

Soluciones a las emisiones de gases contaminantes en motores diésel marinos

Autor: Carlos Gervasio Rodríguez Vidal

Tesis doctoral UDC / 2022

Director: Juan de Dios Rodríguez García

Tutor: Juan de Dios Rodríguez García

Programa de doctorado en Energía y Propulsión Marina



UNIVERSIDADE DA CORUÑA

Acreditación de los directores de que la tesis cumple los requisitos para optar al grado de doctor

Dr. Juan de Dios Rodríguez García, profesor Contratado Doctor del área de Expresión Gráfica en la Ingeniería de la Universidade da Coruña.

Informa favorablemente acerca de la presente tesis doctoral realizada por D. Carlos Gervasio Rodríguez Vidal, titulada “Soluciones a las emisiones de gases contaminantes en motores diésel marinos”, la cual ha sido realizada bajo su dirección en el programa de doctorado en Energía y Propulsión Marina. El trabajo se encuentra concluido y en condiciones de ser presentado en modalidad por compendio de publicaciones para optar al grado de doctor.

Ferrol, ____ de _____ de _____.

Fdo.: Juan de Dios Rodríguez García
Director y tutor de la tesis doctoral

*A mi familia,
porque siempre que la necesito está ahí.*

Agradecimientos

En primer lugar, quiero expresar mi más sincero agradecimiento a mi director de tesis, Juan de Dios Rodríguez García. Si bien es cierto que esta tesis doctoral es fruto de una gran afición mundo de los motores, especialmente motores marinos, él ha sido el que me ha animado siempre a seguir adelante.

También me gustaría agradecer a todas las personas que en general siempre estuvieron a mi lado. En especial a mi familia, por apoyarme y animarme continuamente. Fueron muchas las horas que he dejado de estar con ellos por dedicarme al trabajo que ha requerido la tesis doctoral, pero a pesar de ello siempre me han apoyado.

Resumo

A presente tese doutoral céntrase na redución de emisións contaminantes en motores diésel mariños. Respecto a combustibles alternativos con vistas a unha descarbonización do sector marítimo, propónse o emprego de amoníaco como combustible libre de carbono e por tanto libre de emisións de CO_2 . Respecto a outras emisións non desexables, esta tese doutoral céntrase nas emisións de NO_x , aínda que tamén se analizan outras emisións contaminantes así coma a repercusión no consumo. As medidas de redución de NO_x propostas consisten, en primeiro lugar, na modificación do patrón de inxección de combustible e, en segundo lugar, na inxección de amoníaco xa que o amoníaco pode ser empregado tanto como combustible como axente reductor de NO_x . Respecto a metodoloxía, utilizáronse técnicas de dinámica de fluídos computacional (CFD) para modelar os motores e as súas emisións, técnicas de decisión multicriterio (MCDM) para determinar o patrón de inxección óptimo e técnicas de redes neuronais artificiais (ANN) para analizar un elevado número de casos máis rapidamente que empregando CFD.

Resumen

La presente tesis doctoral se centra en la reducción de emisiones contaminantes en motores diésel marinos. En cuanto a combustibles alternativos con vistas a una descarbonización del sector marítimo, se propone el uso de amoníaco como combustible libre de carbono y por tanto libre de emisiones de CO₂. Respecto a otras emisiones no deseadas, esta tesis doctoral se centra en las emisiones de NO_x, aunque también se analizan otras emisiones contaminantes así como la repercusión en el consumo. Las medidas de reducción de NO_x propuestas consisten, en primer lugar, en modificar el patrón de inyección de combustible y, en segundo lugar, en la inyección de amoníaco ya que el amoníaco se puede utilizar tanto como combustible como agente reductor de NO_x. En cuanto a la metodología, se utilizaron técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD) para modelar los motores y sus emisiones, técnicas de toma de decisiones multicriterio (MCDM) para determinar el patrón de inyección óptimo y técnicas de redes neuronales artificiales (ANN) para analizar un elevado número de casos más rápidamente que utilizando CFD.

Abstract

The present PhD thesis focuses on the reduction of pollutant emissions in marine diesel engines. As alternative fuel with a view to the decarbonization of the maritime sector, the use of ammonia as a carbon-free fuel and therefore free of CO₂ emissions is proposed. Regarding other undesirable emissions, this PhD thesis focuses on NO_x emissions, although other pollutant emissions are also analyzed as well as the repercussion on consumption. The proposed NO_x reduction measures consist, firstly, of modifying the fuel injection pattern and, secondly, of ammonia injection since ammonia can be used both as a fuel and as a NO_x reducing agent. Regarding the methodology, computational fluid dynamics (CFD) techniques were used to model the engines and their emissions, multi-criteria decision-making (MCDM) techniques to determine the optimal injection pattern and artificial neural network (ANN) techniques to analyze a huge number of cases faster than CFD techniques.

Prefacio

El impacto ambiental del transporte marítimo constituye un importante desafío para la sociedad actual. Los motores diésel marinos son máquinas muy eficientes pero emisoras de preocupantes sustancias tales como dióxido de carbono (CO_2), óxidos de nitrógeno (NO_x), partículas, óxidos de azufre (SO_x), etc. De acuerdo con ello, restricciones impuestas por el convenio IMO MARPOL y otras legislaciones imponen límites cada vez más restrictivos respecto a las emisiones de los motores marinos y, recientemente, indicaciones para conseguir una progresiva descarbonización del sector marítimo. En este sentido, los combustibles libres de carbono, utilizados como combustible único o en modo de combustible dual, están ganando especial interés de cara a su utilización a corto plazo.

Desde un punto de vista de cara a la descarbonización en el sector marítimo, en la presente tesis doctoral se propone el uso de amoníaco como combustible. Al no incluir carbono en su molécula, la combustión de amoníaco no genera emisiones de CO_2 . En motores de ciclo diésel el empleo de amoníaco puro es complicado debido su alta temperatura de autoignición, lo cual hace que haya que trabajar con relaciones de compresión excesivamente elevadas. Por este motivo, en la presente tesis doctoral se propone un funcionamiento dual-fuel utilizando como combustible amoníaco y diesel-oil marino. Desde el punto de vista de reducción de emisiones, se presta especial atención al caso de NO_x , muy característico en motores de tipo diésel (suelen funcionar con exceso de aire, que es básicamente nitrógeno y oxígeno, lo cual significa que hay más que suficiente aporte de nitrógeno para formar NO_x). Las emisiones de NO_x no se resuelven con el empleo de amoníaco ya que la combustión de amoníaco genera importantes cantidades de NO_x . Como medidas de reducción de NO_x , se proponen dos medidas, la primera de ellas consiste en modificar el patrón de inyección y la segunda de ellas en aplicar una post-inyección de amoníaco directamente en la cámara de combustión. De esta manera, se ilustra el empleo del amoníaco con un doble uso, por un lado como combustible y por otro lado como agente reductor de NO_x . Aunque el empleo de amoníaco como agente reductor de NO_x se lleva utilizando desde hace años en catalizadores SCR (selective catalytic reduction) y SNCR (selective

non-catalytic reduction), en el presente trabajo se propone un novedoso método que consiste en inyectar amoníaco directamente en la cámara de combustión, en un instante en el cual la temperatura de los gases es adecuada para que el amoníaco inyectado provoque un efecto reductor de NO_x ya que si se inyecta cuando los gases están demasiado calientes se formaría NO_x en lugar de reducirse, y si se inyecta cuando los gases están demasiado fríos el efecto reductor de NO_x sería insignificante.

La presente tesis doctoral se presenta a modo de compendio de publicaciones. Se adjuntan tres artículos publicados en revistas indexadas en JCR de Web of Science, concretamente pertenecientes al primer cuartil uno de los artículos y tercer cuartil los otros dos artículos. Respecto a la estructura de la tesis doctoral, se han seguido las indicaciones del artículo 41 del Reglamento de Estudios de Doctorado de la UDC, según el cual *“una tesis doctoral por compendio de publicaciones debe de incluir lo siguiente:*

*a) Una **introducción**, que específicamente contendrá una justificación razonada de la unidad y coherencia temática y metodológica de la tesis, los objetivos que hace falta alcanzar, una discusión general que dote de coherencia y unidad los diferentes trabajos, las conclusiones y la bibliografía común.*

*b) Una **copia íntegra de las publicaciones**”.*

De acuerdo con estos contenidos exigidos en el mencionado artículo del Reglamento de Estudios de Doctorado de la UDC, la presente tesis doctoral se estructura básicamente en dos partes. La parte I se corresponde con la introducción, que incluye los contenidos exigidos y además se ha añadido una parte de antecedentes y otra de metodología. La parte II incluye el texto íntegro de las tres publicaciones presentadas.

Índice

| | |
|---|------|
| Dedicatoria | i |
| Agradecimientos..... | iii |
| Resumo | v |
| Resumen | vii |
| Abstract | ix |
| Prefacio..... | xi |
| Índice | xiii |
| Lista de figuras..... | xv |
| Lista de tablas | xvii |
| Nomenclatura | xix |
| Parte I. Introducción | 1 |
| 1. Antecedentes | 3 |
| 2. Justificación razonada de la unidad y coherencia temática y metodológica de la tesis | 12 |
| 3. Objetivos | 15 |
| 4. Metodología..... | 16 |
| 4.1. CFD | 16 |
| 4.2. MCDM | 25 |
| 4.3. ANN | 30 |
| 5. Discusión de los trabajos presentados | 35 |
| 5.1. Discusión de la publicación 1 | 35 |
| 5.2. Discusión de la publicación 2 | 36 |
| 5.3. Discusión de la publicación 3 | 37 |
| 6. Conclusiones | 39 |
| 7. Bibliografía | 41 |

| | |
|--|----|
| Parte II. Publicaciones..... | 45 |
| Publicación 1. Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques..... | 47 |
| Publicación 2. Analysis of the pre-injection system of a marine diesel engine through multiple-criteria decision-making and artificial neural networks | 67 |
| Publicación 3. Possibilities of ammonia as both fuel and NO _x reductant in marine engines: a numerical study | 79 |

Lista de figuras

| | |
|---|----|
| Figura 1. Carreras del ciclo de trabajo de un MCI A típico de 4T. | 4 |
| Figura 2. Campo de aplicación de los motores marinos, Kuiken (2008). | 5 |
| Figura 3. Valores típicos de emisiones de motores diésel marinos de dos tiempos MAN B&W tipo MC (Kuiken, 2008; Woodyard, 2009). | 8 |
| Figura 4. Emisiones máximas permitidas de NO _x para motores marinos según IMO. | 9 |
| Figura 5. Motor MAN D2840LE V10 analizado. | 17 |
| Figura 6. Pistones-bielas del motor MAN D2840LE V10; (a) conjunto de los 10 pistones-bielas; (b) detalle de uno de los pistón-biela; (c) detalle de las cámaras de combustión situadas en las cabezas de los pistones. | 19 |
| Figura 7. (a) Lateral del motor MAN D2840LE V10 con culata desmontada; (b) detalle de uno de los cilindros. | 20 |
| Figura 8. (a) Culata del motor MAN D2840LE V10; (b) Válvulas. | 21 |
| Figura 9. Inyectores Bosch DLLA 136 S 943; (b) inyector desmontado. | 22 |
| Figura 10. (a) Sección en vista lateral del inyector en el cilindro; (b) vista en planta del inyector en el cilindro. | 22 |
| Figura 11. Malla computacional; (a) vista 3D en posición PMI; (b) sección AA de la malla en posición PMI; (c) sección AA de la malla en posición PMS. | 23 |
| Figura 12. Representación esquemática de los 125 casos analizados. | 26 |
| Figura 13. Concepto genérico de red neuronal. | 31 |
| Figura 14. Representación esquemática de neuronas biológicas en el cerebro humano. | 31 |
| Figura 15. Estructura de una red neuronal. | 32 |
| Figura 16. Ajuste de datos; (a) ajuste apropiado; (a) infra-ajuste (under-fitting); (c) sobre-ajuste (over-fitting). | 33 |
| Figura 17. Gráficos de regresión de la red neuronal. | 34 |

