηση (resolution tests), στο πρόβλημα της μη-αντιδρώσας ροής spray βαρέος καυσίμου στον μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου, με χρήση του μοντέλου CAB. Καταρχάς, αναλύθηκε η χωρική διακριτοποίηση, στο πλαίσιο της χρήσης τριών υπολογιστικών πλεγμάτων για την Περίπτωση 1 (Case 1, βλ. Πίνακα 18 - μη-αντιδρώσα εξατμιζόμενη ροή spray του καυσίμου #1a). Για όλα τα πλέγματα, το χρησιμοποιηθέν μέγιστο χρονικό βήμα ήταν Δt=10⁻⁵ s. Στην Εικόνα 18 παρουσιάζονται οι υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες του μήκους διείσδυσης του spray για τα τρία πλέγματα, και συγκρίνονται με τα πειραματικά δεδομένα της εργασίας των von Rotz et al. (2011). Εν γένει, υπάρχει πολύ καλή σύγκλιση μεταξύ των πειραματικών δεδομένων και των αριθμητικών αποτελεσμάτων. Με βάση τα παρόντα αποτελέσματα, επιλέχθηκε για τους περαιτέρω υπολογισμούς το πυκνό υπολογιστικό πλέγμα, αποτελούμενο από 260,000 κελιά. Τέλος, έγινε έλεγχος της επίδρασης του χρονικού βήματος, και επιλέχθηκε η τιμή Δt=10⁻⁵ s, η οποία παράγει αξιόπιστα αποτελέσματα (όπως αποτυπώνεται και στην Εικόνα 18).

Στο αγγλικό κείμενο παρουσιάζονται εκτενή αποτελέσματα της μη-αντιδρώσας και της αντιδρώσας ροής spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στον συγκεκριμένο μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου.



Εικόνα 18. Περίπτωση 1 (Case 1) (πυκνότητα αερίου ίση με 33.7 kg/m³, χρήση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a): υπολογισθέν μήκος διείσδυσης συναρτήσει του χρόνου για τρία διαφορετικά υπολογιστικά πλέγματα, με χρήση του μοντέλου CAB. Η τιμή του χρονικού βήματος είναι 10⁻⁵ s. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη πειραματική καμπύλη (von Rotz et al. 2011).

Κενή σελίδα

7. Μελέτη της καύσης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε δίχρονο ναυτικό κινητήρα με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής

Το πλαίσιο μοντελοποίησης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που αναπτύχθηκε στην παρούσα διατριβή χρησιμοποιείται σε εκτενείς μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής σε μεγάλο δίχρονο ναυτικό κινητήρα. Συγκεκριμένα, η μελέτη γίνεται για τον δίχρονο ναυτικό κινητήρα RT-flex58T-B της Winterthur Gas & Diesel Ltd (Kontoulis et al. 2019). Πραγματοποιούνται προσομοιώσεις σε έναν κύλινδρο, χρησιμοποιώντας ένα υπολογιστικό πλέγμα αποτελούμενο από 85000 κελιά. Η ακρίβεια των αριθμητικών αποτελεσμάτων που προκύπτουν από τη χρήση του συγκεκριμένου υπολογιστικού πλέγματος έχει επιβεβαιωθεί από προηγούμενες μελέτες (Stratsianis et al. 2016). Κάθε κύλινδρος διαθέτει τρείς πανομοιότυπους εγχυτήρες, οι οποίοι είναι εγκατεστημένοι συμμετρικά στην περιφέρεια της κεφαλής του κυλίνδρου. Κάθε εγχυτήρας διαθέτει πέντε οπές, διαφορετικής διαμέτρου και προσανατολισμού. Ο κινητήρας χαρακτηρίζεται από ομοιόμορφη σάρωση μίας κατεύθυνσης (uniflow scavenging), δηλαδή είναι εφοδιασμένος με μία κεντρική βαλβίδα εξαγωγής, ενώ επιτυγχάνεται ισχυρή εγκάρσια συστροφή του αέρα μέσω κατάλληλα σχεδιασμένων θυρίδων στο κάτω μέρος του χιτωνίου. Οι παρούσες προσομοιώστεις αφορούν στον κλειστό κύκλο του κινητήρα, σε πλήρες φορτίο. Τα κύρια χαρακτηριστικά του κινητήρα δίνονται στον Πίνακα 22.

Χαρακτηριστικά Κινητήρα	Τιμή
Διάμετρος εμβόλου [m]	0.58
Διαδρομή εμβόλου [m]	2.416
Ταχύτητα περιστροφής [rpm]	105
Κλείσιμο βαλβίδας εξαγωγής [°CA ATDC]	-96
Άνοιγμα βαλβίδας εξαγωγής [°CA ATDC]	120

Πίνακας 22. Χαρακτηριστικά του κινητήρα.

Στην παρούσα διατριβή οι προσομοιώσεις πραγματοποιούνται για λειτουργία με τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a και #3, και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με εκείνα του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (MDO) (Kontoulis et al. 2019). Στον Πίνακα 23 παρουσιάζονται σημαντικές παράμετροι λειτουργίας του κινητήρα, καθώς και τα χαρακτηριστικά της έγχυσης του κάθε καυσίμου, συμπεριλαμβανομένης και της θερμοκρασίας προθέρμανσης για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα. Αυτή επιλέγεται ώστε η τιμή του κινηματικού ιξώδους του εγχυόμενου βαρέος καυσίμου να είναι 13 cSt.

Πίνακας 23. Παράμετροι λειτουργίας του κινητήρα και χαρακτηριστικά έγχυσης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων #1a, #3, και του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου MDO.

Παράμετροι λειτουργίας	HFO #1a	HFO #3	MDO
Πίεση εισαγωγής [MPa]	0.352	0.352	0.352
Θερμοκρασία εισαγωγής αέρα [Κ]	330	330	330
Αρχή της έγχυσης [°CA ATDC]	1.0	1.2	2.0
Διάρκεια έγχυσης [°CA]	15.32	15.31	15.20
Ολική εγχυόμενη μάζα [% της περίπτωσης του MDO]	105.20	104.67	100
Θερμοκρασία προθέρμανσης [°C]	157	120	50

Τα προφίλ έγχυσης έχουν προσδιοριστεί για πίεση έγχυσης περί τα 1100 bar, κάνοντας χρήση της μορφής του προφίλ έγχυσης μιας περίπτωσης αναφοράς ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου. Όλες οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας την ίδια ολική ενέργεια καυσίμου, δηλαδή για όλα τα καύσιμα (#1a, #3, MDO) το γινόμενο της κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας επί τη μάζα του καυσίμου (διαφορετική για κάθε περίπτωση) ήταν το ίδιο. Συνεπώς, η διάρκεια έγχυσης για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα προκύπτει μεγαλύτερη από αυτήν για το ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Για να επιτευχθεί το ίδιο μέγιστο για την πίεση καύσης σε πλήρες φορτίο (15 MPa), η αρχή της έγχυσης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων γίνεται νωρίτερα. Αυτό είναι άμεση απόρροια του μειωμένου ρυθμού εξάτμισης και των μεγαλύτερων χρόνων καθυστέρησης έναυσης των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων (Kontoulis et al. 2019). Στην Εικόνα 19 παρουσιάζονται οι τιμές της αρχής της έγχυσης (SOI) και της ειγχυόμενης μάζας των καυσίμων. Τα αντίστοιχα προφίλ έγχυσης παρουσιάζονται στην Εικόνα 20.



Εικόνα 19. Συνολική εγχυόμενη μάζα (αριστερός y-άξονας) και αρχή της έγχυσης (SOI) (δεξιός yάξονας) συναρτήσει της κατώτερης Θερμογόνου Ικανότητας (LHV) για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a, #3 και το ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο (MDO), για προσομοιώσεις δίχρονου ναυτικού κινητήρα σε πλήρες φορτίο.



Εικόνα 20. Υπολογισθέντα προφίλ έγχυσης για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a και #3. Έχει περιληφθεί και το πειραματικό προφίλ έγχυσης του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (MDO).

Στην παρούσα διατριβή, χρησιμοποιούνται οι θερμοφυσικές ιδιότητες του δεκατετρανίου (C14H30) για τις προσομοιώσεις του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (Stratsianis et al. 2016). Στην Εικόνα 21 παρουσιάζονται τα αριθμητικά αποτελέσματα της χρονικής ιστορίας της πίεσης του κυλίνδρου για τα καύσιμα 1#a, #3 και C14H30, και συγκρίνονται με αντίστοιχα πειραματικά για λειτουργία με ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο (MDO). Όλες οι υπολογισθείσες καμπύλες χρονικής μεταβολής της πίεσης είναι πολύ κοντά μεταξύ τους, καθώς και με την πειραματική καμπύλη. Οι αντίστοιχοι κανονικοποιημένοι ρυθμοί έκλυσης θερμότητας παρουσιάζονται στην Εικόνα 22, συμπεριλαμβανομένης και της πειραματικής καμπύλης που αφορά στο βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο (de Hoog et al. 2010). Σημειώνεται ότι η πειραματική καμπύλη της χρονικής ιστορίας του ρυθμού έκλυσης θερμότητας βασίζεται σε μετρήσεις της πίεσης οι οποίες έχουν επεξεργαστεί από ένα θερμοδυναμικό μοντέλο. Όλες οι καμπύλες που παρουσιάζονται στην Εικόνα 22 χαρακτηρίζονται από δύο τοπικά μέγιστα, τα οποία σχετίζονται με την αλληλεπίδραση της ροής του spray με τη συστροφή των προϊόντων της καύσης. Οι τιμές των πρώτων τοπικών μεγίστων για τις δύο πειραματικές καμπύλες (βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο και ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο) είναι πολύ κοντά, ενώ η τιμή του δεύτερου τοπικού μέγιστου είναι μεγαλύτερη στην περίπτωση του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου. Συνολικά, η σύγκλιση των παρόντων αριθμητικών αποτελεσμάτων με τα πειραματικά δεδομένα αναφορικά με τον ρυθμό έκλυσης θερμότητας, συμπεριλαμβανομένου και του χρόνου καθυστέρησης έναυσης, είναι καλή.



Εικόνα 21. Υπολογισθείσες πιέσεις εντός του κυλίνδρου συναρτήσει της γωνίας στροφάλου για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a, #3 και το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀). Έχει περιληφθεί και η αντίστοιχη πειραματική καμπύλη για το ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο (MDO) (Stratsianis et al. 2016).



Εικόνα 22. Υπολογισθέντες ρυθμοί έκλυσης θερμότητας για τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα #1a, #3 και το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀) συναρτήσει της γωνίας στροφάλου. Έχουν περιληφθεί και οι αντίστοιχες πειραματικές καμπύλες ελαφρού και βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου (Stratsianis et al. 2016, de Hoog et al. 2010).

Στη συνέχεια, μελετάται η επίδραση της προθέρμανσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στην απόδοση του κινητήρα (Kontoulis et al. 2019). Η θερμοκρασία προθέρμανσης του καυσίμου επηρεάζει άμεσα τις τιμές του κινηματικού ιξώδους και της επιφανειακής τάσης, και έτσι τη διάδοση του spray, καθώς και την καύση. Η Εικόνα 23 παρουσιάζει τις χρονικές ιστορίες της πίεσης του ναυτιλιακού καυσίμου #1a, για τρεις τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης, συγκεκριμένα, 80 °C, 120 °C and 157 °C. Από την Εικόνα 23 καταδεικνύεται ότι η μέγιστη πίεση καύσης μειώνεται με την αύξηση του κινηματικού ιξώδους του εγχυόμενου καυσίμου. Αντιστοίχως, το ίδιο ισχύει και για τον κανονικοποιημένο ρυθμό έκλυσης θερμότητας, με το δεύτερο τοπικό μέγιστο να εξαφανίζεται στην περίπτωση του καυσίμου μέγιστου ιξώδους (βλ. Εικόνα 24). Στην περίπτωση του μέγιστου ιξώδους, η διάσπαση του spray. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα μειωμένο ρυθμό έκλυσης θερμότητας, μειωμένα επίπεδα πίεσης, καθώς και μείωση του ωφέλιμου έργου, κατά 10%. Σημειώνεται ότι παρόμοια συμπεριφορά παρατηρήθηκε και για το ναυτιλιακό καύσιμο #3.



Εικόνα 23. Υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες της πίεσης συναρτήσει της γωνίας στροφάλου του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, για τρεις τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης του βαρέος καυσίμου.



Εικόνα 24. Υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες του ρυθμού έκλυσης θερμότητας συναρτήσει της γωνίας στροφάλου του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, για τρείς τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης του βαρέος καυσίμου.

Ακολούθως, μελετάται η επίδραση της προθέρμανσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στον σχηματισμό των κύριων ρύπων (Kontoulis et al. 2019). Η μοντελοποίηση των οξειδίων του αζώτου βασίζεται σε μια τροποποιημένη διατύπωση του εκτεταμένου μηχανισμού Zeldovich (Weisser 2001). Για τη μοντελοποίηση της παραγωγής και οξείδωσης των σωματιδίων αιθάλης χρησιμοποιείται μια τροποποιημένη διατύπωση του φαινομενολογικού μοντέλου που έχει δημοσιευθεί στην εργασία των Hiroyasu et al. (1983) (Kontoulis et al. 2019, Stratsianis et al. 2016, και οι εκεί αναφορές). Στην Εικόνα 25 παρουσιάζονται οι υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες των χωρικά μέσων τιμών των συγκεντρώσεων των οξειδείων του αζώτου (NO_x) για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a και το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀), καθώς επίσης και η πειραματική τιμή της τελικής συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου στην περίπτωση χρήσης ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου. Η καύση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, με επαρκώς υψηλή θερμοκρασία προθέρμανσης (που αντιστοιχεί σε κινηματικό ιξώδες 13 cSt), χαρακτηρίζεται από υψηλότερα επίπεδα συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου σε σχέση με αυτά που προκύπτουν με χρήση ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου. Για το ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο, η τιμή της υπολογισθείσας τελικής συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου είναι πολύ κοντά στην αντίστοιχη πειραματική (Εικόνα 25). Η Εικόνα 26 παρουσιάζει τις χρονικές ιστορίες της συνολικής μάζας των σωματιδίων αιθάλης, για τις περιπτώσεις του βαρέος καυσίμου #1a και του δεκατετρανίου (C14H30). Κατά την καύση του βαρέος ναυτιλιακού καύσιμου #1a παράγονται περισσότερα σωματίδια αιθάλης σε σχέση με την περίπτωση του δεκατετρανίου (C14H30), ωστόσο, στην περίπτωση επαρκούς προθέρμανσης του βαρέος καυσίμου, οι τελικές τιμές της μάζας των σωματιδίων αιθάλης είναι περίπου οι ίδιες. Αυτό σημαίνει ότι, στην περίπτωση χρήσης επαρκώς προθερμασμένου βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, τα σωματίδια της αιθάλης οξειδώνονται με εντονότερο ρυθμό από ό,τι στην περίπτωση του δεκατετρανίου (C14H30) (Εικόνα 26). Τέλος, η συνολική μάζα των σωματιδίων αιθάλης παραμένει υψηλότερη σε όλη τη διάρκεια της διεργασίας, στην περίπτωση χρήσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου με χαμηλή θερμοκρασία προθέρμανσης (80 °C).



Εικόνα 25. Υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες μέσων χωρικών συγκεντρώσεων των οξειδίων του αζώτου (NO_x) για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμό #1a, για δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Έχουν περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀), καθώς και η πειραματική τιμή της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) για χρήση ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου.



Εικόνα 26. Υπολογισθείσες χρονικές ιστορίες της συνολικής μάζας των σωματιδίων αιθάλης για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a, για δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Έχει περιληφθεί η αντίστοιχη καμπύλη του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀).

Η Εικόνα 27 παρουσιάζει ισοϋψείς καμπύλες της θερμοκρασίας και του λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα στο οριζόντιο επίπεδο στο ύψος των εγχυτήρων, σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές, συγκεκριμένα, 8°, 10° και 20° της γωνίας στροφάλου (CA) του κινητήρα, για καύση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a και του δεκατετρανίου (C14H30). Λαμβάνοντας υπόψη ότι το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a έχει προθερμανθεί στους 157 °C και ότι η έγχυση του καυσίμου έχει εκκινήσει 1° γωνίας στροφάλου νωρίτερα σε σχέση με αυτήν του δεκατετρανίου (C14H30), ερμηνεύονται οι παρόμοιες κατανομές της θερμοκρασίας για τα δύο καύσιμα (οι τιμές της θερμοκρασίας είναι κατά τι υψηλότερες στην περίπτωση του του βαρέος καυσίμου #1a). Η παρόμοια εξέλιξης της καύσης είναι σε αντιστοιχία με τη συμφωνία στη χρονική εξέλιξη της πίεσης (βλ. Εικόνα 21). Στο πλαίσιο της αλληλεπίδρασης της ροής του spray με τη συστροφή των προϊόντων της καύσης, η οποία εκκινά λίγο πριν τις 10° γωνίας στροφάλου, σημειώνεται ότι οι τοπικές τιμές του λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα είναι μεγαλύτερες στην περίπτωση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a, σε σύγκριση με αυτές του δεκατετρανίου (C14H30). Για τον λόγο αυτόν, η συγκέντρωση του διαθέσιμου οξυγόνου μπροστά από τους τρείς εγχυτήρες είναι χαμηλότερη στην περίπτωση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a. Αυτό συμβάλλει στη μείωση της τιμής του δεύτερου τοπικού μέγιστου στην καμπύλη του ρυθμού έκλυσης θερμότητας (βλ. Εικόνα 22). Τα αποτελέσματα για θερμοκρασία προθέρμανσης του βαρέος καυσίμου #1a ίση με 80 °C παρουσιάζονται επίσης στην Εικόνα 27. Οι παρούσες στιγμιαίες απεικονίσεις καταδεικνύουν μεγαλύτερα μήκη διείσδυσης του μη επαρκώς προθερμασμένου καυσίμου, με χαμηλότερο ρυθμό εξάτμισης, που έχει ως αποτέλεσμα υψηλότερες τοπικές τιμές του λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα σε σχέση με το επαρκώς προθερμασμένο βαρύ καύσιμο και το δεκατετράνιο (C14H30). Ο χαμηλός ρυθμός εξάτμισης συμβάλλει στην καθυστέρηση της ανάμιξης και της καύσης, η οποία γίνεται πιο ισχυρή σε μεταγενέστερες γωνίες στροφάλου, οι οποίες, λόγω της αποτόνωσης, χαρακτηρίζονται από χαμηλότερα θερμοκρασιακά επίπεδα. Αντίστοιχα, στα πρώτα στάδια της καύσης προκύπτουν χαμηλότερες μέγιστες τιμές του ρυθμού έκλυσης θερμότητας και της πίεσης (βλ. Εικόνα 24 και Εικόνα 23). Όπως αποτυπώνεται στην Εικόνα 27, η καύση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a με προθέρμανση στους 80 °C χαρακτηρίζεται από χαμηλότερες τιμές των τοπικών θερμοκρασιών και υψηλότερες τοπικές τιμές του λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα, που συνάδουν με τα χαμηλά επίπεδα παραγωγής οξειδίων του αζώτου (NO_x) και τον χαμηλό ρυθμό οξείδωσης των σωματιδίων αιθάλης (βλ. Εικόνες 25 και 26).

Η Εικόνα 28 παρουσιάζει αντίστοιχες ισοϋψείς καμπύλες του μοριακού κλάσματος των οξειδίων του αζώτου (NOx) και της πυκνότητας των σωματιδίων αιθάλης για το δεκατετράνιο (C14H30) και το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a. Η Εικόνα 29 παρουσιάζει χάρτες θερμοκρασίας - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα (T-φ maps) σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές, 10°, 20° και 30° της γωνίας στροφάλου. Οι χάρτες Τ-φ αποτελούν ένα χρήσιμο εργαλείο για τον χαρακτηρισμό της καύσης στο πλαίσιο της παραγωγής των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης (χωρίς να λαμβάνεται υπόψη η οξείδωση των σωματιδίων αιθάλης) (Stratsianis et al. 2016; Kontoulis et al. 2008, και οι εκεί βιβλιογραφικές αναφορές). Στην παρούσα διατριβή, οι υπολογισθείσες τοπικές τιμές της θερμοκρασίας και του λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα παρουσιάζονται για όλα τα υπολογιστικά κελιά στον χάρτη Τ-φ, καταδεικνύοντας τις συγκεντρώσεις των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης. Όπως αποτυπώνεται και στην Εικόνα 27, υψηλότερες τιμές της θερμοκρασίας, σε μεγαλύτερη περιοχή του χάρτη, υπάρχουν στην περίπτωση της καύσης του επαρκώς προθερμασμένου ναυτιλιακού καυσίμου #1a, σε σχέση με την καύση του δεκατετρανίου (C14H30). Το αποτέλεσμα αυτό καταδεικνύει την επίδραση των διαφορών στις θερμοφυσικές ιδιότητες μεταξύ των δύο καυσίμων στα φαινόμενα ροής και καύσης που λαμβάνουν χώρα στον κινητήρα. Λόγω των υψηλών θερμοκρασιακών επιπέδων, ο ρυθμός οξείδωσης είναι υψηλότερος για το επαρκώς προθερμασμένο βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a (βλ. Εικόνα 26), συνεπώς οι διαφορές που υπάρχουν στη συγκέντρωση των σωματιδίων αιθάλης στις 15° γωνίας στροφάλου ελαττώνονται σημαντικά στις 20° γωνίας στροφάλου (Εικόνα 28).

Περαιτέρω, η καύση του επαρκώς προθερμασμένου ναυτιλιακού καυσίμου #1a χαρακτηρίζεται από υψηλότερη συγκέντρωση οξειδίων του αζώτου (NO_x) σε σχέση με αυτή του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (βλ. Εικόνα 25), γεγονός που επιβεβαιώνεται και από τη μεγαλύτερη περιοχή της παραγωγής οξειδίων του αζώτου (NO_x) στον χάρτη T-φ (Εικόνα 29). Τέλος, οι Εικόνες 28 και 29 καταδεικνύουν την αυξημένη παραγωγή σωματιδίων αιθάλης και τη μειωμένη παραγωγή οξειδίων του αζώτου (NO_x) για την περίπτωση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #1a με θερμοκρασία προθέρμανσης 80 °C, σε σχέση με τις περιπτώσεις του επαρκώς προθερμασμένου ναυτιλιακού καυσίμου #1a και του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (βλ. Εικόνες 25 και 26).



Εικόνα 27. Ισοϋψείς καμπύλες θερμοκρασίας και λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα για το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀), και το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a σε δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Για την οπτικοποίηση θεωρήθηκε ένα οριζόντιο επίπεδο κοντά στο ύψος των εγχυτήρων σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές.



Εικόνα 28. Ισοϋψείς καμπύλες του μοριακού κλάσματος των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και της πυκνότητας των σωματιδίων αιθάλης, για το δεκατετράνιο (C₁₄H₃₀), και το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a σε δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Για την οπτικοποίηση θεωρήθηκε ένα οριζόντιο επίπεδο κοντά στο ύψος των εγχυτήρων σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές.



Εικόνα 29. Χάρτες θερμοκρασίας - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου αέρα (Τ-φ maps) για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #1a σε δύο τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης και για το δεκατετράνιο (C14H₃₀). Έχουν περιληφθεί οι τιμές της θερμοκρασίας και του λόγου ισοδυναμίας καυσίμου-αέρα για όλα τα υπολογιστικά κελιά σε συγκεκριμένες χρονικές στιγμές.

8. Εφαρμογή προηγμένων στρατηγικών έγχυσης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε δίχρονο ναυτικό κινητήρα

Η μείωση των ρύπων από τη ναυτιλία, καθώς και η βελτίωση της απόδοσης των πλοίων, είναι μείζονος σημασίας για την προστασία του περιβάλλοντος και της υγείας του ανθρώπου. Για τον λόγο αυτόν, το Παράρτημα VI της σύμβασης της MARPOL έχει θεσπίσει συγκεκριμένους κανονισμούς που παρακινούν τους κατασκευαστές κινητήρων και την επιστημονική κοινότητα να βελτιώσουν τη σχεδίαση και τη λειτουργία των ναυτικών κινητήρων. Στην παρούσα διατριβή μελετάται η ταυτόχρονη μείωση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου (SFOC), της τελικής συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης για τον ναυτικό κινητήρα RT-flex58T-B, του οποίου τα χαρακτηριστικά έχουν αναφερθεί στο προηγούμενο Κεφάλαιο, με χρήση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου συνθήκες λειτουργίας πλήρους φορτίου. Η μελέτη βασίζεται στη στρατηγική έγχυσης του τριπλού παλμού (προ-, κύρια- και μετ-έγχυση). Η παρούσα μελέτη αποτελεί την πρώτη μελέτη βελτιστοποίησης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής με χρήση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.