Lista de tablas

| | |
|--|----|
| Tabla 1. Especificaciones del motor a plena carga..... | 17 |
| Tabla 2. Pesos de los criterios, en base unitaria..... | 27 |
| Tabla 3. Métodos de normalización empleados en el presente trabajo. | 28 |

Nomenclatura

| | |
|------------------|--|
| 2T | Dos tiempos |
| 4T | Cuatro tiempos |
| ANN | Red neuronal artificial (artificial neural network) |
| ATDC | Ángulo de cigüeñal después del punto muerto superior (crank angle after top dead center) |
| C | Cantidad de combustible pre-inyectado |
| CA | Ángulo de cigüeñal (crank angle) |
| CFD | Dinámica de fluidos computacional (computational fluid dynamics) |
| CO | Monóxido de carbono |
| CO ₂ | Dióxido de carbono |
| D | Duración de la pre-inyección o matriz de decisión |
| EC | European Commission |
| EEDI | Índice de diseño de eficiencia energética (energy efficiency design index) |
| EGR | Recirculación de gases de escape (exhaust gas recirculation) |
| EPA | Environmental Protection Agent |
| f_k | Fracción másica de cada especie k |
| H | Entalpía |
| H ₂ O | Agua |
| HFO | Fuel-oil pesado (heavy fuel oil) |

| | |
|----------|---|
| HC | Hidrocarburo |
| IA | Índice de adecuación |
| IMO | International Maritime Organization |
| k_j | Constante de reacción de la reacción j |
| k_{bj} | Constante de reacción hacia adelante (forward) de la reacción j |
| k_{fj} | Constante de reacción hacia atrás (backward) de la reacción j |
| m | Número de reacciones o número de filas de matriz o número de datos utilizados para establecer la red neuronal |
| MDO | Diesel-oil marino (marine diesel oil) |
| MEC | Motor de encendido por compresión |
| MEP | Motor de encendido provocado |
| MEW | Ponderación exponencial multiplicativa (multiplicative exponential weighting) |
| MCIA | Motor de combustión interna alternativo |
| MCDM | Toma de decisión multi-criterio (multiple-criteria decision-making) |
| $[M_k]$ | Concentración de la especie M_k |
| MW_k | Peso molecular de la especie M_k |
| N | Número de especies químicas |
| n | Número de columnas de matriz |
| N_2 | Nitrógeno |
| NH_3 | Amoniaco |
| NO_x | Óxido de nitrógeno |
| o | Salida proporcionada por la red neuronal |

| | |
|-------------------|--|
| O ₂ | Oxígeno |
| PM | Partículas (particulate matter) |
| PM _{2,5} | Partículas de diámetro inferior a 2,5 μm (particulate matter 2.5) |
| PM ₁₀ | Partículas de diámetro inferior a 10 μm (particulate matter 10) |
| PMI | Punto muerto inferior |
| PMS | Punto muerto superior |
| R | Coefficiente de correlación |
| RANS | Navier-Stokes con el promedio de Reynolds (Reynolds-averaged Navier-Stokes) |
| S | Instante de comienzo de la pre-inyección |
| S _{ct} | Número de Smidth turbulento |
| S _k | Tasa neta de producción de una especie k mediante reacción química |
| S _{rad} | Término fuente para contemplar los efectos de la radiación |
| SAW | Ponderación aditiva simple (simple additive weighting) |
| SCR | Reducción catalítica selectiva (selective catalytic reduction) |
| SNCR | Reducción no catalítica selectiva (selective non-catalytic reduction) |
| SO _x | Óxido de azufre |
| t | Valor objetivo de la red neuronal |
| TOPSIS | Técnica de orden de preferencia por semejanza a solución ideal (technique for order of preference by similarity to ideal solution) |
| UDC | Universidade da Coruña |
| V _{ij} | Valor normalizado de X _{ij} |
| WLC | Combinación lineal ponderada (weighted linear combination) |

| | |
|--------------|---|
| WPM | Método del producto ponderado (weighted product method) |
| WSM | Método de suma ponderada (weighted sum method) |
| X_{ij} | Valor de la alternativa i evaluada bajo el criterio de decisión j |
| $X_{j,\min}$ | Calificación mínima de las alternativas para cada criterio j |
| $X_{j,\max}$ | Calificación máxima de las alternativas para cada criterio j |
| w_j | Peso del j -ésimo criterio |
| α | Requerimiento |
| β | Sub-requerimiento |
| μ_t | Viscosidad turbulenta |
| ν'_{kj} | Coefficientes estequiométricos de los reactivos |
| ν''_{kj} | Coefficientes estequiométricos de los productos |
| ρ | Densidad |
| σ_h | Número de Prandtl turbulento |
| τ_{ij} | Tensor de esfuerzos viscosos |

Parte I. Introducción

Esta primera parte consta de una introducción que incluye unos antecedentes, justificación razonada de la unidad y coherencia temática y metodológica de la tesis, objetivos, metodología, discusión general que dote de coherencia y unidad a los trabajos presentados, conclusiones y bibliografía.

1. Antecedentes

En general, un motor se puede considerar como una máquina que permite transformar cualquier tipo de energía en energía mecánica. Dentro de este amplio campo se encuentra el motor térmico, que se puede definir como una máquina que permite obtener energía mecánica a partir de la energía térmica. Se puede disponer directamente de esa energía, como es el caso de la radiación solar o geotérmica, u obtenerla a partir de otros tipos de energía, como puede ser la energía química. En este último caso se necesita transformar la energía química en energía térmica mediante un proceso adicional, por ejemplo un proceso de combustión. Dependiendo de donde se produzca esa combustión, los motores pueden ser de combustión externa o interna. Además, en el caso de que se desarrolle un trabajo sobre una superficie móvil, ésta puede desplazarse mediante un movimiento giratorio (motor rotativo) o un movimiento rectilíneo (motor alternativo). El objetivo de la presente tesis doctoral es el motor de combustión interna alternativo (MCIA).

Los MCIA se pueden clasificar de múltiples formas, las más importantes se citan a continuación:

- Según el proceso de encendido: los MCIA se clasifican en motores de encendido provocado (MEP) o motores Otto y motores de encendido por compresión (MEC) o motores Diésel. En los MEP u Otto el inicio de la combustión se produce mediante un aporte de energía externo al ciclo termodinámico, por ejemplo mediante una bujía. En los MEC o Diésel el inicio de la combustión se produce por un autoencendido del combustible inyectado al conseguirse temperaturas suficientemente altas tras un proceso de compresión.

- Según el ciclo de trabajo: los MCIA se clasifican en motores de cuatro tiempos (4T) y motores de dos tiempos (2T). En los motores de dos tiempos el ciclo de trabajo se completa en una vuelta de cigüeñal, o lo que es lo mismo, en dos carreras de émbolo. Sin embargo, en los motores de cuatro tiempos el ciclo de trabajo se completa en dos vueltas de cigüeñal, o lo que es lo mismo, en cuatro carreras de émbolo.

Aunque hay diferencias entre unos motores y otros, el ciclo de trabajo de un MCIa típico de cuatro tiempos se muestra en la Fig. 1. La carrera de admisión comienza en el PMS (punto muerto superior) con el pistón descendiendo (nótese que las flechas de la figura indican el movimiento del pistón). La/s válvula/s de admisión se abre/n y entra aire en el interior del cilindro a medida que el pistón desciende. Posteriormente, una vez que el pistón alcanza el PMI (punto muerto inferior), tiene lugar la carrera de compresión. Para ello se inyecta el combustible en la masa de aire a elevada temperatura y presión. La/s válvula/s de admisión se cierra/n y el pistón, en su movimiento ascendente, comprime el aire haciendo que la presión y la temperatura se incrementen considerablemente. Instantes antes de que el pistón alcance el PMS se inicia la combustión. Debido a la alta presión que se origina tras la combustión, el pistón desciende durante la carrera de expansión. Tras alcanzar el PMI, el pistón asciende de nuevo y tiene lugar la carrera de escape, durante la cual los productos de combustión son expulsados hacia el exterior al abrirse la/s válvula/s de escape. Finalmente, el pistón alcanza el PMS y el ciclo comienza de nuevo.

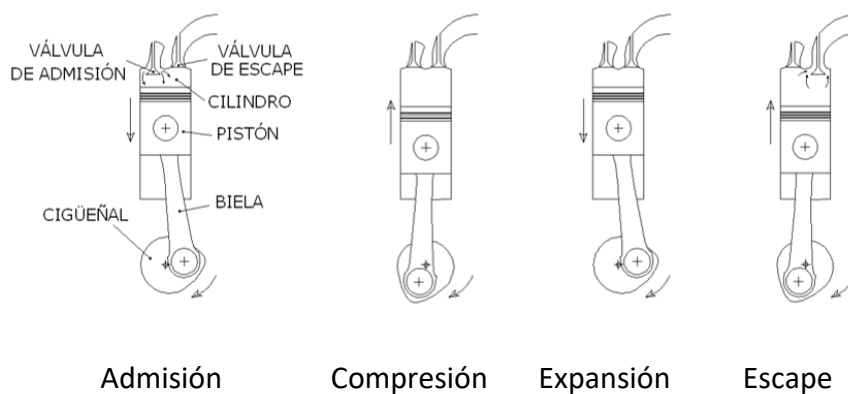


Figura 1. Carreras del ciclo de trabajo de un MCIa típico de 4T.

Kuiken (2008) clasifica los motores marinos según su velocidad en lentos (hasta 240 rpm, velocidad de rotación equivalente a una frecuencia de hasta 4 Hz), medios (entre 240 y 960 rpm, velocidad de rotación equivalente a una frecuencia entre 4 y 16 Hz) y rápidos (más de 960 rpm, velocidad de rotación equivalente a una frecuencia de más de 16 Hz) y además establece un campo de aplicación según su velocidad de rotación y

potencia en cuatro categorías de motores marinos, las cuales se ilustran en la Fig. 2 y se resumen a continuación.

- Categoría I. Motores de velocidad de rotación entre 1500 y 3000 rpm (rápidos) y potencia menor de 100 Kw). Estos motores suelen ser de cuatro tiempos y utilizar como combustible diesel-oil marino (MDO).
- Categoría II. Motores de velocidad de rotación entre 960 y 2100 rpm (rápidos) y potencia entre 100 y 5000 kW. Estos motores suelen ser de cuatro tiempos y utilizar combustible diesel-oil marino (MDO).
- Categoría III. Motores de velocidad de rotación entre 400 y 960 rpm (medios) y potencia entre 500 y 30000 kW. Estos motores suelen ser de cuatro tiempos y utilizar combustible fuel-oil pesado (HFO). La combustión del fuel-oil pesado es complicada y por tanto no es propio de motores rápidos, sino de motores de media o lenta velocidad.
- Categoría IV. Motores de velocidad de rotación entre 50 y 250 rpm (lentos), y potencia entre 1500 y 100000 kW. Estos motores suelen ser de dos tiempos y utilizar combustible fue-oil pesado (HFO).