Η εφαρμογή της στρατηγικής της προ-έγχυσης έχει ως αποτέλεσμα την καύση με ελάχιστη παραγωγή οξειδίων του αζώτου (NO_x) κοντά στο Άνω Νεκρό Σημείο (TDC) και τη δυνατότητα για μετέπειτα αραίωση του μίγματος, γεγονός που οδηγεί σε χαμηλότερες τιμές τοπικών θερμοκρασιών κατά τη διάρκεια της εκτόνωσης (expansion stroke). Για λειτουργία του κινητήρα με ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο (MDO), πρόσφατες μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής σχετικά με την επίδραση της προ-έγχυσης στην απόδοση του κινητήρα RTflex58T-B κατέδειξαν σημαντική μείωση στην ειδική κατανάλωση καυσίμου, με διατήρηση των επιπέδων των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και τάση μείωσης της συγκέντρωσης των σωματιδίων αιθάλης (Kontoulis et al. 2008). Περαιτέρω, στην εργασία των Andreadis et al. (2011) πραγματοποιήθηκε μελέτη βελτιστοποίησης του κινητήρα RT-flex58T-B με περιορισμούς. Η βελτιστοποίηση κάνει χρήση της τεχνικής του διπλού παλμού έγχυσης (προέγχυση και κύρια έγχυση), ενώ επιλύεται και πρόβλημα με περιορισμούς, συγκεκριμένα, στη μέγιστη πίεση και στο ελάχιστο ωφέλιμο έργο του κινητήρα. Από τη μελέτη των Andreadis et al. προέκυψε μείωση της τελικής συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου (NOx) της τάξης του 15% με διατήρηση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου στα ίδια επίπεδα με αυτή του συνεχούς προφίλ έγχυσης. Στη συγκεκριμένη εργασία δεν λήφθηκαν υπόψη οι εκπομπές των σωματιδίων αιθάλης στη διαμόρφωση των προβλημάτων βελτιστοποίησης. Στο πλαίσιο της χρήσης της τεχνικής καύσης μερικώς ομογενοποιημένου μίγματος, πρόσφατη μελέτη βελτιστοποίησης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής με περιορισμούς για τον κινητήρα RTflex58T-B κατέδειξε μείωση της τελικής συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου της τάξης του 15%, χωρίς αύξηση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου (Pananakis et al. 2013).

Με εφαρμογή της τεχνικής της μετέγχυσης αναμένεται να προκύψει ταυτόχρονη μείωση της τελικής συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης, αλλά και μείωση του ωφέλιμου έργου, λόγω της καθυστέρησης έγχυσης και κατ' επέκταση της καύσης. Η μείωση του ωφέλιμου έργου μπορεί να εξαλειφθεί προσαρμόζοντας κατάλληλα το προφίλ της κύριας έγχυσης. Στην εργασία των Stratsianis et al. (2016) πραγματοποιήθηκε μελέτη βελτιστοποίησης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής για τον κινητήρα RT-flex58T-B με χρήση ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου, με κύριο στόχο τη διερεύνηση της επίδρασης της μετέγχυσης στην ειδική κατανάλωση καυσίμου, καθώς και στην παραγωγή οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης. Για την περίπτωση βελτιστοποίησης με περιορισμούς (αναφορικά με τη μέγιστη πίεση και το ωφέλιμο έργο), η μελέτη των Stratsianis et al. κατέδειξε ότι οι τελικές εκπομπές οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης και 30%, αντίστοιχα, χωρίς αύξηση της ειδικής κατανάλωσης και ση μετέγχυση πραγματοποιείται αρκετά αργότερα

από την κύρια έγχυση, μειώνονται οι θερμοκρασίες στον κύλινδρο, με αποτέλεσμα τη μείωση της παραγωγής οξειδίων του αζώτου (NO_x) αλλά και τη σημαντική μείωση του ρυθμού έκλυσης θερμότητας. Περαιτέρω, η παραγωγή των σωματιδίων αιθάλης μειώνεται, καθώς δεν εισέρχεται στον θάλαμο καύσης νέο υγρό καύσιμο (αφού η κύρια έγχυση είναι μικρότερη σε διάρκεια) με αποτέλεσμα, λόγω της ισχυρής εγκάρσιας συστροφής του αέρα, να δημιουργείται ένα μίγμα πλούσιο σε αέρα μπροστά από τους εγχυτήρες. Ακολούθως, η μάζα του καυσίμου της μετέγχυσης έχει μεγαλύτερο χρόνο ανάμιξης με τον αέρα, και καίγεται σε ευνοϊκές συνθήκες τοπικής στοιχειομετρίας, με απόρροια υψηλό ρυθμό οξείδωσης των σωματιδίων αιθάλης με ελάχιστα επίπεδα παραγωγής οξειδίων του αζώτου (NO_x).

Με βάση τις εργασίες των Kontoulis et al. (2008), Andreadis et al. (2011), Pananakis et al. (2013) και Stratsianis et al. (2016), η παρούσα μελέτη πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης με και χωρίς περιορισμούς, με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, για τον κινητήρα RTflex58T-B, διερευνά την επίδραση της βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου με χρήση της τεχνικής του τριπλού παλμού (προ-, κύρια- και μετ-έγχυση) στην ειδική κατανάλωση καυσίμου και στις τελικές συγκεντρώσεις των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης. Η παρούσα τροποποιημένη έκδοση του κώδικα ΚΙVΑ-3 χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με το νέο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος καυσίμου που αναπτύχθηκε στην παρούσα διατριβή, σε σύζευξη με έναν κώδικα βελτιστοποίησης που βασίζεται σε εξελικτικούς αλγόριθμους (Evolutionary Algorithms - EAs). Για την παρούσα μελέτη χρησιμοποιήθηκε ένα αντιπροσωπευτικό βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο , του οποίου οι θερμοφυσικές ιδιότητες υπολογίστηκαν με χρήση του παρόντος μοντέλου. Το προφίλ της έγχυσης που αποτελείται από προ-, κύρια- και μετ- έγχυση παραμετροποιήθηκε κατάλληλα, με χρήση πέντε μεταβλητών σχεδίασης. Έγινε χρήση τριών αντικειμενικών συναρτήσεων, οι οποίες αντιπροσωπεύουν την ειδική κατανάλωση καυσίμου και τις τελικές συγκεντρώσεις των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με μια περίπτωση αναφοράς βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου με συνεχές προφίλ έγχυσης, και κατέδειξαν ότι είναι εφικτή η σημαντική μείωση των τελικών εκπομπών των οξειδίων του αζώτου (NOx) και των σωματιδίων αιθάλης με χρήση βέλτιστων προφίλ έγχυσης τριπλού παλμού.

8.1 Θερμοφυσικές ιδιοτήτες

Στην παρούσα μελέτη βελτιστοποίησης το αναπτυχθέν νέο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων (Kontoulis et al. 2018) εφαρμόστηκε σε μια ποιότητα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που χρησιμοποιήθηκε στον κινητήρα RT-58T-B σε δοκιμές επί θαλάσσης (sea trials). Στη συνέχεια του κειμένου το καύσιμο αυτό θα αναφέρεται ως βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #4. Οι θερμοφυσικές ιδιότητες που αποτελούν τα δεδομένα εισόδου του μοντέλου λήφθησαν από το προσωπικό αρχείο του συγγραφέα της παρούσας διατριβής. Τα δεδομένα εισόδου και οι υπολογισθείσες τιμές των κύριων θερμοφυσικών ιδιοτήτων παρουσιάζονται στην Εικόνα 30 και στον Πίνακα 24. Τέλος, οι υπολογισθείσες θερμοφυσικές ιδιότητες του βαρέος καυσίμου #4 εισήχθησαν στη βιβλιοθήκη καυσίμων του κώδικα KIVA-3.



Εικόνα 30. Μορφή Γραφικού Περιβάλλοντος (Graphical User Interface-GUI) του παρόντος μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που δημοσιεύτηκε στην εργασία των Kontoulis et al. (2018): Μετρηθείσες και υπολογισθείσες τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #4, που χρησιμοποιήθηκε σε δοκιμές επί θαλάσσης (sea trials) του ναυτικού κινητήρα (RT-58T-B). Έχουν περιληφθεί οι αντίστοιχες θερμοφυσικές ιδιότητες του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

Πίνακας 24. Πειραματικές μετρήσεις και υπολογισθείσες τιμές, με χρήση του παρόντος μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος καυσίμου (Kontoulis et al. 2018), του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #4, το οποίο χρησιμοποιήθηκε σε δοκιμές επί θαλάσσης (sea trials) του ναυτικού κινητήρα (RT-58T-B). Περιλαμβάνονται οι αντίστοιχες τιμές των ιδιοτήτων του δεκατετρανίου (C₁₄H₃₀) (API 1997).

	Θερμοφυσική ιδιότητα	HFO #4	C ₁₄ H ₃₀
α	Πυκνότητα στους 288.15 Κ	982.7 kg/m ³	765.7 kg/m ³
μέν δου	Κινηματικό ιξώδες στους 323.15 Κ	340 cSt	1.84 cSt
εðο εισό	Κινηματικό ιξώδες στους 373.15 Κ	35.4 cSt	1.01 cSt
⊿ 3	Κατα βάρος περιεκτικότητα θείου	3.73%	-
ατα	Μοριακό βάρος	520.15 gr/mole	198.39 gr/mole
	Ατομικός λόγος Άνθρακα προς Υδρογόνο	0.91	0.467
έσμ	Ειδική θερμοχωρητικότητα στους 298.15 Κ	2.30 KJ/kgK	1.639 KJ/kgK
Αποτελ	Ενθαλπία σχηματισμού στους 298.15 Κ	597.2 KJ/kg	-1675.7 KJ/kg
	Κατώτερη Θερμογόνος Ικανότητα	40155.5 KJ/kg	44019.6 KJ/kg
,	Δείκτης Αρωματικότητας	845	-

8.2 Παραμετροποίηση του προφίλ έγχυσης

παρούσα μελέτη βελτιστοποίησης OI προσομοιώσεις Υπολογιστικής Στην Ρευστοδυναμικής πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #4. Στον Πίνακα 25 παρουσιάζονται τα χαρακτηριστικά λειτουργίας του κινητήρα, καθώς και τα χαρακτηριστικά της έγχυσης για μια περίπτωση αναφοράς, με συνεχές προφίλ έγχυσης. Η δημιουργία του προφίλ έγχυσης ακολουθεί την ίδια διαδικασία που περιγράφηκε στο Κεφάλαιο 7 (βλ. Εικόνες 19 και 20). Έτσι, χρησιμοποιήθηκε η βασική μορφή της περίπτωσης αναφοράς του πειραματικού προφίλ του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (MDO) για πίεση έγχυσης περί τα 1100 bar, ενώ διατηρήθηκε το ίδιο ενεργειακό περιεχόμενο στην περίπτωση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Τα συνεχή προφίλ έγχυσης του βαρέος και του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου παρουσιάζονται στην Εικόνα 31.

Πίνακας	25.	Χαρακτηριστικά	λειτουργίας	TOU	ναυτικού	κινητήρα	και	χαρακτηριστικά έγχυσης	TOU
βαρέος ν	αυτιλ	ιακού καυσίμου #	<mark>#</mark> 4 για μια πε _ι	ρίπτι	ωση αναφα	οράς με σι	νεχέ	ές προφίλ έγχυσης.	

Χαρακτηριστικά Λειτουργίας	Τιμή
Πίεση εισαγωγής [MPa]	0.352
Θερμοκρασία εισαγωγής αέρα [Κ]	330
Αρχή έγχυσης [°CA ATDC]	1.0
Διάρκεια έγχυσης [°CA]	15.35
Ολική εγχυόμενη μάζα [% της περίπτωσης του MDO]	106.84
Θερμοκρασία προθέρμανσης βαρέος καυσίμου [°C]	135
Κινηματικό ιξώδες εγχυόμενου καυσίμου [cSt]	13.4



Εικόνα 31. Υπολογισθέν συνεχές προφίλ έγχυσης της περίπτωσης αναφοράς για το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο #4, και πειραματικό προφίλ έγχυσης ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (MDO).

Το ολικό προφίλ έγχυσης των τριών παλμών διαμορφώνεται με βάση τον ρυθμό έγχυσης και τη συνολική μάζα του καυσίμου. Η δυναμική του ανοίγματος και του κλεισίματος του

εγχυτήρα διατηρείται η ίδια σε όλες τις περιπτώσεις, σε συμφωνία με το προφίλ έγχυσης της περίπτωσης αναφοράς. Επιπλέον, ο μέγιστος ρυθμός της έγχυσης, που επηρεάζεται άμεσα από την πίεση έγχυσης, παραμένει ο ίδιος. Έτσι, το προφίλ του τριπλού παλμού μπορεί να προσδιοριστεί από πέντε μεταβλητές σχεδίασης:

(i) Αρχή της προέγχυσης (SOPil) σε μοίρες γωνίας στροφάλου [deg.]

(ii) Κλάσμα μάζας της προέγχυσης (PiMF) [%], που αντιστοιχεί στο ποσοστό της συνολικής εγχυόμενης μάζας κατά την προέγχυση

(iii) Χρόνος μεσολάβησης από την προέγχυση (PiDwell) σε μοίρες γωνίας στροφάλου [deg.], αντιστοιχεί στον χρόνο μεταξύ της προέγχυσης και της κύριας έγχυσης

(iv) Χρόνος μεσολάβησης από την κύρια έγχυση (PoDwell) σε μοίρες γωνίας στροφάλου [deg.], αντιστοιχεί στον χρόνο μεταξύ της κύριας έγχυσης και της μετέγχυσης

(v) Κλάσμα μάζας της μετέγχυσης (PoMF) [%], που αντιστοιχεί στο ποσοστό της συνολικής εγχυόμενης μάζας κατά τη μετέγχυση.

Σημειώνεται ότι στην παρούσα μελέτη βελτιστοποίησης η συνολική μάζα του εγχυόμενου καυσίμου είναι ίδια με αυτήν του συνεχούς προφίλ έγχυσης του βαρέος καυσίμου #4. Οι προαναφερθείσες πέντε μεταβλητές σχεδίασης του προφίλ έγχυσης χρησιμοποιήθηκαν ως οι μεταβλητές σχεδίασης των προβλημάτων βελτιστοποίησης, και παρουσιάζονται στο γράφημα του προφίλ έγχυσης της Εικόνας 32.



Εικόνα 32. Σχηματική αναπαράσταση του προφίλ έγχυσης τριπλού παλμού με προ-, κύρια- και μετέγχυση. Οι πέντε μεταβλητές σχεδίασης: (1) Αρχή της προέγχυσης (2) Κλάσμα μάζας της προέγχυσης, (3) Χρόνος μεσολάβησης από την προέγχυση, (4) Χρόνος μεσολάβησης από την κύρια έγχυση, και (5) Κλάσμα μάζας της μετέγχυσης (SOPil, PiMF, PiDwell, PoDwell, PoMF) υποδεικνύονται με βέλη.

8.3 Διαμόρφωση προβλημάτων βελτιστοποίησης

Στην παρούσα μελέτη βελτιστοποίησης σχηματίστηκαν προβλήματα με και χωρίς περιορισμούς προκειμένου να διερευνηθούν οι επιδράσεις του προφίλ τριπλού παλμού στην απόδοση και τις εκπομπές ρύπων του κινητήρα. Ο στόχος των προβλημάτων βελτιστοποίησης της παρούσας μελέτης είναι η εύρεση κατάλληλων προφίλ έγχυσης τριπλού παλμού προκειμένου να μειώνονται ταυτόχρονα η ειδική κατανάλωση καυσίμου και οι εκπομπές οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης. Για τον λόγο αυτόν, ο κώδικας KIVA-3, όπως τροποποιήθηκε στην παρούσα διατριβή για προσομοιώσεις με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο, συζεύχθηκε με το λογισμικό βελτιστοποίησης EASY, που βασίζεται σε Εξελικτικούς Αλγορίθμους (Karakasis & Giannakoglou 2006, Kampolis & Giannakoglou 2008).

Οι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι ανήκουν στην κατηγορία των ημι-στοχαστικών μεθόδων βελτιστοποίησης, και βασίζονται στη θεωρία της φυσικής επιλογής του Δαρβίνου. Στο πλαίσιο των Εξελικτικών Αλγόριθμων, δημιουργούνται και αξιολογούνται διαδοχικές γενεές. Κάθε γενεά αποτελείται από υποψήφιες λύσεις που αποκαλούνται άτομα (ή χρωμοσώματα). Τα άτομα δημιουργούνται από γονίδια, τα οποία είναι οι μεταβλητές σχεδίασης του προβλήματος, κωδικοποιημένα σε δυαδική μορφή με αναπαράσταση δεκαδικών ψηφίων και διατεταγμένα σε πίνακες χαρακτήρων δυαδικής μορφής (bit strings). Στην βελτιστοποίηση της έγχυσης, οι μεταβλητές σχεδίασης καθορίζουν πλήρως το προφίλ της έγχυσης (Andreadis et al. 2011, Pananakis et al. 2013, Stratsianis et al. 2016). Στην παρούσα μελέτη βελτιστοποίησης, καθεμία από τις πέντε μεταβλητές σχεδίασης είναι κωδικοποιημένη σε έναν πίνακα χαρακτήρων δυαδικής μορφής (bit string) μήκους 10 δυαδικών ψηφίων. Συνεπώς, το συνολικό μήκος ενός ατόμου είναι 5 x 10 = 50 δυαδικά ψηφία.

Ο αρχικός πληθυσμός των ατόμων δημιουργείται τυχαία από μια γεννήτρια Ψεύδο-Τυχαίων αριθμών (Pseudo-Random-Number Generator - PRNG). Για όλες τις γενεές, τα άτομα αξιολογούνται από τις τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων που προκύπτουν από τις προσομοιώσεις του κώδικα KIVA-3. Με βάση τις τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων, τα άτομα ταξινομούνται, και αυτά που έχουν υψηλή θέση επιλέγονται ώστε να αποτελέσουν τους γονείς του επόμενου ατόμου (παιδιού). Στην παρούσα μελέτη βελτιστοποίησης, κάθε γενεά αποτελείται από 120 άτομα, 30 από τα οποία επιλέγονται ως γονείς, δημιουργώντας παιδιά με βάση την ομοιόμορφη διασταύρωση και τη μετάλλαξη. Εδώ, η διαδικασία διήρκεσε μέχρι την παραγωγή 15 γενεών για το πρόβλημα χωρίς περιορισμούς (15 x 120 = 1800 άτομα), και 14 γενεών για το πρόβλημα με περιορισμούς (14 x 120 = 1680 άτομα). Τα δύο προβλήματα (με και χωρίς περιορισμούς) επιλύθηκαν για τρείς διαφορετικές αρχικοποιήσεις του αρχικού πληθυσμού. Για τις τρείς αρχικοποιήσεις το τελικό μέτωπο Pareto κάθε προβλήματος (με ή χωρίς περιορισμούς) προέκυψε το πρακτικά το ίδιο. Για κάθε προσομοίωση του κώδικα KIVA-3 απαιτήθηκαν 9.5 ώρες σε έναν πυρήνα CPU 1.8 GHz. Τα χαρακτηριστικά των Εξελικτικών Αλγορίθμων που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα εργασία παρουσιάζονται στον Πίνακα 26.

Μέθοδος	Πληθυσμός γονέων	Πληθυσμός παιδιών	Γονείς ενός παιδιού	Πιθανότητα μετάλλαξης	Πιθανότητα διασταύρωσης	Πιθανότητα ελιτισμού		
Εξελικτοί Αλγόριθμοι	30	120	3	0.33	0.95	0.1		

Πίνακα	ς 26. Βασικά	χαρακτηριστικά	της διαδικα	ασίας βελτιστα	οποίησης με	ε Εξελικτικούς	Αλγορίθμους
--------	---------------------	----------------	-------------	----------------	-------------	----------------	-------------

8.3.1 Μεταβλητές σχεδίασης

Οι μεταβλητές σχεδίασης της παρούσας πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης είναι οι πέντε παράμετροι που καθορίζουν το προφίλ τριπλού παλμού. Η επιλογή του χώρου των λύσεων για κάθε μεταβλητή σχεδίασης έγινε με κατάλληλη προσαρμογή των αποτελεσμάτων που προέκυψαν από μελέτες βελτιστοποίησης στον κινητήρα RT-flex58T-B, με χρήση ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (Andreadis et al. 2011, Pananakis et al. 2013, Stratsianis et al. 2016). Έτσι, επιλέχθηκαν τα παρακάτω όρια:

 $-5^{\circ} \leq SOPiI \leq 5^{\circ}$

 $1\% \le PiMF \le 50\%$

 $0.5^{\circ} \le PiDwell \le 20^{\circ}$ (35)

 $0.5^{\circ} \leq PoDwell \leq 10^{\circ}$

 $1\% \le PoMF \le 30\%$

Τα χαρακτηριστικά της δυαδικής κωδικοποίησης, συμπεριλαμβανομένης και της ακρίβειας, για τις πέντε μεταβλητές σχεδίασης, παρουσιάζονται στον Πίνακα 27.

Πίνακας 27. Χαρακτηριστικά δυαδικής κωδικοποίησής των μεταβλητών σχεδίασης. Περιλαμβάνεται και η ακρίβεια των μεταβλητών σχεδίασης.

Δυαδική	Μεταβλητές σχεδίασης του προφίλ έγχυσης							
κωδικοποίηση	SOPil [deg.]	PiMF [%]	PiDwell [deg.]	PoDwell [deg.]	PoMF [%]			
Δυαδικά ψηφία	8	12	9	8	12			
Ακρίβεια	0.04	0.012	0.04	0.04	0.007			

8.3.2 Αντικειμενικές συναρτήσεις

παρούσα χρησιμοποιούνται τρεις αντικειμενικές συναρτήσεις. Στην διατριβή, Συγκεκριμένα, μια εκτίμηση της τιμής της ειδικής κατανάλωσης του βαρέος καυσίμου, καθώς και οι τελικές συγκεντρώσεις των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης. Όλες οι τιμές των αντικειμενικών συναρτήσεων είναι σε αδιάστατη μορφή. Η αδιαστοτοποίηση πραγματοποιείται με τις αντίστοιχες τιμές της περίπτωσης αναφοράς (συνεχές προφίλ έγχυσης) του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #4. Στον υπολογισμό της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου λαμβάνεται υπόψη το ωφέλιμο έργο του κλειστού κύκλου του κινητήρα. Συνεπώς, η ειδική κατανάλωση καυσίμου υπολογίζεται ως ο λόγος της συνολικής εγχυόμενης μάζας του καυσίμου προς το συνολικό έργο, και κανονικοποιείται με την αντίστοιχη τιμή της περίπτωσης αναφοράς. Σημειώνεται ότι οι επιδράσεις του ανοιχτού κύκλου του κινητήρα δεν λαμβάνονται υπόψη στη διαμόρφωση των συγκεκριμένων προβλημάτων βελτιστοποίησης. Αυτές μπορεί να επηρεάσουν τις συνθήκες εισαγωγής, καθώς και την ειδική κατανάλωση καυσίμου λόγω αλληλεπιδράσεων με τον στροβιλοϋπερπληρωτή. Έτσι, τα παρόντα αποτελέσματα υπόκεινται σε αυτούς τους περιορισμούς.

8.3.3 Περιορισμοί

Στην παρούσα εργασία, επιλύονται δύο προβλήματα βελτιστοποίησης: (i) Πρόβλημα χωρίς περιρισμούς, με στόχο την ελαχιστοποίηση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου και των εκπομπών ρύπων. (ii) Πρόβλημα με περιορισμούς, με τις ίδιες αντικειμενικές συναρτήσεις όπως στο πρόβλημα (ι), με επιβολή άνω ορίου για τη μέγιστη πίεση (για την αποφυγή της μηχανικής καταπόνησης του κινητήρα) και κάτω ορίου στο έργο ανά κύκλο του κινητήρα (για τη διασφάλιση της ελάχιστης απαιτούμενης ισχύος του κινητήρα). Τα όρια που επιβλήθηκαν ήταν 15 MPa για τη μέγιστη πίεση, τιμή που προτείνεται από τον κατασκευαστή του κινητήρα, και το έργο της περίπτωσης αναφοράς του βαρέος καυσίμου #4 για το ελάχιστο έργο. Για να καταστεί δυνατή η σύγκλιση σε επαρκή αριθμό λύσεων, ο περιορισμός υπόκειται σε χαλάρωση (1%).