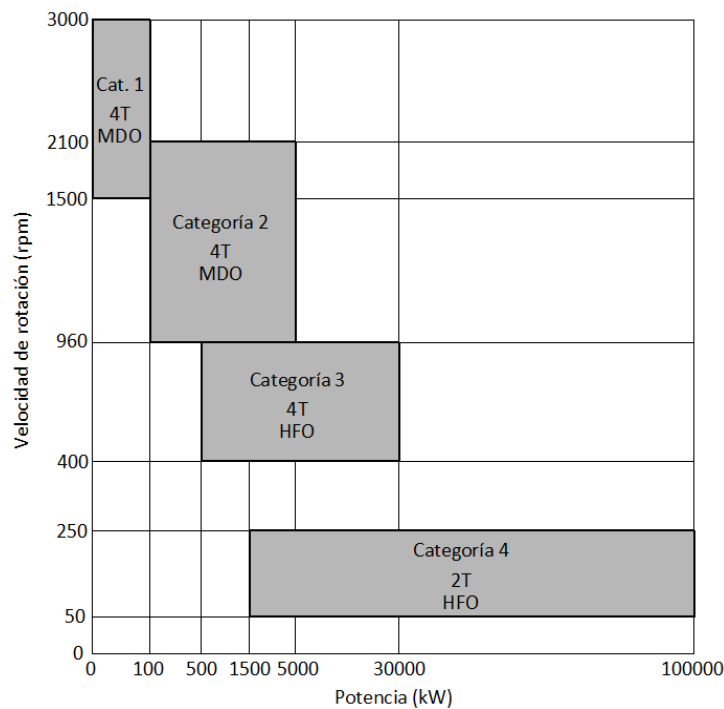
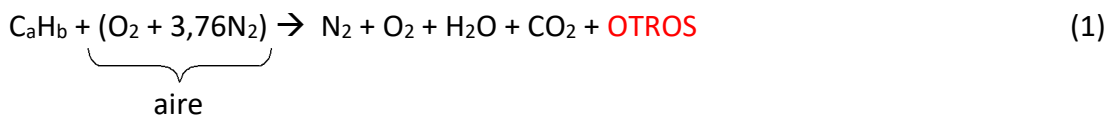
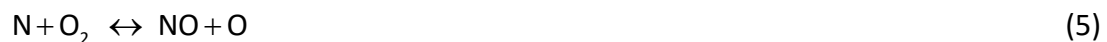


Figura 2. Campo de aplicación de los motores marinos, Kuiken (2008).

La combustión de un hidrocarburo genérico C_aH_b se indica en la reacción (1). La reacción del hidrocarburo con aire (el aire está compuesto básicamente por 79% nitrógeno y 21% oxígeno en proporciones molares, lo cual lleva a 3,76 moles de N_2 por cada mol de O_2) produce, mayoritariamente, nitrógeno (N_2) que no reaccionó, oxígeno (O_2) que no reaccionó, agua (H_2O) y dióxido de carbono (CO_2). En menor proporción, otras sustancias tales como los óxidos de nitrógeno (NO_x), partículas, óxidos de azufre (SO_x), monóxido de carbono (CO), hidrocarburos sin quemar (HC), etc.



Estas otras sustancias son debidas a reacciones que transcurren durante el proceso de combustión. Hasta para el caso los más simples hidrocarburos, el proceso de combustión está gobernado por cientos de reacciones y decenas de especies químicas. Por ejemplo, dos reacciones típicas que ocurren debido a las altas temperaturas y presiones que tienen lugar en los motores de combustión interna son las reacciones (2-6). Mediante otras reacciones también se forman hidrocarburos, óxidos de nitrógeno, etc.



A diferencia de los MEP o motores de ciclo Otto, que suelen trabajar en proporciones alrededor de la estequiométrica, los MEC o de ciclo Diesel trabajan con exceso de aire. El exceso de aire en motores MEP provoca que haya una cantidad significativa de nitrógeno y oxígeno, lo cual promueve la formación de NO_x . Otras emisiones

preocupantes en el caso de los motores MEC son las partículas (PM). Por el contrario, en motores MEP, al trabajar en proporciones alrededor de la estequiométrica y no haber exceso de aire, son más características las emisiones de CO y HC debido principalmente a combustiones incompletas en ciertas regiones de la cámara de combustión. Respecto a emisiones de CO₂, como los motores MEC suelen tener un rendimiento mayor que los MEP, las emisiones de CO₂ en relación a la potencia desarrollada son menores en los MEC.

En lo referente a motores marinos, la propulsión de la gran mayoría de barcos actuales se realiza mediante MEC, lo cual hace especialmente preocupante el nivel de emisiones de NO_x y partículas. Aunque un motor MEC emite menos CO₂ que un motor MEP, las emisiones de CO₂ en el sector marítimo son importantes debido a la elevada potencia instalada. Además, con el objetivo de reducir costes, los combustibles marinos suelen tener un contenido elevado de azufre, especialmente los fuelóleos pesados, lo cual provoca que las emisiones de SO_x sean especialmente preocupantes, Lamas y Rodríguez (2012a). Los óxidos de azufre provocados por los motores marinos se producen por oxidación del azufre del combustible y afectan significativamente a la cantidad total de emisiones globales de óxido de azufre en el mar y en las zonas portuarias. A modo de ejemplo, la Fig. 3 muestra valores típicos para motores diésel marinos lentos de dos tiempos MAN B&W tipo MC (Kuiken, 2008; Woodyard, 2009).

El problema de las emisiones de motores marinos alcanza tal magnitud que, por ejemplo, en el año 2019 fue el causante de las emisiones a nivel mundial de 2,2% de CO₂, 20,8% de NO_x, 11,8% de SO_x, 8,57% de PM_{2,5} (partículas de diámetro inferior a 2,5 μm) y 4,63% de PM₁₀ (partículas de diámetro inferior a 10 μm), respectivamente (Zincir, 2020; European Energy Agency, 2020). Actualmente existe legislación tanto a nivel global como regional para abordar el impacto de la contaminación atmosférica provocada por los motores marinos. En este sentido, destacan organismos como la Environmental Protection Agent (EPA) en EEUU, la European Commission (EC) en la Unión Europea y, a nivel internacional, la International Maritime Organization (IMO). IMO es una agencia que desarrolla y mantiene un marco regulatorio integral para el transporte marítimo en competencias tales como seguridad, contaminación, asuntos legales, etc.

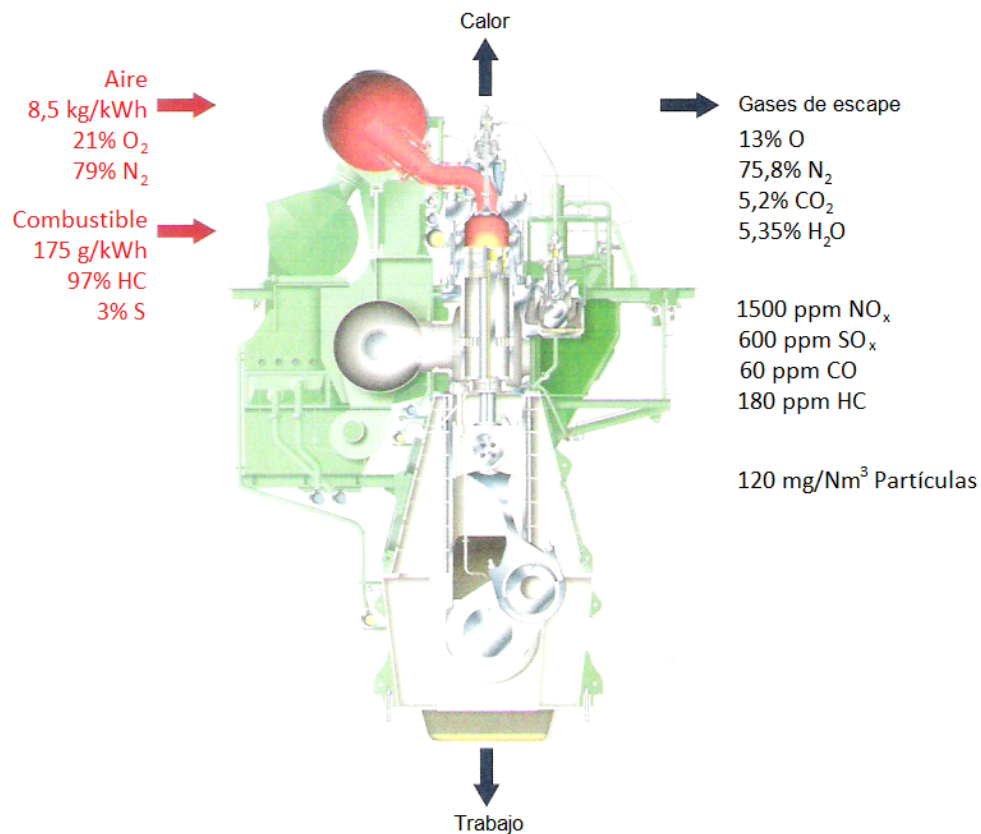


Figura 3. Valores típicos de emisiones de motores diésel marinos de dos tiempos MAN B&W tipo MC (Kuiken, 2008; Woodyard, 2009).

Con el fin de minimizar la contaminación de los mares, en 1973 se adoptó el convenio MARPOL, International Convention for the Prevention of Pollution from Ships (Convenio Internacional para Prevenir la Contaminación por los Buques) y posteriormente el Protocolo de 1978. Habida cuenta de que el convenio MARPOL 1973 aún no había entrado en vigor, el Protocolo de 1978 relativo al convenio MARPOL absorbió el convenio original. El nuevo instrumento entró en vigor en 1983 y constituye el mayor convenio actualmente vigente respecto a la protección del medio marino. MARPOL 73/78 no permanece estático, sino que a lo largo de los años ha sido objeto de diversas actualizaciones a lo largo del tiempo. En lo que respecta a la contaminación atmosférica debida a emisiones de motores marinos, en 1997 se añadió un nuevo anexo, el Anexo VI, que entró en vigor en 2005. Este Anexo VI (Reglas para Prevenir la Contaminación Atmosférica Ocasionada por los Buques) del convenio MARPOL establece límites de óxidos de azufre y óxidos de nitrógeno. Como las

emisiones de SO_x son función del contenido de azufre del combustible, se debió de limitar el contenido de azufre en los combustibles. En cuanto a NO_x , se establecen funciones que indican los niveles máximos permisibles de emisión de NO_x relacionados con el régimen del motor, aplicable a los motores marinos de potencia mayor de 130 kW, instalados en barcos construidos después de 2000, 2011 y 2016, o que experimenten una cierta modificación a partir de dichas fechas. La Fig. 4 muestra los niveles máximos de emisiones de NO_x para motores marinos fabricados después de 2000 (IMO Tier I), 2011 (IMO Tier II) y 2016 (IMO Tier III, solo en áreas especiales designadas llamadas ECA, Emission Control Areas, es decir, áreas de control de emisiones). Aparte de estas limitaciones internacionales, algunas regiones han desarrollado límites regionales y nacionales más estrictos. Respecto a las emisiones de CO_2 , en 2011 se añadió un capítulo 4 al anexo VI del convenio MARPOL 73/78 centrado en la eficiencia energética de los buques, limitando lo que se conoce como EEDI (índice de diseño de eficiencia energética, del inglés “energy efficiency design index”). El EEDI indica las emisiones de CO_2 por tonelada de carga y milla náutica navegada. Con esta nueva medida, se pretende que los nuevos barcos sean más eficientes energéticamente con su optimización del casco, motores, hélices, etc. Cuanto menor sea el valor EEDI del barco, más eficiente energéticamente será el barco y por tanto menores serán las emisiones de CO_2 .