8.4 Αποτελέσματα βελτιστοποίησης

Στην παρούσα διατριβή, πραγματοποιήθηκε μελέτη βελτιστοποίησης με χρήση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου για τον ναυτικό κινητήρα RT-flex58T-B σε πλήρες φορτίο. Η διαδικασία βελτιστοποίησης βασίζεται στην εύρεση ενός κατάλληλου προφίλ έγχυσης τριπλού παλμού. Με χρήση του αναπτυχθέντος μοντέλου, υπολογίστηκαν οι θερμοφυσικές ιδιότητες του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου #4. Έγινε χρήση τριών αντικειμενικών συναρτήσεων, συγκεκριμένα: (1) μιας εκτιμώμενης τιμής της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, (2) της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x), και (3) της τελικής συγκέντρωσης των σωματιδίων αιθάλης. Οι αντικειμενικές συναρτήσεις κανονικοποιήθηκαν με τις αντίστοιχες τιμές της περίπτωσης αναφοράς (συνεχές προφίλ έγχυσης). Ο στόχος της βελτιστοποίησης είναι η εύρεση των μη-κυριαρχούμενων λύσεων, οι οποίες συνιστούν το μέτωπο Pareto. Εδώ, έγινε βελτιστοποίηση χωρίς και με περιορισμούς. Στη συνέχεια παρουσιάζονται και σχολιάζονται τα αποτελέσματα που προέκυψαν.

8.4.1 Βελτιστοποίηση χωρίς περιορισμούς

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς της παρούσας εργασίας διαμορφώθηκε ως εξής:

$$\begin{cases} objective \ function : \min \vec{F}(\vec{x}) = (NO_x(\vec{x}), soot(\vec{x}), SFOC(\vec{x}))^T \\ \vec{x} = (SOPiI, \ PiMF, PiDwell, PoDwell, \ PoMF) \end{cases}$$
(36)

Στην Εικόνα 33 παρουσιάζεται το μέτωπο Pareto σχετικά με τις κανονικοποιημένες τιμές της συγκέντρωσης των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου για το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς, ενώ στην Εικόνα 34 παρουσιάζεται το μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές των σωματιδίων αιθάλης και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου. Στις δύο απεικονίσεις του μετώπου Pareto είναι σημειωμένες οι ακραίες λύσεις της Περίπτωσης A (Case A) και της Περίπτωσης B (Case B). Η Περίπτωση A (Case A) χαρακτηρίζεται από μέγιστη αύξηση των εκπομπών NOx, μεγέθους 21%, με ταυτόχρονη μείωση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, τάξης 1.7%, και μείωση των εκπομπών σωματιδίων αιθάλης 10%, σε σχέση με την περίπτωση αναφοράς. Η μηχανική καταπόνηση στην Περίπτωση A (Case A) είναι μεγαλύτερη από την επιτρεπόμενη (το όριο του κινητήρα είναι: μέγιστη επιτρεπόμενη πίεση 15 MPa), καθώς η υπολογισθείσα μέγιστη πίεση είναι 16.6 MPa. Η Περίπτωση Β (Case B) χαρακτηρίζεται από μείωση της παραγωγής οξειδίων του αζώτου (NOx) κατά 7.5%, με ταυτόχρονη αύξηση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου κατά 33% και των εκπομπών των σωματιδίων αιθάλης κατά 292%, σε σχέση με την περίπτωση αναφοράς. Η μέγιστη πίεση του κινητήρα στην Περίπτωση B (Case B) προκύπτει 14.3 MPa. Οι συγκεκριμένες δύο ακραίες λύσεις σημειώνονται επίσης στην Εικόνα 35, η οποία παρουσιάζει το μέτωπο Pareto του προβλήματος χωρίς περιορισμούς σχετικά με τις κανονικοποιημένες τιμές των συγκεντρώσεων των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης. Το μέτωπο Pareto καταδεικνύει την ασυμβατότητα της ταυτόχρονης ελάττωσης των οξειδίων του αζώτου (NOx) και των σωματιδίων αιθάλης.

Εκτενή αποτελέσματα του προβλήματος βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς παρουσιάζονται στο αγγλικό κείμενο.



Εικόνα 33. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς.



Εικόνα 34. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης σωματιδίων αιθάλης και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς.



Εικόνα 35. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης, για το πρόβλημα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς.

8.4.2 Βελτιστοποίηση με περιορισμούς

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμούς της παρούσας εργασίας διαμορφώθηκε ως εξής:

$$\begin{cases} objective \ function : \min \vec{F}(\vec{x}) = \left(NO_{x}(\vec{x}), soot(\vec{x}), SFOC(\vec{x})\right)^{T} \\ constraints : \ \vec{g}(\vec{x}) = \left(P_{\max}(\vec{x}), W(\vec{x})\right) \\ \vec{x} = \left(SOPiI, \ PiMF, PiDwell, PoDwell, \ PoMF\right) \end{cases}$$
(37)

Στην Εικόνα 36 παρουσιάζονται τα μέτωπα Pareto

σχετικά με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου για τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς και με περιορισμούς. Στην Εικόνα 37 παρουσιάζονται τα μέτωπα Pareto σχετικά με τις κανονικοποιημένες τιμές των σωματιδίων αιθάλης και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου για τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς και με περιορισμούς. Η αντίρροπη τάση σχετικά με τις την ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης και με περιορισμούς. Η αντίρροπη τάση σχετικά με την ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης απεικονίζεται στην παρουσίαση των μετώπων Pareto της Εικόνας 38. Όλες οι βέλτιστες λύσεις του προβλήματος με περιορισμούς χαρακτηρίζονται από προέγχυση πριν το Άνω Νεκρό Σημείο (TDC) (SOPil<0 deg.), σε συμφωνία με τα αποτελέσματα του προβλήματος βελτιστοποίησης χωρίς. Η προκύπτουσα λύση που χαρακτηρίζεται ως Περίπτωση C (Case C) έχει καλύτερα χαρακτηριστικά εκπομπών σύπων σε σχέση με την παρίπτωση αναφοράς, καθώς επιτυγχάνεται ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών σωματιδίων του αζώτου (NO_x), κατά 15%, και μείωση των εκπομπών σωματιδίων αιθάλης, κατά 11%, διατήρησης της ειδικής κατανάλωσης στα ίδια επίπεδα (μείωση του έργου τάξης 1%), με τη μέγιστη πίεση ελαφρώς χαμηλότερη από το άνω όριο των 15.0 MPa.

Εκτενή αποτελέσματα του προβλήματος βελτιστοποίησης με περιορισμούς παρουσιάζονται στο αγγλικό κείμενο.



Εικόνα 36. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς και με περιορισμούς.



Εικόνα 37. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης των σωματιδίων αιθάλης και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς και με περιορισμούς.



Εικόνα 38. Μέτωπο Pareto σε σχέση με τις κανονικοποιημένες τιμές της τελικής συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης, για τα προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς και με περιορισμούς.

9. Καινοτομία και προσφορά στην επιστημονική έρευνα

9.1 Προτεινόμενη μεθοδολογία

Στην παρούσα διατριβή εισήχθη η ακόλουθη μεθοδολογία στο πλαίσιο της υπολογιστικής μελέτης της ροής και καύσης σε μεγάλους ναυτικούς κινητήρες που λειτουργούν με χρήση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου:

 Ανάπτυξη και αξιολόγηση ενός ολοκληρωμένου μοντέλου για την παραγωγή των θερμοφυσικών ιδιοτήτων οποιασδήποτε ποιότητας βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου για εφαρμογή σε μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής σε ναυτικούς κινητήρες (Kontoulis et al. 2018). Το αναπτυχθέν νέο υπολογιστικό εργαλείο είναι διαθέσιμο και με τη μορφή Γραφικού Περιβάλλοντος (GUI format - βλ. Εικόνα 39).



Εικόνα 39. Γραφικό περιβάλλον του μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που δημοσιεύτηκε στην εργασία των Kontoulis et al. (2018).

- Κατάλληλη επέκταση της βιβλιοθήκης καυσίμων του κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής KIVA-3 με βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα διαφόρων ποιοτήτων.

- Κατάλληλη προσαρμογή του μοντέλου spray CAB. Εφαρμογή στον κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής KIVA-3 για υπολογισμούς ροής spay βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.

 Εισαγωγή ενός νέου μοντέλου χημικής κινητικής, ώστε να λαμβάνεται υπόψη η αρωματικότητα του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στους υπολογισμούς έναυσης. Εφαρμογή στον κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής KIVA-3 (Kontoulis et al. 2019).

- Εφαρμογή του προφίλ έγχυσης τριπλού παλμού (προ-, κύρια- και μετ- έγχυση) για μελέτες βελτιστοποίησης σε ναυτικούς κινητήρες, με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής.
9.2 Καινοτομία της παρούσας διατριβής

Τα μοντέλα που αναπτύχθηκαν στο πλαίσιο της παρούσας διατριβής εφαρμόστηκαν σε μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής ροής και καύσης σε ναυτικούς κινητήρες, για λειτουργία με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Τα βασικά καινοτόμα στοιχεία της παρούσας διατριβής μπορούν να συνοψιστούν ως ακολούθως:

Το νέο ολοκληρωμένο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου υπολογίζει με ακρίβεια ένα σύνολο θερμοφυσικών ιδιοτήτων που είναι απαραίτητες για μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, συγκεκριμένα: το μοριακό βάρος, το κανονικό σημείο βρασμού, τον λόγο άνθρακα προς υδρογόνο, τις ψευδο-κρίσιμες τιμές της πίεσης και της θερμοκρασίας, την κατώτερη Θερμογόνο Ικανότητα, την ενθαλπία σχηματισμού, την ειδική θερμοχωρητικότητα, τον δείκτη αρωματικότητας, τον παράγοντα Watson, τον ακεντρικό παράγοντα, καθώς επίσης και τη θερμοκρασιακή εξάρτηση της πυκνότητας, του κινηματικού ιξώδους, της τάσης ατμών, της λανθάνουσας θερμότητας, της επιφανειακής τάσης, του συντελεστή διάχυσης μάζας, και της αισθητής ενθαλπίας. Σχετικά αποτελέσματα υπολογισμού θερμοφυσικών ιδιοτήτων για τέσσερις διαφορετικές ποιότητες βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, καθώς επίσης και για τις ποιότητες βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που περιγράφονται στο διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010, 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK και 700RMK, δημοσιεύτηκαν σε πρόσφατη εργασία (Kontoulis et al. 2018).

- Το αναπτυχθέν μοντέλο χρησιμοποιήθηκε στη μελέτη, με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής, της μη-αντιδρώσας και της αντιδρώσας ροής spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε θάλαμο καύσης σταθερού όγκου, σε συνθήκες παρόμοιες με αυτές που επικρατούν σε μεγάλους ναυτικούς κινητήρες. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα προέκυψαν σε πολύ καλή συμφωνία με αντίστοιχα πειραματικά. Η παρούσα υπολογιστική μελέτη κατέδειξε τη χαμηλή τάση εξάτμιση του βαρέος καυσίμου, καθώς και την επίδραση της προθέρμανσης του καυσίμου στην ανάπτυξη και δομή του spray (Kontoulis et al. 2019).

- Διαμορφώθηκε μια περίπτωση αναφοράς για τη μελέτη της ροής και καύσης στον ναυτικό κινητήρα RT-flex58T-B για λειτουργία με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο, χαρακτηριζόμενη από συνεχές προφίλ έγχυσης καυσίμου. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα προέκυψαν σε πολύ καλή συμφωνία με αντίστοιχα πειραματικά αναφορικά με την πίεση, τον ρυθμό έκλυσης θερμότητας και τις εκπομπές ρύπων. Στη μελέτη συμπεριλήφθηκε και η επίδραση της προθέρμανσης του βαρέος κασυίμου (Kontoulis et al. 2019).

- Διατυπώθηκαν και επιλύθηκαν προβλήματα πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης της λειτουργίας του ναυτικού κινητήρα RT-flex58T-B με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο, με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής. Εδώ, έγινε χρήση τριπλού παλμού έγχυσης (προ-, κύρια-, μετ-έγχυση), με στόχο την ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών ρύπων και της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου, για πρόβλημα χωρίς περιορισμούς και για πρόβλημα με περιορισμούς. Για το πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμούς, επιτεύχθηκε, σε σχέση με την περίπτωση αναφοράς, μείωση 15% στα οξείδια του αζώτου και 11% στα σωματίδια αιθάλης, αντίστοιχα, χωρίς αύξηση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου.

9.3 Δημοσιεύσεις σε Επιστημονικά Περιοδικά

Ο κύριος όγκος της παρούσας διδακτορικής διατριβής έχει δημοσιευτεί στις ακόλουθες εργασίες σε επιστημονικά περιοδικά:

- [1] 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, DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000576.
- [2] Kontoulis, P., Kaiktsis, L., von Rotz, B., and Boulouchos, K. (2019). "CFD modeling and experimental spray studies for different Heavy Fuel Oil qualities with respect to large twostroke marine engines", J. Energy Eng., in press, DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000610.

Ο συγγραφέας της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι συν-συγγραφέας στην ακόλουθη δημοσίευση:

[3] Stratsianis, V., Kontoulis, P., and Kaiktsis, L. (2016). "Effects of fuel post injection on the performance and pollutant emissions of a large marine engine", J. Energy Eng., 142(2), E4016001 1-19, DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000337.

9.4 Δημοσιεύσεις σε Επιστημονικά Συνέδρια

Από την παρούσα διδακτορική διατριβή έχουν προκύψει δύο δημοσιεύσεις σε διεθνή συνέδρια με κρίση στο πλήρες κείμενο, και μία παρουσίαση Poster:

- [1] Kontoulis, P., D. Kazangas, and Kaiktsis, L. (2013). "A new model for marine Heavy Fuel Oil thermophysical properties: validation in a constant volume spray chamber", Paper No 63, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Chania, Greece.
- [2] Kontoulis, P., Kaiktsis, L., von Rotz, B., Schmid, A., Weisser, G., Herrmann, K., and Boulouchos, K. (2014). "CFD and experimental studies of Heavy Fuel Oil sprays for marine engine applications", Paper No ABS-288, 26th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Bremen, Germany.
- [3] Kontoulis, P., D. Kazangas, and Kaiktsis, L. (2015). "Development and validation of a new model for marine Heavy Fuel Oil thermophysical properties", Poster session, 5th Annual TRC – Idemitsu Workshop, Abu Dhabi, UAE.

Ο συγγραφέας της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι συν-συγγραφέας στην ακόλουθη δημοσίευση σε διεθνές συνέδριο με κρίση στο πλήρες κείμενο:

[4] Pananakis, E., Kontoulis, P., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2013). "Investigation of fuel injection strategies for partially premixed compression ignition combustion in two-stroke marine diesel engines", Paper No 72, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Chania, Greece.

10. Συμπεράσματα

Τα βαρέα ναυτιλιακά καύσιμα είναι προϊόντα της ανάμιξης των βαρέων αποσταγμάτων του πετρελαίου με τα ελαφρά. Η ποιότητα των διαθέσιμων σύγχρονων βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων συνεχώς φθίνει, λόγω των περίπλοκων διεργασιών που υιοθετούν τα διυλιστήρια για να ενισχύσουν την παραγωγή σε ελαφρά κλάσματα του πετρελαίου. Η κακή ποιότητα των βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων δημιουργεί προβλήματα διαχείρισης του καυσίμου επί πλοίου, καθώς και προβλήματα έναυσης και καύσης κατά τη χρήση του στους ναυτικούς κινητήρες.

Είναι γενικώς αποδεκτό ότι σήμερα η Υπολογιστική Ρευστοδυναμική μπορεί να συμβάλει ουσιαστικά στην κατανόηση και βελτιστοποίηση της αεροθερμοχημείας σε εφαρμογές κινητήρων. Εν προκειμένω, σημαντικές επιμέρους διεργασίες είναι η διάσπαση του spray καυσίμου, η εξάτμισή του, η ανάμιξη του καυσίμου με τον αέρα, η έναυση και η καύση. Η ακρίβεια των προσομοιώσεων Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής εξαρτάται άμεσα από τις θερμοφυσικές ιδιότητες του χρησιμοποιούμενου καυσίμου. Ο υπολογισμός των τιμών των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, το οποίο είναι το κύριο ναυτιλιακό καύσιμο, αποτελεί αντικείμενο έρευνας εξαιρετικής δυσκολίας, λόγω της φύσης (σύστασης) του καυσίμου. Έτσι, ο υπολογισμός αυτός σε μέχρι τώρα μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής είναι ελλιπής. Για παράδειγμα, ως προσέγγιση των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, έχουν ληφθεί αυτές του εικοσανίου (C20H42), ενώ σε άλλες μελέτες, οι τιμές αρκετών θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, όπως το κινηματικό ιξώδες, η λανθάνουσα θερμότητα κ.α., θεωρούνται ως σταθερές, χωρίς να λαμβάνεται υπόψη η θερμοκρασιακή εξάρτηση αυτών. Έτσι, στο πλαίσιο της παρούσας διατριβής, έγινε ένα ουσιαστικό βήμα προς την πληρέστερη αποτύπωση των θερμοφυσικών ιδιοτήτων του βαρέος ναυτικού καυσίμου, με την ανάπτυξη ενός ολοκληρωμένου μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Ένας κύριος στόχος της παρούσας έρευνας ήταν η δημιουργία ενός γενικευμένου υπολογιστικού εργαλείου, το οποίο να μπορεί να αναπαράγει τις θερμοφυσικές ιδιότητες οποιασδήποτε ποιότητας βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Για τον σκοπό αυτόν, αναπτύχθηκε ένα νέο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων, με βάση την παραδοχή ότι το βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο είναι ένα βαρύ απόσταγμα πετρελαίου, με μη προσδιορισμένη σύνθεση. Το μοντέλο βασίζεται στην προσέγγιση του μονοσυστατικού υγρού μη προσδιορισμένης σύστασης, και απαιτεί ως είσοδο τέσσερις τιμές θερμοφυσικών ιδιοτήτων που χαρακτηρίζουν το υπό μελέτη βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο, και είναι διαθέσιμες κατά την πετρέλευση. Συγκεκριμένα, αυτές είναι μία τιμή της πυκνότητας (σε δεδομένη θερμοκρασία), δύο τιμές του κινηματικού ιξώδους (σε δύο τιμές της θερμοκρασίας), και η επί τοις εκατό κατά βάρος περιεκτικότητα σε θείο. Τα αποτελέσματα από την εφαρμογή του μοντέλου είναι ένα ευρύ φάσμα θερμοφυσικών ιδιοτήτων, συμπεριλαμβανόμενης της θερμοκρασιακής εξάρτησης αυτών. Η αξιολόγηση του μοντέλου έγινε με διενέργεια πειραματικών μετρήσεων των θερμοφυσικών ιδιοτήτων δύο βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων, τα οποία μάς παραχωρήθηκαν για τους σκοπούς της παρούσας διατριβής από τις εταιρείες Winterthur Gas & Diesel και SGS Greece. Το πρώτο δείγμα βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου έχει χρησιμοποιηθεί σε πρόσφατες πειραματικές μετρήσεις της ροής του spray, ενώ το δεύτερο είναι ένα αντιπροσωπευτικό βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο που χρησιμοποιείται ευρέως στους ναυτικούς κινητήρες. Επιπλέον, τα αποτελέσματα του μοντέλου συγκρίθηκαν με πειραματικά δεδομένα της βιβλιογραφίας, καθώς επίσης και με τις θερμοφυσικές ιδιότητες του δεκατετρανίου (C14H30). Ακολούθως, το μοντέλο χρησιμοποιήθηκε για την παραγωγή των θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων που προδιαγράφονται από το διεθνές πρότυπο ISO 8217:2010, συγκεκριμένα, των ποιοτήτων του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου 10RMA, 30RMB, 80RMD, 180RMG, 380RMK, 500RMK and 700RMK.

Τα αποτελέσματα του μοντέλου συγκρίθηκαν με πειραματικές μετρήσεις, αναφορικά με την πυκνότητα, το κινηματικό και δυναμικό ιξώδες και την κατώτερη Θερμογόνο Ικανότητα, με σχεδόν πλήρη ταύτιση των τιμών. Καλή σύγκλιση μεταξύ πειραματικών μετρήσεων και υπολογιστικών αποτελεσμάτων παρατηρήθηκε για την επιφανειακή τάση. Η σύγκλιση είναι επίσης καλή και για όλες τις άλλες θερμοφυσικές ιδιότητες που προλέγονται από το μοντέλο.

Στη συνέχεια, το μοντέλο εφαρμόστηκε για την παραγωγή των θερμοφυσικών ιδιοτήτων δύο διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, που χρησιμοποιήθηκαν σε πειραματικές μετρήσεις σε μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου, και αφορούν στη μορφολογία του spray και στην καύση, σε συνθήκες αντιπροσωπευτικές δίχρονων ναυτικών ναυτικών κινητήρων. Τα αποτελέσματα των υπολογισμών των θερμοφυσικών ιδιοτήτων των συγκεκριμένων βαρέων ναυτιλιακών καυσίμων εισήχθησαν στη βιβλιοθήκη καυσίμων του κώδικα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής ΚΙVΑ-3. Περαιτέρω, έγινε επέκταση ενός υφιστάμενου μοντέλου έναυσης, ώστε να συμπεριληφθεί σε αυτό η επίδραση της αρωματικότητας του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου (δείκτης CCAI). Οι τιμές των σταθερών του μοντέλου έναυσης βελτιστοποιήθηκαν με βάση πειραματικά δεδομένα για τις εν λόγω δύο ποιότητες βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στον μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου (SCC), σε συνθήκες πίεσης 90 bar. Το παρόν πλαίσιο μοντελοποίησης αξιολογήθηκε περαιτέρω με εκτενείς μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής της μη-αντιδρώσας και της αντιδρώσας ροής spray βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στον μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου σε συνθήκες παρόμοιες με αυτές που επικρατούν σε ναυτικούς κινητήρες. Για τον σκοπό αυτόν, έγινε κατάλληλη προσαρμογή του μοντέλου spray CAB, ώστε να συμπεριληφθεί κατάλληλη κατανομή του μεγέθους των αρχικών σταγόνων, καθώς και ο αριθμός και το μέγεθος των σταγόνων που προκύπτουν από τη δευτερογενή διάσπαση.

Για τη μη-αντιδρώσα ροή, τα παρόντα υπολογιστικά αποτελέσματα είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειραματικά δεδομένα, όσον αφορά στο μήκος διείσδυσης και στη συνολική εξέλιξη της ροής του spray. Η παρούσα μοντελοποίηση δίδει μια κατάλληλη αναπαράσταση του διασπασμένου υγρού πυρήνα κοντά στο στόμιο του εγχυτήρα, ενώ προβλέπει τη χαμηλή τάση εξάτμισης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου. Περαιτέρω, εξετάστηκε η επίδραση της προθέρμανσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στην ανάπτυξη της ροής του spray, συγκεκριμένα στα ακόλουθα βασικά χαρακτηριστικά: μήκος διείσδυσης, κατανομή της μέσης διαμέτρου των σταγόνων (Sauter Mean Diameter - SMD), και ρυθμός εξάτμισης. Εν προκειμένω, έγινε προσομοίωση της ροής για τρεις αντιπροσωπευτικές τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης του καυσίμου. Για την ελάχιστη εκ των τριών θερμοκρασιών (80 °C), παρατηρήθηκε η ελάχιστη διάσπαση του spray, καθώς και ο ελάχιστος ρυθμός εξάτμισης, με αποτέλεσμα να προκύψει το μεγαλύτερο μήκος διείσδυσης του spray.

Το παρόν πλαίσιο μοντελοποίησης χρησιμοποιήθηκε και για τη μελέτη της αντιδρώσας ροής spray βαρέος καυσίμου στον μεγάλο θάλαμο καύσης σταθερού όγκου. Αρχικά, παρουσιάστηκαν στη διατριβή πρόσφατα πειραματικά αποτελέσματα αναφορικά με τον χρόνο καθυστέρησης έναυσης και τη θέση έναυσης, για περιβάλλον αέρα πυκνότητας 34.7 kg/m³. Τα παρόντα αποτελέσματα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής αναπαράγουν με μεγάλη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα, όσον αφορά στα χαρακτηριστικά της έναυσης καυσίμων με διαφορετικό δείκτη αρωματικότητας (ποιότητα έναυσης), και καταδεικνύουν επίσης τη σημασία της προθέρμανσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στα φαινόμενα καύσης. Συγκεκριμένα, ο χρόνος καθυστέρησης έναυσης μειώνεται για μεγαλύτερες τιμές της θερμοκρασίας προθέρμανσης, ενώ η θέση της έναυσης επηρεάζεται σημαντικά και από την ισχυρή κίνηση εγκάρσιας συστροφής (swirl) του αέρα.