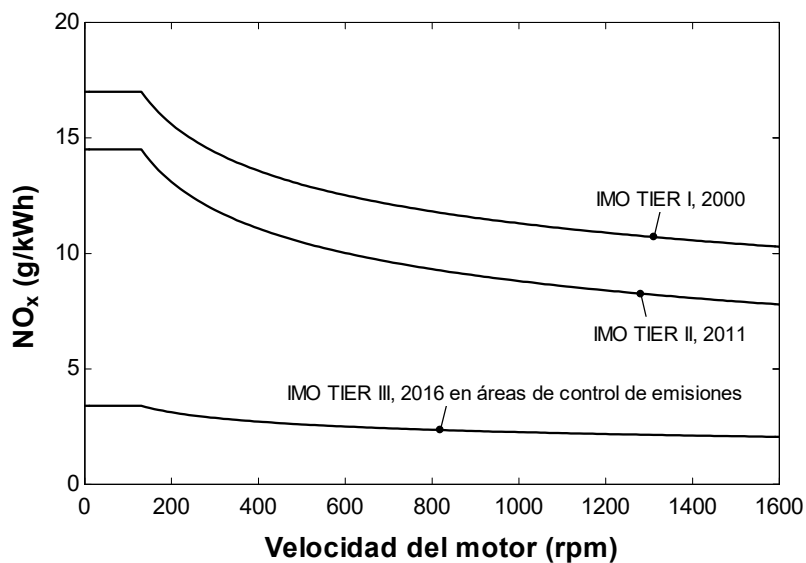


Figura 4. Emisiones máximas permitidas de NO_x para motores marinos según IMO.

Para reducir las emisiones de SO_x , en plantas de potencia en tierra es común el proceso de desulfuración por lavado, usualmente con soluciones alcalinas, en dispositivos llamados scrubbers. Sin embargo, en barcos estos equipos resultan voluminosos y costosos para las aplicaciones a bordo. El enfoque más utilizado para reducir el SO_x en buques es utilizar combustibles con bajo contenido de azufre.

Respecto a las emisiones de NO_x , debido a la trascendencia de NO_x en el sector marítimo que, tal y como se mencionó previamente, se han desarrollado importantes esfuerzos a lo largo de los últimos años. Básicamente, existen dos procedimientos para reducir las emisiones de NO_x , medidas primarias y secundarias. Las medidas primarias tienen como objetivo reducir la cantidad de NO_x que se forma durante la combustión, optimizando los parámetros del motor con respecto a las emisiones. Los óxidos de nitrógeno se generan a partir de nitrógeno y oxígeno a altas temperaturas de combustión. Aunque los combustibles contienen pequeñas cantidades de nitrógeno, y en mayor proporción los combustibles pesados que los ligeros, el nitrógeno procede prácticamente en su totalidad del aire, dado que el nitrógeno es el componente mayoritario del aire. Destacan tres tipos de mecanismos de formación de óxidos de nitrógeno: térmico, del combustible y súbito, siendo el térmico el causante de prácticamente la totalidad de los NO_x emitidos por los motores. Los NO_x se forman mayoritariamente bajo las siguientes circunstancias:

- Suficiente nitrógeno y oxígeno disponible
- Elevada temperatura
- Tiempo

Como se mencionó anteriormente, los motores diésel funcionan con mezclas pobres (con exceso de aire). El exceso de aire tiene un efecto significativo en la tasa de formación de NO_x . Es importante mencionar también que la cinética de formación de NO_x es lenta en comparación con el resto de reacciones que se producen en el proceso de combustión de un motor. Los motores lentos producen más NO_x porque el proceso de combustión tiene lugar a lo largo de un período de tiempo más largo, por lo que hay más tiempo disponible para la formación de NO_x .

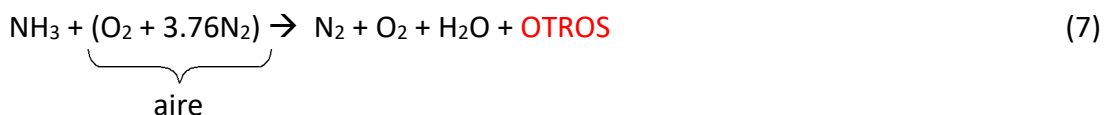
Por lo tanto, las medidas primarias se centran en reducir las concentraciones de nitrógeno y/o oxígeno, las temperaturas de combustión y/o la cantidad de tiempo en que los gases de combustión permanecen a altas temperaturas. Por otro lado, las medidas secundarias eliminan la cantidad de NO_x de los gases de escape mediante técnicas posteriores a la combustión. La medida secundaria más empleada es SCR (Selective Catalytic Reduction, en español Reducción Catalítica Selectiva). SCR implica la mezcla de un agente reductor, normalmente urea (CO(NH₂)₂) o amoníaco (NH₃) con los gases de escape que circulan a través de un catalizador. Para evitar un daño prematuro del sistema catalítico, es necesario emplear combustibles con bajo contenido de azufre. Los inconvenientes de emplear convertidores catalíticos en buques son bien conocidos, principalmente la necesidad de un agente reductor junto con el espacio adicional requerido para el reactor catalítico, los hacen poco atractivos para aplicaciones en motores marinos. En consecuencia, las medidas de reducción primaria son la opción más recurrida para reducir la formación de contaminantes de motores marinos. Las medidas de reducción primaria más relevantes son recirculación de gases de escape (EGR, el inglés "exhaust gas recirculation") e inyección de agua.

2. Justificación razonada de la unidad y coherencia temática y metodológica de la tesis

Debido a que la legislación que regula las emisiones de los motores marinos es cada vez más restrictiva, es necesario seguir investigando medidas de reducción de emisiones contaminantes. La presente tesis doctoral se centra en la reducción de NO_x y CO₂, aunque también se analizan otras emisiones tales como CO y HC. Se propone un trabajo basado fundamentalmente en CFD (computational fluid dynamics, en español dinámica de fluidos computacional). Como un método de reducción de NO_x, la presente tesis doctoral propone en primer lugar una modificación del patrón de inyección.

- Modificación del patrón de inyección mediante pre-inyección de diesel-oil.
- Realización de post-inyección de amoníaco.

Asimismo, también se propone el uso de amoníaco como combustible. El empleo de amoníaco constituye un importante paso hacia la descarbonización en la propulsión marina y por tanto reducir las emisiones de CO₂. La combustión del amoníaco se indica en la reacción (7). La reacción del amoníaco con el aire produce, mayoritariamente, nitrógeno, oxígeno y agua. En menor proporción, otras sustancias que nunca serán dióxido de carbono, monóxido de carbono o hidrocarburos sin quemar porque el amoníaco no contiene carbonos en su molécula. Del mismo modo, tampoco se producirán óxidos de azufre porque el amoníaco no contiene azufre en su molécula. Lo que no es inevitable es que se produzcan óxidos de nitrógeno como producto de la combustión del amoníaco.



Como aspecto negativo cabe destacar el elevado índice de toxicidad del amoníaco. Precisamente su elevada toxicidad hace que se hayan desarrollado escasos estudios experimentales debido a la peligrosidad que éstos conllevan. El amoníaco es además un producto básico en sistemas de refrigeración industrial y naval, y sucesivos accidentes han provocado numerosas muertes a lo largo de los años. Debido a esta

elevada toxicidad, las técnicas CFD son muy apropiadas para analizar las posibilidades del amoníaco en motores sin la peligrosidad que supone un estudio experimental.

Además de la aplicación como combustible, la presente tesis doctoral propone también el uso del amoníaco como agente reductor de NO_x. La reducción de NO_x mediante reacción con amoníaco es una técnica muy utilizada en la práctica mediante dispositivos SCR y SNCR, en la cual transcurren numerosas reacciones. Globalmente, lo que interesa es conseguir lo siguiente:



Un importante inconveniente de los SNCR es que los gases deben estar a una determinada temperatura para que la reducción de NO_x sea eficaz, de lo contrario es necesario el uso de catalizadores y por tanto dispositivos SCR. Como los gases de escape de los motores se encuentran a una temperatura considerablemente menor a la óptima, es necesario el empleo de catalizadores. Con el fin de evitar el empleo de catalizadores para llevar a cabo un proceso SCR o de calentar los gases de escape para llevar a cabo un proceso SNCR, la presente tesis doctoral propone inyectar el amoníaco directamente en la cámara de combustión. Para ello, el amoníaco debe de ser inyectado en un estrecho rango de tiempo en el cual la temperatura es óptima para la reducción de NO_x. Si la inyección se realiza demasiado pronto, cuando la temperatura es elevada (no debería de exceder sobre 1100 °C), el amoníaco se quema y actúa como combustible en lugar de reaccionar con el NO_x. Si la inyección es tardía, cuando la temperatura es reducida (no debería ser menor de aproximadamente 900 °C), la reacción con NO_x es demasiado lenta, lo que provoca que parte del amoníaco no reacciona y es expulsado a la atmósfera junto con los gases de escape. En comparación con inyección de agua, se consigue una considerable mayor reducción de NO_x con amoníaco que con agua debido a que la reducción de NO_x con agua es un procedimiento meramente físico, mientras que con amoníaco es físico-químico. El principio de actuación del agua es reducir la temperatura de combustión y con ello las emisiones de NO_x. La reducción de temperatura es causada principalmente por el incremento del calor específico de los gases ya que el agua tiene un calor específico

mayor que el aire. Por otro lado, el principio de actuación de la inyección de amoniaco es mediante reacción con NO_x sin reducir la temperatura de combustión.

Respecto a técnicas CFD aplicadas al análisis de motores, la trayectoria desarrollada en la presente tesis doctoral comenzó con un trabajo de máster, Rodríguez Vidal (2010), en cual que se analizó el proceso de barrido en un pequeño motor fueraborda tipo Otto de dos tiempos. Al año siguiente, dicho trabajo se publicó en la revista científica DYNA, Lamas y col. (2011). Posteriormente, se continuó con modelados CFD de motores marinos. Concretamente, se analizó el motor diésel marino de émbolos opuestos Fairbanks-Morse 38D8-1/8 (Rodríguez Vidal y Lamas Galdo, 2012) y el motor lento de dos tiempos MAN 7S50MC (Lamas y Rodríguez, 2012). Estos trabajos tratan del proceso de barrido, muy importante en motores de dos tiempos. Seguidamente se pasó a hacer simulaciones CFD del proceso de combustión, algo muy necesario para caracterizar las emisiones contaminantes. Con ello se analizó el motor rápido de cuatro tiempos MAN D2840LE V10 (Lamas Galdo y col., 2013) y el motor de media velocidad de cuatro tiempos Wärtsilä 6L 46 (Lamas y Rodríguez, 2013). La simulación del proceso de combustión mediante CFD resultó un paso muy importante ya que permite caracterizar los gases de escape que emiten los motores. Ello llevó a la idea de analizar métodos de reducción de emisiones aplicados a motores marinos. Previamente a dicho análisis se realizó una revisión bibliográfica acerca de emisiones de motores marinos y principales métodos de reducción de NO_x (Lamas y Rodríguez, 2012). Posteriormente, se analizó el efecto de dos medidas clásicas tales como EGR (exhaust gas recirculation) e inyección de agua (Lamas y col., 2013). La presente tesis doctoral sigue la línea de reducción de emisiones en motores diésel marinos. Además de las técnicas CFD, también se acude al empleo de técnicas de decisión multi-criterio (MCDM) para seleccionar el patrón de inyección adecuado y a técnicas de redes neuronales (ANN) para caracterizar el funcionamiento de los motores analizados de forma más genérica y más rápida que lo que proporcionan las técnicas CFD.

3. Objetivos

Tal y como se indicó anteriormente, en el presente trabajo se analizaron dos motores: el Wärtsilä 6L 46 y el MAN D2840LE, ambos de categoría III según la Fig. 2.

En el motor Wärtsilä 6L 46 se analizó, funcionando con diesel-oil, una medida de reducción de NO_x que consiste en modificar el patrón de inyección. Las simulaciones se realizaron mediante CFD. Además del NO_x , se analizó la repercusión tanto en el consumo como en las emisiones de CO y HC. La repercusión en las emisiones de CO_2 resultó despreciable. Con el fin de obtener el patrón de inyección óptimo, se emplearon técnicas de decisión multi-criterio MCDM. Finalmente, se emplearon técnicas de redes neuronales (ANN) para caracterizar el funcionamiento de los motores analizados de forma más genérica y más rápida que lo que proporcionan las técnicas CFD

En el motor MAN D2840LE V10 se analizó en primer lugar el empleo de amoníaco como combustible a modo de dual fuel amoníaco y diesel-oil. También se analizó una medida de reducción de NO_x que consiste en la realización de una post-inyección de amoníaco para que actúe también como agente reductor de NO_x en lugar de solamente como combustible. Al igual que en el motor anterior, también se analizó el efecto en el consumo de combustible y emisiones de CO, HC y CO_2 . Asimismo, también se analizaron otras emisiones que tienen lugar cuando se trabaja con amoníaco, como son amoníaco (NH_3) que no reaccionó y N_2O . Las simulaciones tuvieron lugar mediante CFD.

Respecto a las emisiones de CO y HC aunque son más propias de motores MEP que de MEC, se han tenido en cuenta en la presente tesis doctoral. No se han analizado emisiones de partículas (PM) puesto que las técnicas de caracterización de partículas mediante CFD actuales carecen de precisión. Las emisiones de SO_x tampoco se han analizado en la presente tesis doctoral puesto que éstas provienen del combustible (en especial si se emplean fuel-oils pesados) y la manera de reducirlas es utilizando combustibles bajos en azufre o post-tratamiento de los gases de escape, ambas medidas fuera del alcance de la presente tesis doctoral.

4. Metodología

En el presente apartado se describe la principal metodología seguida, concretamente las técnicas de CFD, MCDM y ANN.

4.1. CFD

Tal y como se indicó anteriormente, el término CFD proviene de las siglas en inglés “computational fluid dynamics”, lo cual se traduce al castellano como dinámica de fluidos computacional. Esta metodología se basa en establecer una división del dominio de cálculo, considerado como continuo en la mecánica de fluidos clásica, en elementos discretos en los que se resuelven las ecuaciones gobernantes mediante métodos numéricos.

Las simulaciones numéricas se realizaron mediante el software OpenFOAM (open field operation and manipulation). Se trata de un software de CFD gratuito y de código abierto desarrollado por Henry Weller y Hrvoje Jasak en 1989 en el Imperial College de Londres, bajo el nombre de FOAM, y lanzado como software de código abierto en 2004 con el nombre de OpenFOAM. Actualmente cuenta con una importante comunidad científica de usuarios y se actualiza periódicamente incluyendo contribuciones tanto del equipo desarrollador como de la comunidad científica de usuarios, lo cual lo hace muy competitivo en comparación con otros programas comerciales de CFD tales como Ansys Fluent, Star-CD, Flow 3D, etc. Los elevados precios de las licencias de los softwares comerciales de CFD hacen que los softwares libres se conviertan en una competencia importante, siendo OpenFOAM considerablemente el más conocido y empleado a día de hoy. Cabe destacar la continua expansión de este software, siendo cada vez más los usuarios, tanto a nivel profesional como académico, que lo utilizan. Por defecto, OpenFOAM se puede aplicar a numerosos casos de CFD tales como problemas básicos de CFD, flujo compresible, reacciones químicas, combustión, turbulencia, transferencia de calor, turbomáquinas, sólidos, flujo supersónico, electromagnetismo, flujos multifásicos, etc. OpenFOAM es, ante todo, código escrito en lenguaje C++. Aunque cuenta con una amplia gama de funcionalidades para hacer simulaciones de CFD, permite personalizar y ampliar sus funcionalidades para

adaptarlas a cada estudio particular, característica que constituye el principal motivo de elección de este software para la presente tesis doctoral.

En lo que sigue se describirá el procedimiento utilizado para el motor MAN D2840LE V10. Para el motor Wärtsilä 6L 46 los pasos serían similares, con lo cual no se describen de nuevo. Una fotografía del motor MAN D2840LE V10 analizado se muestra en la Fig. 5, y las principales especificaciones técnicas se resumen en la Tabla 1. Se trata de un motor diésel de cuatro tiempos, sobrealimentado y de inyección directa. Consta de 10 cilindros en V dispuestos a 90°, con una cilindrada unitaria de 1827 cm³/cilindro. El presente estudio se ha realizado con el motor funcionando a plena carga, desarrollando una potencia de 320 kW a un régimen de 1500 rpm y con un consumo específico de 197 g/kWh.



Figura 5. Motor MAN D2840LE V10 analizado.

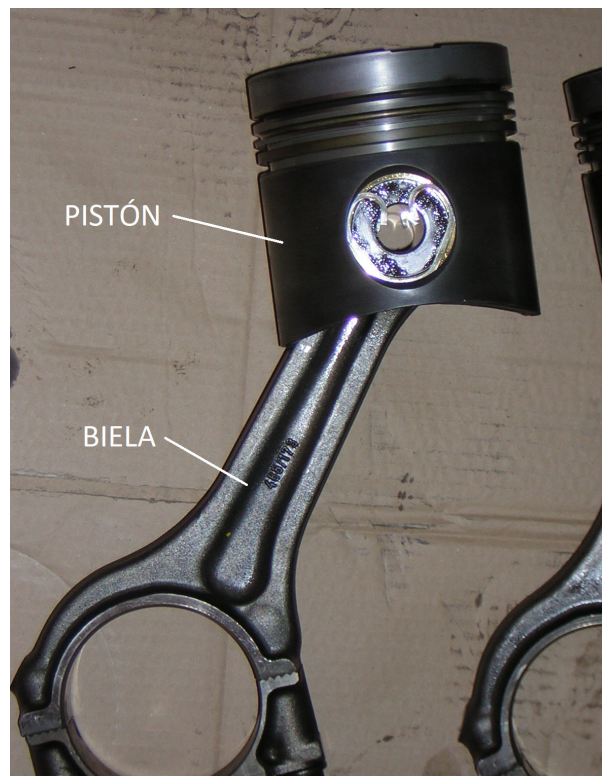
Tabla 1. Especificaciones del motor a plena carga.

| Parámetro | Valor |
|----------------------------------|--------------|
| Potencia (kW) | 320 |
| Velocidad del motor (rpm) | 1500 |
| Número de cilindros | 10 |
| Cilindrada (cm ³) | 18270 |
| Diámetro del cilindro (mm) | 128 |
| Carrera (mm) | 142 |
| Relación de compresión | 13,5:1 |
| Consumo (g/kWh) | 197 |
| Presión de inyección (bar) | 220 |
| Número de orificios de inyección | 4 |

En los motores diésel de inyección directa, la cámara de combustión suele estar situada en un hueco localizado en la cabeza del pistón. Para el motor del presente trabajo, los pistones-bielas se muestran en las Figs. 6 (a) y (b) y las cabezas de los pistones con la cámara de combustión en la Fig. 6 (c).



(a)



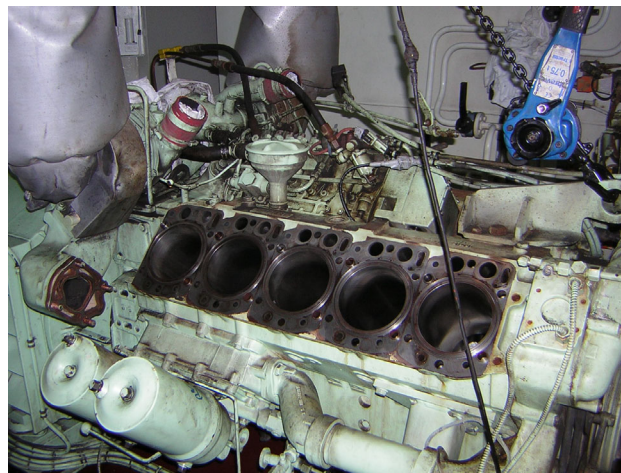
(b)



(c)

Figura 6. Pistones-bielas del motor MAN D2840LE V10; (a) conjunto de los 10 pistones-bielas; (b) detalle de uno de los pistón-biela; (c) detalle de las cámaras de combustión situadas en las cabezas de los pistones.

La Fig. 7 (a) muestra un lateral del motor con la culata desmontada, en el cual se pueden observar cinco de sus cilindros. Los otros cinco cilindros estarían en el otro lateral. La Fig. 7 (b) muestra en detalle uno de los cilindros.



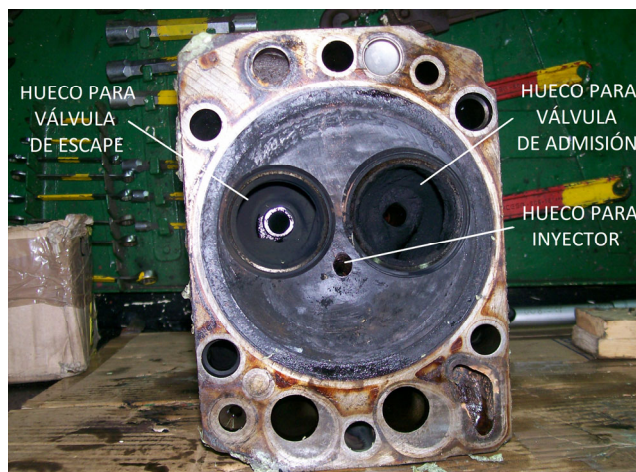
(a)



(b)

Figura 7. (a) Lateral del motor MAN D2840LE V10 con culata desmontada; (b) detalle de uno de los cilindros.

La culata se muestra en la Fig. 8 (a). En dicha figura se pueden observar dos orificios correspondientes al hueco para las válvulas, la de admisión mayor que la de escape. También se observa un orificio de menor diámetro correspondiente al hueco para el inyector. En la Fig. 8 (b) se muestran las válvulas.



(a)



(b)

Figura 8. (a) Culata del motor MAN D2840LE V10; (b) Válvulas.

El sistema de inyección se basa en un inyector Bosch DLLA 136 S 943. La Fig. 9 (a) muestra varios de estos inyectores y la Fig. 9 (b) uno de los inyectores desmontado.