Στην παρούσα διατριβή παρουσιάζονται νέα αριθμητικά αποτελέσματα για την καύση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου σε μεγάλο δίχρονο ναυτικό κινητήρα, και συγκρίνονται με αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα που αφορούν σε λειτουργία με βαρύ και ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Σε αυτό το πλαίσιο, καταδεικνύεται η επίδραση της προθέρμανσης του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου στην πίεση, στον ρυθμό έκλυσης θερμότητας και στην παραγωγή των κύριων ρύπων. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα που προέκυψαν για την περίπτωση συνεχούς προφίλ έγχυσης αναλύθηκαν με οπτικοποίηση του πεδίου ροής, σε συνδυασμό με επεξεργασία αυτών στο πλαίσιο των χαρτών θερμοκρασίας - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου

αέρα (T-φ maps), πιστοποιώντας και ερμηνεύοντας τις τάσεις που εμφανίζονται στα ολικά θερμοδυναμικά μεγέθη (πίεση, ρυθμός έκλυσης θερμότητας) και στην παραγωγή των ρύπων. Με κατάλληλη προσαρμογή της αρχής της έγχυσης (SOI), τα αποτελέσματα από την καύση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, όσον αφορά στον ρυθμό έκλυσης θερμότητας και στην πίεση, προκύπτουν παρόμοια με αυτά του ελαφρού ναυτιλιακού καυσίμου (MDO). Η καύση του επαρκώς προθερμασμένου βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου χαρακτηρίζεται από υψηλότερα επίπεδα συγκέντρωσης οξειδίων του αζώτου (NO_x) και εντονότερο ρυθμό οξείδωσης των σωματιδίων αιθάλης σε σχέση με το ελαφρύ ναυτιλιακό καύσιμο. Μη επαρκής προθέρμανση του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου έχει ως συνέπεια τη μείωση των τιμών της πίεσης και του έργου του κινητήρα, καθώς επίσης και την παρουσία υψηλών επιπέδων εκπομπών σωματιδίων αιθάλης.

Στρατηγικές πολλαπλών παλμών έγχυσης έχουν αποδειχτεί αποτελεσματικές για τη μείωση των εκπομπών ρύπων από ναυτικούς κινητήρες. Με στόχο τη βελτίωση της απόδοσης ενός μεγάλου ναυτικού κινητήρα (με χρήση βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου), με ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης (soot), μελετήθηκε στην παρούσα διατριβή η χρήση σύγχρονων τεχνικών έγχυσης με προφίλ τριπλού παλμού, το οποίο περιλαμβάνει προέγχυση, κύρια έγχυση και μετέγχυση, στο πλαίσιο μελετών βελτιστοποίησης με χρήση Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής. Εδώ, το προφίλ της έγχυσης τριπλού παλμού παραμετροποιήθηκε με βάση πέντε μεταβλητές σχεδίασης: (i) Αρχή της προέγχυσης (Start Of Pilot Injection - SOPil), (ii) Κλάσμα μάζας της προέγχυσης (Pilot Mass Fraction-PiMF), (iii) Χρόνος μεσολάβησης από την προέγχυση (Pilot Dwell - PiDwell), (iv) Χρόνος μεσολάβησης από την κύρια έγχυση (Post Dwell - PoDwell), και (v) Κλάσμα μάζας της μετέγχυσης (Post Mass Fraction - PoMF). Οι θερμοφυσικές ιδιότητες του βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου που χρησιμοποιήθηκε στις μελέτες βελτιστοποίησης υπολογίστηκαν με βάση το αναπτυχθέν νέο μοντέλο θερμοφυσικών ιδιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου της παρούσας διατριβής. Τα αποτελέσματα αξιολογήθηκαν σε σχέση με μια περίπτωση αναφοράς, χαρακτηριζόμενη από συνεχές προφίλ έγχυσης βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου.

Οι μελέτες βελτιστοποίησης περιέλαβαν βελτιστοποίηση χωρίς και με περιορισμούς. Στόχος της βελτιστοποίησης ήταν η ταυτόχρονη μείωση της ειδικής κατανάλωσης καυσίμου και των εκπομπών οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης. Με βάση τα παραπάνω, διαμορφώθηκαν κατάλληλα οι αντικειμενικές συναρτήσεις των προβλημάτων βελτιστοποίησης. Οι μελέτες βελτιστοποίησης πραγματοποιήθηκαν με σύζευξη του κώδικα KIVA-3 με τον κώδικα βελτιστοποίησης EASY, ο οποίος βασίζεται σε Εξελικτικούς Αλγορίθμους. Στην περίπτωση του προβλήματος βελτιστοποίησης με περιορισμούς, η μέγιστη πίεση του κυλίνδρου και το ωφέλιμο έργο ανά κύκλο λειτουργίας του κινητήρα αποτέλεσαν τους περιορισμούς. Τα αποτελέσματα της βελτιστοποίησης για το πρόβλημα χωρίς περιορισμούς κατέδειξαν σημαντική ταυτόχρονη μείωση στις εκπομπές των οξειδίων του αζώτου (NO_x) και των σωματιδίων αιθάλης, με μείωση του έργου και αύξηση της μηχανικής καταπόνησης του κινητήρα. Στη βελτιστοποίηση με περιορισμούς, τα αποτελέσματα κατέδειξαν τη δυνατότητα ταυτόχρονης μείωσης των εκπομπών οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης, τάξης 15% και 11%, αντίστοιχα, χωρίς αύξηση στην ειδική κατανάλωση καυσίμου.

Για την ερμηνεία των παραπάνω αποτελεσμάτων χρησιμοποιήθηκε θερμοδυναμική ανάλυση και ανάλυση με χρήση των χαρτών θερμοκρασίας - λόγου ισοδυναμίας καυσίμου αέρα (T-φ maps), καθώς επίσης και οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων. Οι μελέτες βελτιστοποίησης κατέδειξαν ότι η μάζα καυσίμου που εγχύεται κατά την προέγχυση δεν επιδρά στον σχηματισμό οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης. Η προέγχυση χαρακτηρίζεται από αρχή της έγχυσης καυσίμου πριν το Άνω Νεκρό Σημείο (TDC), συνεισφέροντας στη διατήρηση του ωφέλιμου έργου ανά κύκλο λειτουργίας σε υψηλά επίπεδα. Η αρχή της κύριας έγχυσης, όπως επίσης και τα χαρακτηριστικά της μετέγχυσης, δηλαδή η ποσότητα της μάζας που εγχύεται κατά τη μετέγχυση και ο χρόνος στον οποίο

αρχίζει η μετέγχυση, μπορούν να συμβάλουν σημαντικά στην ταυτόχρονη μείωση των εκπομπών οξειδίων του αζώτου (NO_x) και σωματιδίων αιθάλης. Ειδικότερα, μια κατάλληλη επιλογή αυτών των παραμέτρων μπορεί να προκαλέσει μείωση των θερμοκρασιών εντός του κυλίνδρου, λόγω της σημαντικής μείωσης του ρυθμού έκλυσης θερμότητας, με αποτέλεσμα τη μείωση της παραγωγής των οξειδίων του αζώτου (NO_x). Περαιτέρω, μειώνεται η παραγωγή των σωματιδίων αιθάλης, καθώς δεν υπάρχει είσοδος νέου υγρού καυσίμου στον θάλαμο καύσης (τερματισμός της κύριας έγχυσης), ενώ η ισχυρή συστροφή του αέρα δημιουργεί ένα μίγμα πλούσιο σε οξυγόνο στην περιοχή μπροστά από τους εγχυτήρες. Συνεπώς, η επιπλέον μάζα του καυσίμου που εισέρχεται κατά τη διάρκεια της μετέγχυσης αναμιγνύεται επαρκώς με τον αέρα, και καίγεται σε τοπικές συνθήκες στοιχειομετρίας που προκαλούν αυξημένους ρυθμούς οξείδωσης των σωματιδίων αιθάλης, με ελάχιστη επιπλέον παραγωγή οξειδίων του αζώτου (NO_x).

Σημειώνεται ότι η επιτευχθείσα μείωση των εκπομπών ρύπων του προβλήματος βελτιστοποίησης με περιορισμούς απέχει από τα αυστηρά όρια του κανονισμού Tier III αναφορικά με τα οξείδια του αζώτου (NO_x). Για τον λόγο αυτόν, η βελτιστοποιημένη έγχυση με τριπλό παλμό θα πρέπει να συνοδευτεί και από άλλες τεχνικές μείωσης των οξειδίων του αζώτου (NO_x), όπως είναι η ανακυκλοφορία καυσαερίου (EGR), η προσθήκη νερού και η επιλεκτική καταλυτική αναγωγή των καυσαερίων (SCR). Η προσέγγιση που ακολουθήθηκε στην παρούσα διατριβή μπορεί να αποδειχτεί πολύ χρήσιμη σε μελέτες βελτιστοποίησης της λειτουργίας του κινητήρα, με συνδυασμό των ως άνω τεχνικών μείωσης των οξειδίων του αζώτου (NO_x) με παρεμβάσεις εντός του κυλίνδρου (κατάλληλη διαμόρφωση του προφίλ έγχυσης).

Συνολικά, η έρευνα που πραγματοποιήθηκε στο πλαίσιο της παρούσας διατριβής συνιστά μια ισχυρή βάση για μελέτες Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής φαινομένων ροής και καύσης σε μεγάλους ναυτικούς κινητήρες που λειτουργούν με βαρύ ναυτιλιακό καύσιμο.

11. Προτάσεις για μελλοντική έρευνα

Οι προτάσεις του συγγραφέα της παρούσας διατριβής για μελλοντική έρευνα στο πλαίσιο της υπολογιστικής μελέτης εφαρμογών βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου είναι οι ακόλουθες:

- Συλλογή μεγάλου αριθμού δειγμάτων διαφορετικών ποιοτήτων βαρέος ναυτιλιακού καυσίμου, με στόχο την περαιτέρω πιστοποίηση του αναπτυχθέντος νέου μοντέλου θερμοφυσικών ιδιοτήτων. Ιδιαίτερη έμφαση μπορεί να δοθεί σε μετρήσεις επιφανειακής τάσης, με στόχο την εύρεση μιας βελτιωμένης σχέσης για τον υπολογισμό της.

 Επέκταση της παρούσας πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης με την εισαγωγή μίας επιπλέον μεταβλητής σχεδίασης για τον υπολογισμό του προφίλ έγχυσης τριπλού παλμού.
Συγκεκριμένα:

Συντελεστής μείωσης μάζας (Mass Reduction - MR), ώστε να συμπεριληφθεί στις παραμέτρους βελτιστοποίησης η μείωση στη συνολική εγχυόμενη μάζα καυσίμου σε σχέση με αυτήν της περίπτωσης αναφοράς:

$$MR = \frac{m_{ref} - m_{inj}}{m_{ref}} \cdot 100\%$$
 (38)

Μελέτες πολυκριτηριακής βελτιστοποίησης σύγχρονων τεχνικών έγχυσης καυσίμου, με ταυτόχρονη χρήση: (α) ανακυκλοφορίας καυσαερίου (EGR), (β) εισαγωγής νερού, (γ) επιλεκτικής καταλυτικής αναγωγής καυσαερίου (SCR), τόσο σε δίχρονους, όσο και σε τετράχρονους ναυτικούς κινητήρες.

Κενή σελίδα

Βιβλιογραφία

American Petroleum Institute - API (1997). "Technical data book, petroleum refining".

Amsden, A.A. (1992). "KIVA-3: A KIVA program with block-structured mesh for complex geometries", Los Alamos National Laboratory, LA-12503-MS.

Amsden, A.A., O'Rourke, P.J., and Butler, T.D. (1989). "KIVA-II: A computer program for chemically reactive flows with sprays", Los Alamos National Laboratory, LA-11560-MS.

Ancheyta, J. (2013). "Modeling of processes and reactors for upgrading of heavy petroleum", Taylor & Francis Group, CRC Press.