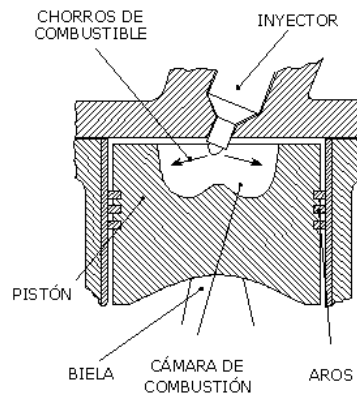
(a)



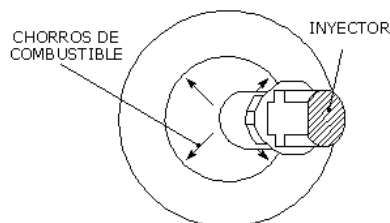
(b)

Figura 9. Inyectores Bosch DDLA 136 S 943; (b) inyector desmontado.

Cada inyector va colocado en el centro de la cámara de combustión con cierta inclinación, tal y como se indica en la Fig. 10 (a). Este inyector consta de cuatro orificios por los que se inyecta el combustible, los cuales se representan en la Fig. 10 (b).



(a)



(b)

Figura 10. (a) Sección en vista lateral del inyector en el cilindro; (b) vista en planta del inyector en el cilindro.

La malla empleada para modelar el motor se muestra en la Fig. 11. Debido al movimiento del pistón y válvulas, la malla se actualiza en cada paso de tiempo. Concretamente, la Fig. 11 (a) muestra la malla 3D en la posición de punto muerto inferior (PMI). La Fig. 11 (b) muestra la sección A-A en la posición de PMI y la Fig. 11 (c) la sección A-A en la posición de punto muerto superior (PMS). Tal y como se muestra, ambas válvulas permanecen cerradas tanto en la posición PMI como PMS. El número de elementos de la malla varía desde 32000 en el PMS a 450000 en el PMI. El tipo de elementos es hexaédrico. La cabeza del cilindro, especialmente alrededor de las válvulas, ha sido refinada para capturar las complejas características del fluido en esa zona.

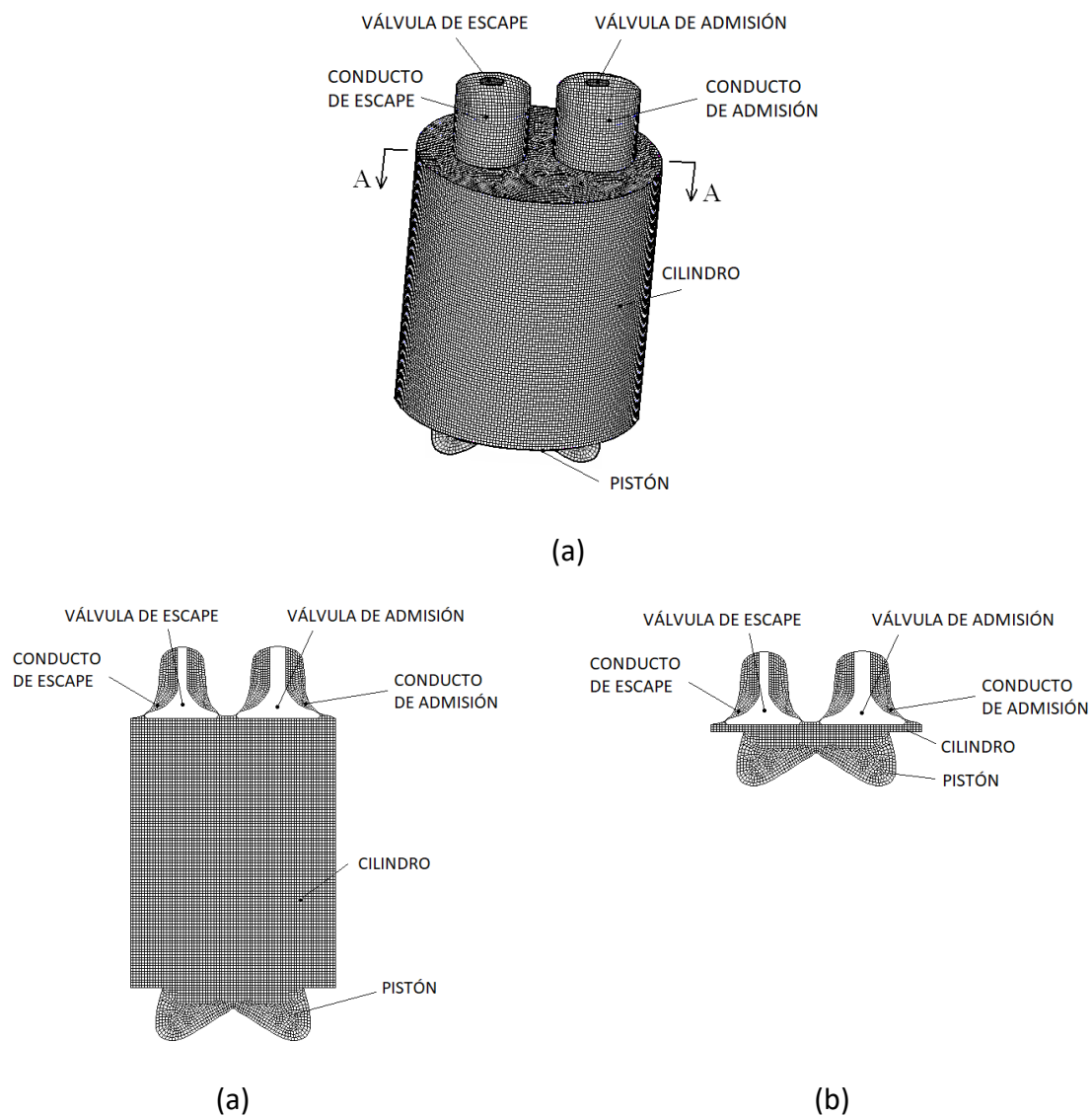


Figura 11. Malla computacional; (a) vista 3D en posición PMI; (b) sección AA de la malla en posición PMI; (c) sección AA de la malla en posición PMS.

Tal y como se indicó anteriormente, las simulaciones se realizaron mediante el software OpenFOAM. Los cálculos se basaron en las ecuaciones RANS (Navier-Stokes con el promedio de Reynolds, del inglés “Reynolds averaged Navier-Stokes”) de conservación de la masa, momento y energía, Ecs. (10-12) respectivamente. Respecto a turbulencia, se ha empleado el modelo k-ε.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\rho \overline{u_i u_j'}) \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i H) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_h} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) + S_{rad} \quad (12)$$

En las ecuaciones anteriores, ρ es la densidad, τ_{ij} el tensor de esfuerzos viscosos, σ_h el número de Prandtl turbulento, μ_t la viscosidad turbulenta, H la entalpía y S_{rad} un término fuente para contemplar los efectos de la radiación.

Respecto a las reacciones químicas que tienen lugar durante el proceso de combustión, varias ecuaciones adicionales deben de ser añadidas al modelo. Dado un conjunto de N especies químicas y m reacciones, Ec. (13), la fracción másica de cada especie, f_k, se ha calculado mediante la Ec. (14).



$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i f_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \right) + S_k \quad (14)$$

En las ecuaciones anteriores, v'_{kj} son los coeficientes estequiométricos de las especies que actúan como reactivos M_k en la reacción j, v''_{kj} los coeficientes estequiométricos de las especies que actúan como productos M_k en la reacción j, S_{ct} el número de Smidth turbulento y S_k la tasa neta de producción de la especie M_k mediante reacción química,

dada por el peso molecular multiplicado por la tasa de producción de las especies, Eq. (15).

$$S_k = MW_k \frac{d[M_k]}{dt} \quad (15)$$

siendo MW_k el peso molecular de la especie M_k y $[M_k]$ su concentración. La tasa de progression neta viene dada por la producción de la especie M_k menos la destrucción de la especie M_k a lo largo de las m reacciones:

$$\frac{d[M_k]}{dt} = \sum_{j=1}^m \left\{ (v_{kj}'' - v_{kj}') \left[k_{fj} \prod_{k=1}^N [M_k]^{v_{kj}'} - k_{bj} \prod_{k=1}^N [M_k]^{v_{kj}''} \right] \right\} \quad (16)$$

donde k_{fj} y k_{bj} son las constantes de reacción hacia adelante (forward) y hacia atrás (backward) para cada reacción j .

Respecto a esquemas cinéticos, como modelo de combustión de diesel-oil se ha utilizado el esquema cinético de Ra y Reitz (2008), basado en 131 reacciones y 41 especies. Como modelo de formación de NO_x , se ha utilizado el esquema cinético de Yang y col. (2003), basado en 43 reacciones y 20 especies. Como modelo de reducción de NO_x , se ha utilizado el esquema cinético de Miller y Glarborg (1996), basado en 131 reacciones y 24 especies. Respecto al uso de amoniaco como combustible, como modelo de combustión de amoniaco se ha utilizado el esquema cinético de Mathieu y Peterson (2015).

4.2. MCDM

Los métodos de decisión multi-criterio (MCDM, del inglés “multi-criteria decision-making”) constituyen una herramienta formal para manejar situaciones complejas de toma de decisiones. Constituyen un método para tomar decisiones coherentemente en lugar de utilizar la intuición.

En la presente tesis doctoral se utilizaron técnicas MCDM para elegir el patrón de inyección más adecuado, concretamente se analizaron pre-inyecciones de combustible y se ha utilizado MCDM para determinar la más apropiada cantidad de combustible pre-inyectado (C), duración de pre-inyección (D) e instante de comienzo de pre-

inyección (S). Realizar una pre-inyección disminuye la temperatura y la presión durante la combustión, lo cual resulta en una reducción de NOx.

El modelo de CFD desarrollado se utilizó para proporcionar los datos necesarios para llevar a cabo el enfoque MCDM. Se analizaron 125 casos, que se ilustran esquemáticamente en la Fig. 12. Como puede verse, se emplearon cinco cantidades de pre-inyección: 5%, 10%, 15%, 20% y 25%; cinco duraciones de pre-inyección: 1º CA (ángulo del cigüeñal), 2º CA, 3º CA, 4º CA y 5º CA; y cinco instantes de comienzo de pre-inyección: -22º CA ATDC (crankshaft angle after top dead center, en castellano, ángulo de cigüeñal después del punto muerto superior), -21º CA ATDC, -20º CA ATDC, -19º CA ATDC y -18º CA ATDC. De este modo resultan los $5 \times 5 \times 5 = 125$ casos.

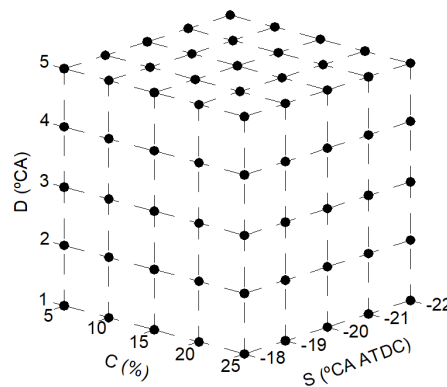


Figura 12. Representación esquemática de los 125 casos analizados.

Se consideraron cuatro criterios: SFC, NO_x, CO y HC. Teniendo en cuenta las 125 alternativas analizadas, se puede constituir una matriz de datos $m \times n$ con $m = 125$ filas y $n = 4$ columnas, Ec. (17). Cada elemento X_{ij} indica el valor de la alternativa i cuando se evalúa en términos del criterio de decisión j .

$$D = \begin{pmatrix} X_{11} & \dots & X_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{m1} & \dots & X_{mn} \end{pmatrix} \tag{17}$$

Un aspecto importante en los métodos MCDM es establecer las ponderaciones de los criterios, es decir, el grado de importancia de cada criterio. Aunque se pueden encontrar varios métodos objetivos en la literatura, se recomiendan métodos

subjetivos para establecer los pesos de los criterios, ya que éstos son definidos directamente por expertos en la materia. Los métodos objetivos de ponderación de criterios sólo se recomiendan cuando no hay acuerdo entre los expertos o cuando la objetividad es demasiado importante. De acuerdo con esto, se consideraron dos requisitos principales, consumo y emisiones. Se otorgó la misma importancia al consumo y las emisiones, es decir, el 50%. En cuanto a las emisiones, la importancia de NO_x, CO y HC también se distribuyó por igual, es decir, un 33,3% para cada uno. Estos valores en base unitaria se muestran en la Tabla 2. El peso de cada criterio se obtiene multiplicando el peso del requisito por el peso del sub-requerimiento, lo que lleva a 0,5, 0,167, 0,167 y 0,167 para SFC, NO_x, CO y HC, respectivamente. Estos pesos también suman 1. Debido a la subjetividad a la hora de elegir los pesos de los criterios, también se llevó a cabo un análisis de sensibilidad de los valores asignados a los pesos, analizando su influencia en los resultados obtenidos.

Tabla 2. Pesos de los criterios, en base unitaria.

| Requerimiento (α) | Sub-requerimiento (β) | $\alpha \cdot \beta$ |
|----------------------------|-------------------------------|----------------------|
| SFC (0,5) | SFC (1) | 0,5 |
| | NO _x (0,333) | 0,167 |
| Emissions (0,5) | CO (0,333) | 0,167 |
| | HC (0,333) | 0,167 |
| SUMA: | | 1 |

Otro paso importante consiste en normalizar la matriz de decisiones. La normalización se realiza para eliminar las unidades de cada criterio con el fin de que todos los criterios se vuelvan adimensionales y para establecer las calificaciones de diferentes alternativas en un mismo rango. La normalización cambia los diferentes valores medibles en otros similares comparables, y la matriz de decisión normalizada es una matriz $m \times n$ dada por la Ec. (18), donde V_{ij} es el valor normalizado de X_{ij} . Como se mencionó anteriormente, un gran número de técnicas de normalización están disponibles en la literatura. Las más empleadas, que son las comparadas en uno de los trabajos entregados en la presente tesis doctoral, se resumen en la Tabla 3. En esta tabla se muestran las expresiones para normalizar cada término de la matriz de decisión, tanto para criterios beneficiosos como no beneficiosos. Los criterios

beneficiosos y no beneficiosos se refieren a aquellos cuyos valores mayores son deseables y no deseables, respectivamente. En el presente trabajo, todos los criterios considerados son no beneficiosos, ya que el objetivo es reducir SFC, NO_x, CO y HC tanto como sea posible. En la Tabla 3, X_{j,max} y X_{j,min} son la calificación máxima y mínima de las alternativas para cada criterio j.

$$N = \begin{pmatrix} V_{11} & \dots & V_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{m1} & \dots & V_{mn} \end{pmatrix} \tag{18}$$

Tabla 3. Métodos de normalización empleados en el presente trabajo.

| Técnica de normalización | Criterio | Expresión |
|------------------------------|----------------|---|
| Normalización máx lineal | Beneficioso | $V_{ij} = \frac{X_{ij}}{X_{j,max}}$ |
| | No beneficioso | $V_{ij} = 1 - \frac{X_{ij}}{X_{j,max}}$ |
| Normalización máx-mín lineal | Beneficioso | $V_{ij} = \frac{X_{ij} - X_{j,min}}{X_{j,max} - X_{j,min}}$ |
| | No beneficioso | $V_{ij} = \frac{X_{j,max} - X_{ij}}{X_{j,max} - X_{j,min}}$ |
| Normalización sum lineal | Beneficioso | $V_{ij} = \frac{X_{ij}}{\sum_{i=1}^m X_{ij}}$ |
| | No beneficioso | $V_{ij} = \frac{1/X_{ij}}{\sum_{i=1}^m (1/X_{ij})}$ |
| Normalización vectorial | Beneficioso | $V_{ij} = \frac{X_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^m X_{ij}^2}}$ |
| | No beneficioso | $V_{ij} = 1 - \frac{X_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^m X_{ij}^2}}$ |
| Normalización logarítmica | Beneficioso | $V_{ij} = \frac{\ln(X_{ij})}{\ln\left(\prod_{i=1}^m X_{ij}\right)}$ |
| | No beneficioso | $V_{ij} = \frac{1 - \frac{\ln(X_{ij})}{\ln\left(\prod_{i=1}^m X_{ij}\right)}}{m - 1}$ |

Una vez que se normalizó la matriz de decisión, se calculó el índice de adecuación para cada i -ésimo caso, IA_i , utilizando los tres procedimientos que se describen a continuación.

- Procedimiento WSM

También se denomina SAW (ponderación aditiva simple, del inglés “simple additive weighting”) y WLC (combinación lineal ponderada, del inglés “weighted linear combination”). Este método, propuesto por Churchman y Ackoff en 1954, es el enfoque MCDM más antiguo y más utilizado. De acuerdo con este método, el índice de adecuación viene dado por la Ec. (19), y teniendo en cuenta los procedimientos de normalización aplicados, la alternativa más adecuada es la correspondiente al IA máximo.

$$IA_i = \sum_{j=1}^n w_j V_{ij} \quad (19)$$

donde w_j el peso del j -ésimo criterio.

- Procedimiento WPM

También se denomina MEW (ponderación exponencial multiplicativa, del inglés “multiplicative exponential weighting”). Este método es muy similar al WSM. La principal diferencia es que los parámetros ponderados son multiplicados en lugar de sumados. Los pesos de los criterios y cada criterio son elevados a una potencia correspondiente al peso del criterio, Ec. (20).

$$IA_i = \prod_{j=1}^n (V_{ij})^{w_j} \quad (20)$$

- Procedimiento TOPSIS

El procedimiento TOPSIS (técnica de orden de preferencia por semejanza a solución ideal, del inglés “technique for order of preference by similarity to ideal solution”) se basa en el concepto de que la mejor alternativa debe tener la distancia más corta de la solución ideal positiva y la distancia más larga de la solución ideal negativa. La solución ideal positiva es una solución hipotética para la cual todos los valores de los criterios corresponden a los valores de los criterios máximos en la base de datos que comprende las soluciones satisfactorias y la solución ideal negativa es una solución hipotética para la cual todos los valores de los criterios corresponden a los valores mínimos de los criterios en la base de datos. El método TOPSIS ofrece así una solución que no solo está más cerca de lo hipotéticamente mejor, sino también lo más alejado de lo hipotéticamente peor. La distancia euclidiana evalúa la cercanía relativa de las alternativas a estas soluciones, y el método define un índice llamado 'índice de similitud' (o cercanía relativa) a la solución ideal positiva combinando la proximidad a la solución ideal positiva y la lejanía de la solución ideal negativa. Luego, elige una alternativa con la máxima similitud con la solución positiva-ideal.

4.3. ANN

Las redes neuronales artificiales (del inglés “artificial neural networks”) se basan en simular la estructura de las neuronas biológicas y su capacidad de aprendizaje. Las ANN emplean neuronas artificiales de manera similar a las neuronas biológicas en el cerebro humano. A través del proceso de entrenamiento, una ANN toma las variables de entrada y las interrelaciona para obtener las variables de salida. Las ANNs aprenden las relaciones entre las entradas y las salidas y proporcionan predicciones de salida. Una ventaja importante es que una ANN bien entrenada es rápida para predecir las variables de salida. Otra ventaja importante es que permiten resolver muchos problemas difíciles de modelar matemáticamente, evitando con ello modelos físicos y/o matemáticos complejos. En los últimos años, las ANNs se han utilizado ampliamente en muchos campos tales como la ingeniería, la ciencia, la economía, etc.

Básicamente, una ANN actúa como una “caja negra” a la cual se le proporcionan las entradas (inputs) y devuelve las salidas (outputs), tal y como se indica en la Fig. 13.

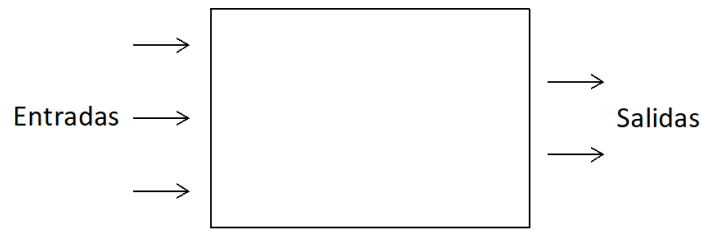


Figura 13. Concepto genérico de red neuronal.

Las ANNs son estructuras que imitan la intuición humana. La ANN es capaz de simular el cerebro humano, y es capaz de procesar información y proporcionar las predicciones correspondientes. El cerebro humano utiliza neuronas para procesar los datos. La Fig. 14 muestra la estructura de las neuronas biológicas. Los datos se transfieren desde las sinapsis al axón a través de medios electroquímicos llamados neurotransmisores. El cerebro humano contiene miles de millones de neuronas interconectadas. La información en el cerebro se propaga a través de medios electroquímicos conocidos como neurotransmisores y se transfiere a lo largo de las neuronas. La red neuronal artificial imita esta configuración. El principio de funcionamiento de las ANN se basa en nodos interconectados que pueden procesar información.

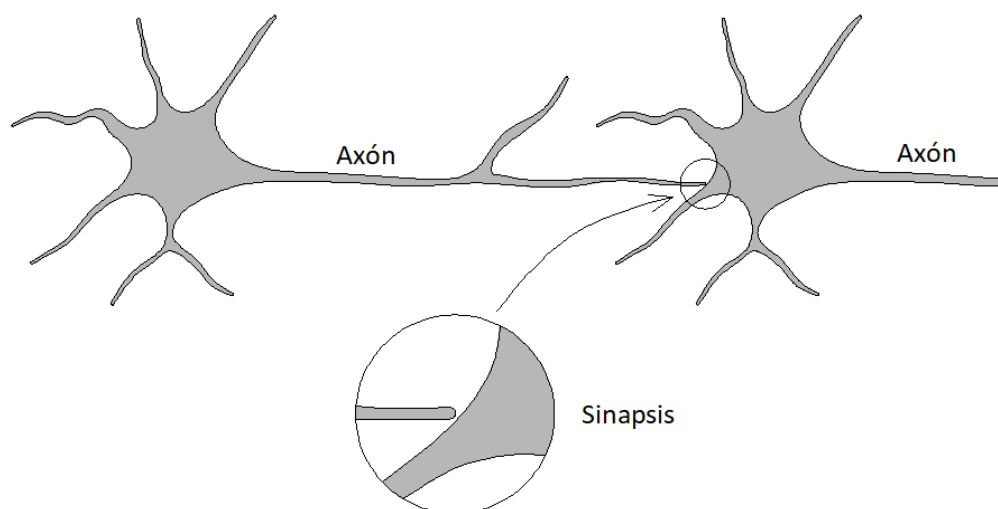


Figura 14. Representación esquemática de neuronas biológicas en el cerebro humano.