Andreadis, P., Zompanakis, A., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2011). "Effects of the fuel injection parameters on the performance and emissions formation in a large bore marine diesel engine", Int. J. of Eng. Res., 12, 14-29.

ASTM. 2012. Standard test method for interfacial tension of oil against water by the ring method. ASTM D971. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2016a. Standard test method for determination of water in petroleum products, lubricating oils, and additives by coulometric Karl Fischer titration. ASTM D6304. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2016b. Standard test method for dynamic viscosity and density of liquids by Stabinger viscometer (and the calculation of kinematic viscosity). ASTM D7042. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2017a. Standard test method for acid number of petroleum products by potentiometric titration. ASTM D664. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2017b. Standard test method for heat of combustion of liquid hydrocarbon fuels by bomb calorimeter. ASTM D240. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2018a. Standard test method for corrosiveness to copper from petroleum products by copper strip test: Corrosiveness to copper - Copper strip test for your support. ASTM D130/IP154. West Conshohocken, PA: ASTM.

ASTM. 2018b. Standard test method for density, relative density, and API gravity of liquids by digital density meter. ASTM D4052. West Conshohocken, PA: ASTM.

Bartok, W., and Sarofim, A.F. (1991). "Fossil fuel combustion: A source book", New York: Wiley.

Baumgarten, C. (2006). "Mixture formation in internal combustion engines", Springer, Germany.

Bolla, M., Cattin, M.A., Wright, Y.M., Boulouchos, K., and Schulz, R. (2012). "3D-CFD Lagrangian spray simulations for large two stroke marine Diesel engines compared with experimental data of a spray combustion chamber", Paper ICES2012-81016, Proceedings of the ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Spring Technical Conference, Torino, Italy.

Chryssakis, C., Pantazis, K., and Kaiktsis, L. (2010). "Combustion modeling with Heavy Fuel Oil for large marine Diesel engine applications", Paper No. 236, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

de Hoog, P., Steernberg, K., and Forget, S. (2010), "Investigating the ignition properties of marine fuels by the Fuel Ignition Analyser and its comparison to marine engines", Paper No. 70, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

Demmerle, R., and Heim, K. (2004). "The evolution of the Sulzer RT-flex common rail system", In Proc., CIMAC Congress, Kyoto, Japan.

Fink, C., Buchholz, B., Niendorf, M., and Harndorf, H. (2008). "Injection spray analyses from medium speed engines using marine fuels", Paper ILASS08-6-9, 22nd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Como Lake, Italy.

Garaniya, B.V. (2009). "Modeling of Heavy Fuel Oil spray combustion using continuous thermodynamics", Ph.D. Thesis, University of Tasmania, Australia.

Garaniya, B.V., and Goldsworthy, L. (2007). "Vaporization and pyrolysis modelling of a single droplet of Heavy Fuel Oil using continuous thermodynamics", ANZIAM Journal, 49, C116-C138.

Garaniya, B.V., Goldsworthy, L., and McWilliam, D. (2011). "Thermal cracking and polymerization modelling of a single Heavy Fuel Oil droplet", CHEMECA.

Goldsworthy, L. (2006). "Computational fluid dynamics modeling of residual fuel oil combustion in the context of marine diesel engines", Int. J. Eng. Res. 7 (2): 181–199. https://doi.org/10.1243/146808705X30620.

Gray, J.A., Holder, G.D., Brady, C.J., Cunningham, J.R., Freeman, J.R., and Wilson, G.M. (1985). "Thermo-physical properties of coal liquids: vapor pressure and heat of vaporization of narrow boiling coal liquid fractions", Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development, 24, 97-107.

Herrmann, K., Kyrtatos, A., Schulz, R., Weisser, G., von Rotz, B., Schneider, B., and Boulouchos, K. (2009). "Validation and initial application of a novel spray combustion chamber representative of large two-stroke Diesel engine combustion systems", Paper No 005, 11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS), Vail, Colorado, USA.

Herrmann, K., Schulz, R., and Weisser, G. (2007). "Development of a reference experiment for large diesel engine combustion system optimization", Paper No. 98, CIMAC Congress, Vienna, Austria.

Herrmann, K., von Rotz, B., Schulz, R., Weisser, G., Boulouchos, K., and Schneider, B. (2010). "Reference data generation of spray characteristics in relation to large 2-stroke marine diesel engines using a novel spray combustion chamber concept", Paper No 139, 23rd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Brno, Czech Republic.

Herrmann, K., von Rotz, B., Schulz, R., Weisser, G., Schneider, B., and Boulouchos, K. (2011). "A Spray Combustion Chamber facility for investigations in relation to large 2-stroke marine Diesel engine combustion system optimization", International Symposium on Marine Engineering (ISME), Kobe, Japan.

Hiroyasu, H., and Arai, M. (1990). "Structures of fuel sprays in Diesel engines", Warrendale, PA: Society of Automotive Engineers, SAE paper. 900475.

Hiroyasu, H., Kadota, T., and Arai, M. (1983). "Development and use of a spray combustion modeling to predict Diesel engine efficiency and pollutant emissions, part 1: Combustion modeling", Bull JSME 26: 569 – 575.

International Organization for Standardization (ISO) (2010). "Petroleum products – Fuels (class F) – Specifications of marine fuels", Reference number ISO 8217:2010(E).

Kampolis, I.C., and Giannakoglou, K.C. (2008). "A multilevel approach to single- and multiobjective aerodynamic optimization." *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng.*, 197, 2963-2975.

Karakasis, M., and Giannakoglou, K.C. (2006). "On the Use of Metamodel-Assisted Multi-Objective Evolutionary Algorithms." *Eng. Opt.*, 38(8), 941-957.

Klianis, L.C., Nikolos, I.K., and Sideris I.A. (2002). "Internal combustion engines (Vol. 1)", Seafarer's Library, Eugenides Foundation.

Kontoulis, P., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2008). "Evaluation of pilot injections in a large two-stroke marine diesel engine, using CFD and T- ϕ mapping", 7th Int. Conf. on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA), Sapporo, Japan.

Kontoulis, P., Kaiktsis, L., von Rotz, B., and Boulouchos, K. (2019). "CFD modeling and experimental spray studies for different Heavy Fuel Oil qualities with respect to large twostroke marine engines", J. Energy Eng., publication in progress, accepted with DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000610.

Kontoulis, P., Kaiktsis, L., von Rotz, B., Schmid, A., Weisser, G., Herrmann, K., and Boulouchos, K. (2014). "CFD and experimental studies of Heavy Fuel Oil sprays for marine engine applications", Paper No ABS-288, 26th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Bremen, Germany.

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, DOI: 10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000576.

Kyrtatos, N.P., Hellberg, L., and Poensgen, C. (2010). "HERCULES-B: The continuation of a major r&d effort torwards the next-generation marine diesel engines", Paper No. 32, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

Kyrtatos, N.P., Hellberg, L., and Poensgen, C. (2013). "Ten years after: Results from the major programme HERCULES A-B-C on marine engine R&D", In Proc., CIMAC Congress, Shanghai, China.

Kyrtatos, N.P., Kleimola, M., and Marquard, R. (2007). "The HERCULES Project: A major R&D effort for marine engines of high efficiency and low emissions", Paper No. 31, CIMAC Congress, Vienna, Austria.

Kyriakides, N., Chryssakis, C., and Kaiktsis L. (2009). "Influence of heavy fuel properties on spray atomization for marine Diesel engine applications", SAE Technical paper, 2009-01-1858.

Launder, B.E., and Spalding, D.B. (1972). "Mathematical models of turbulence", Academic Press, New York.

Lin, C.Y., Pan, T.C., and Chen, C.S. (1995). "A calculation method for transport properties for the predictions of combustion characteristics of marine fuel oils", J. of Marine Science and Technology, 3, 29-34.

O'Rourke, P.J., and Amsden, A. A. (1987). "The TAB method for numerical calculation of spray droplet break-up", SAE Technical paper 872089.

Pananakis, E., Kontoulis, P., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2013). "Investigation of fuel injection strategies for partially premixed compression ignition combustion in two-stroke marine diesel engines", Paper No 72, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Chania, Greece.

Pitzer, K.S., Lippmann, D.Z., Curl, R.F., Huggins, C.M., and Persen, D.E. (1995). "The volumetric and thermodynamic properties of fluids - II: Compressibility factor, vapor pressure and entropy of vaporization", J. of the American Chemical Society, 77, 3433-3440.

Pizza, G., Wright, Y.M., Weisser, G., and Boulouchos, K. (2007). "Evaporating and nonevaporating diesel spray simulation: comparison between the ETAB and wave break-up model", Int. Journal of Vehicle Design, 45: 80-99.

Rahimi, P., and Gentzis, T. (2006). "The chemistry of bitumen and heavy oil processing", In Practical advances in petroleum processing, edited by C. S. Hsu and P. R. Robinson, 597–634. New York: Springer.

Riazi, M.R. (2005). "Characterization and properties of petroleum fractions", ASTM USA.

Schenk, C., Stassen, W.J.M., and Lewis, C.P.G. (1998). "Ignition quality of residual fuel oils", Vol. 2, CIMAC Congress, Copenhagen, Denmark.

Schmid, A., von Rotz, B., Bombach, R., Weisser, G., Herrmann, K., and Boulouchos, K. (2012). "Ignition behavior of marine Dieasel sprays: Investigation of marine Diesel ignition and combustion at engine-like conditions by means of OH* chemiluminescence and soot incandescence, 8th Int. Conf. on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA), Fukuoka, Japan.

Shyu, R., Chen, C.S., Goudie, G.O., and El-Wakil, M.M. (1972). "Multi-component heavy fuel oil drop histories in a high temperature flow field", Fuel, 51, 135-145.

Stamoudis, N., Chryssakis, C., and Kaiktsis, L. (2014). "A two-component heavy fuel oil evaporation model for CFD studies in marine diesel engines", Fuel 115: 145–153. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.06.035.

Stiesch, G. (2003). "Modeling engine spray and combustion proccesses", Springer, Germany.

Stratsianis, V., Kontoulis, P., and Kaiktsis, L. (2016). "Effects of fuel post injection on the performance and pollutant emissions of a large marine engine", J. Energy Eng. 142 (2): E4016001. <u>https://doi.org/10.1061/(ASCE)EY.1943-7897.0000337</u>.

Struckmeier, D. (2010). "Combustion characteristics of marine diesel fuels", Ph.D. Thesis, Kyushu University, Japan.

Struckmeier, D., Tsuru, D., Kawauchi, S., and Tajima, H. (2009). "Multi-component modeling of evaporation, ignition and combustion processes of heavy residual fuel oil", SAE paper, 2009-01-2677.

Struckmeier, D., Tsuru, D., and Tajima, H. (2010). "New application and modeling of low ignitability fuel for marine engines", Paper No. 117, CIMAC Congress, Bergen, Norway.

Takasaki, K., Tajima, H., Nakashima, M., Ishida, H., and Osafune, S. (2011). "Combustion characteristics of trouble-making bunker fuel oil", Proceedings, 620-629, CIMAC Congress, Hamburg, Germany.

Twu, C.H., Coon, J.E., and Cunningham, J.R. (1994). "A generalized vapor pressure equation for heavy hydrocarbons", Fluid Phase Equilibria, 96, 19-31.

Vermeire, M.B. (2007) "Everything You Need To Know About Marine Fuels", Chevron Global Marine Products, Ghent, Belgium.

von Rotz, B. (2015). "Experimental investigation of spray characteristics and ignition processes at conditions representative of large two-stroke marine diesel engine", Ph.D. Thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, Switzerland.

von Rotz, B., Herrmann, K., Weisser, G., Cattin, M., Bolla, M., and Boulouchos, K. (2011). "Impact of evaporation, swirl and fuel quality on the characteristics of sprays typical of large 2stroke marine Diesel engine combustion systems", 24th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ILASS), Estoril, Portugal.

Walther, C. (1931) "The evaluation of viscosity data", Erdöl und Teer, 7, 382-384.

Wauquier, J.P. (1995). "Petroleum refining, crude oil, petroleum products, process flowsheets", Institute Francais Du Petrole (IFP).

Weisser, G. (2001). "Modelling of combustion and nitric oxide formation for medium - speed DI diesel engines: a comparative evaluation of zero- and three - dimensional approaches", Ph.D. Thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, Switzerland.

Weisser, G., Tanner, F. X., and Boulouchos, K. (1998). "Modeling of ignition and early flame development with respect to large Diesel engine simulation", SAE Technical paper 981451.

www.imo.org, International Maritime Organization.

Κενή σελίδα