El aprendizaje entre las entradas y salidas de una ANN se realiza mediante un proceso de entrenamiento matemático que minimiza los errores y proporciona una predicción óptima. Las neuronas de la ANN están organizadas en tres capas: entrada, oculta y salida, Fig. 15. La capa (layer) de entrada corresponde a las variables independientes. Por otro lado, las capas de salida corresponden a la/s variable/s dependiente/s. No existe una regla exacta para definir el número de capas ocultas y nodos ocultos, y en la literatura se pueden encontrar varios métodos para determinarlos. Generalmente, se recomienda una sola capa oculta para la mayoría de los problemas, y la estructura multicapa solo se recomienda para problemas complejos (Ozcan y col., 2020; Golmohammadi, 2011; Sietsma y Dow, 1991) ya que agregar capas ocultas puede causar memorización en lugar de generalización. Cada nodo de entrada tiene asignado un peso y funciones de transferencia relacionadas con los nodos.

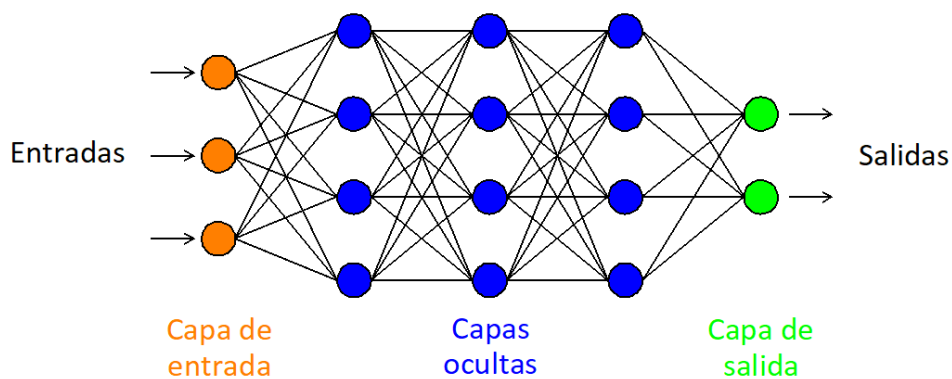


Figura 15. Estructura de una red neuronal.

Dos problemas comunes en las ANN son el infra-ajuste y el sobre-ajuste. Una ANN debe ajustarse con precisión a los datos de entrada y salida, como se muestra en la Fig. 16 (a). Un infra-ajuste tiene lugar cuando la ANN es demasiado simple o la muestra de datos es demasiado pequeña. En este caso, la ANN no se ajusta con precisión a los datos, como se muestra en la Fig. 16 (b). Por otro lado, el sobre-ajuste se produce cuando el modelo memoriza en lugar de generalizar. En este caso, la ANN se ajusta demasiado bien durante el proceso de entrenamiento, como se muestra en la Fig. 16 (c), pero se ajustaría mal en el conjunto de datos de prueba. Con respecto al número de neuronas en la capa oculta, una cantidad baja puede generar un alto coste

computacional y un sobre-ajuste, mientras que un número bajo de neuronas puede conducir a un infra-ajuste.

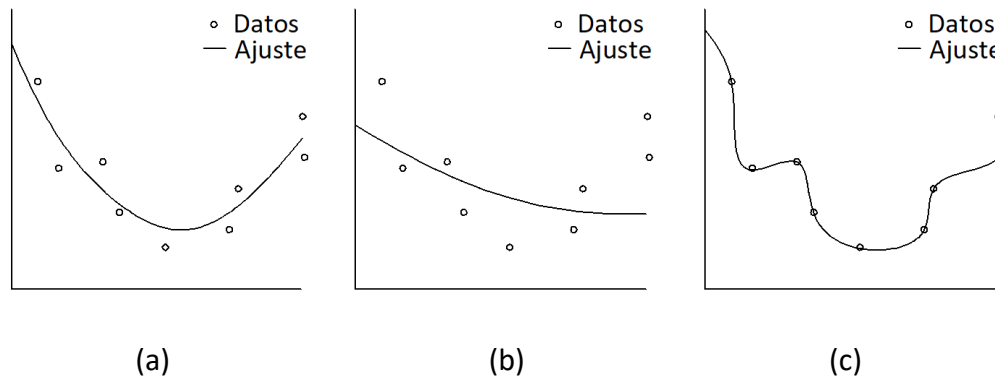


Figura 16. Ajuste de datos; (a) ajuste apropiado; (a) infra-ajuste (under-fitting); (c) sobre-ajuste (over-fitting).

En la presente tesis doctoral se utilizó el software Matlab 2021 para desarrollar una red neuronal con el objetivo de caracterizar las emisiones y consumo del motor en función de ciertos parámetros de funcionamiento, concretamente en el trabajo presentado número 2. En dicho trabajo, se utilizaron 180 datos para establecer la ANN. Del total de esos 180 datos, 126 (70%) se utilizaron para entrenar la red neuronal, 27 (15%) para testarla y 27 (15%) para validarla. En el proceso de entrenamiento consiste en procesar las entradas y comparar sus resultados con las salidas. Se caracterizan los errores y se ajustan los pesos. Este proceso continúa una y otra vez y los pesos se actualizan continuamente. Cuando el entrenamiento está en curso, el error se vuelve cada vez más pequeño a medida que aumenta el número de iteraciones. Cuando el error aumenta o se alcanza el valor objetivo, el entrenamiento se detiene porque existe el riesgo de sobreajuste. Hay muchos algoritmos disponibles para ajustar los pesos durante el entrenamiento. Una vez finalizado el proceso de aprendizaje, se inicia el proceso de testeo. Si los resultados no son aceptables, el proceso vuelve a la etapa de aprendizaje y continúa hasta que se acerca tanto al aprendizaje como a la prueba. El proceso de validación se realiza para comprobar los resultados con algunos datos no utilizados en el entrenamiento y las pruebas.

La Fig. 17 muestra los resultados del total de estos procesos de entrenamiento (training), testeo (training) y validación (validation). En dicha figura, R representa el coeficiente de correlación, Ec. (21). Tal y como se observa en la figura, el valor global de R está cerca del valor que sería el óptimo $R = 1$, correspondiente a los ajustes diagonales, es decir, con todos los puntos en la diagonal. Tal y como se puede apreciar, los puntos de la figura se encuentran prácticamente en la diagonal, lo que indica un ajuste de datos apropiado, es decir, una buena capacidad de predicción de la red neuronal. Una vez entrenada con estos 180 datos proporcionados por el CFD, la red neuronal se utilizó para analizar 337881 casos. El análisis de este elevado número de casos sería inviable mediante técnicas de CFD únicamente debido al elevado tiempo de cálculo que sería necesario.

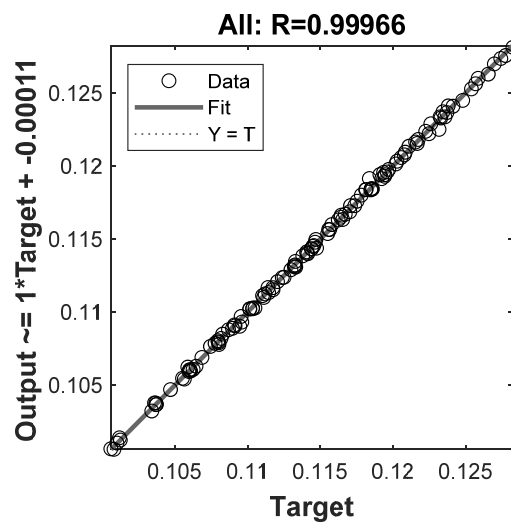


Figura 17. Gráficos de regresión de la red neuronal.

$$R = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^m [(t_i - o_i)^2]}{\sum_{i=1}^m o_i^2}} \tag{21}$$

siendo t el valor objetivo, o la salida proporcionada por la red neuronal y m el número de datos utilizados.

5. Discusión de los trabajos presentados

En este apartado se resume el contenido de los trabajos presentados. Concretamente se presentan las siguientes publicaciones, todas ellas indexadas en JCR de Web of Science:

- Publicación 1. Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques.
- Publicación 2. Analysis of the pre-injection system of a marine diesel engine through multiple-criteria decision-making and artificial neural networks.
- Publicación 3. Possibilities of ammonia as both fuel and NO_x reductant in marine engines: a numerical study.

5.1. Discusión de la publicación 1

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques. Brodgradnja, vol. 72, pp. 1-17, 2021.

En este trabajo se utilizó un modelo numérico de CFD para caracterizar el consumo y emisiones del motor diésel marino el Wärtsilä 6L 46 funcionando con 100% diesel-oil. Este modelo de CFD se utilizó para analizar varios parámetros de pre-inyección, tales como el instante de inicio de la pre-inyección, la cantidad y la duración. El objetivo es reducir los óxidos de nitrógeno (NO_x), y también se analizó el efecto sobre el consumo y las emisiones de monóxido de carbono (CO) e hidrocarburos (HC). Realizar una pre-inyección disminuye la temperatura y la presión durante la combustión, lo cual resulta en una reducción de NO_x. El inconveniente de la pre-inyección es que se incrementa el consumo y las emisiones de CO y HC debido a que menores temperaturas de combustión fomentan combustiones incompletas, que son las principales causantes de CO y HC. Respecto al CO₂, el efecto resultó despreciable.

Debido a estos efectos contrapuestos de la pre-inyección respecto a reducir NO_x pero incrementar el consumo y otras emisiones, el presente trabajo propone un enfoque de toma de decisiones basado en técnicas multicriterio MCDM con el fin de seleccionar el patrón de pre-inyección más apropiado utilizando un procedimiento matemático en lugar de intuición.

Un importante aspecto en los modelos MCDM es el proceso de normalización. La normalización es necesaria para convertir los datos disponibles en una escala común adimensional, lo que permite clasificar y calificar alternativas. Es importante seleccionar una técnica de normalización adecuada y acerca de ello se pueden encontrar varios métodos en la literatura. El presente trabajo analiza cinco procedimientos de normalización conocidos, normalización máx lineal, normalización máx-mín lineal, normalización sum lineal, normalización vectorial y normalización logarítmica. Además, se aplicaron tres procedimientos MCDM: WSM, WPM y TOPSIS.

Se analizaron 125 casos correspondientes a diferentes combinaciones de inicios de pre-inyección, cantidad de combustible pre-inyectado y duraciones de pre-inyección. Las emisiones y consumo de los 125 casos fueron obtenidos mediante CFD. Como resultados se obtuvo que, para los tres procedimientos, los métodos de normalización máx lineal, sum lineal, vectorial y logarítmica condujeron al mismo resultado como más apropiado de los 125 casos analizados: -22º CA ATDC inicio de pre-inyección, 25% pre-inyección y 1º CA duración de pre-inyección. Sin embargo, el procedimiento de normalización de sum lineal proporcionó un resultado diferente que no se recomienda.

5.2. Discusión de la publicación 2

A. Analysis of the pre-injection system of a marine diesel engine through multiple-criteria decision-making and artificial neural networks. Polish Maritime Research, vol. 4, pp. 88-96, 2021.

Al igual que la publicación 1, la publicación 2 también se centra en patrones de pre-inyección para reducir los óxidos de nitrógeno en el motor marino Wärtsilä 6L 46 operando con 100% diesel-oil. También se utilizó el modelo CFD para caracterizar las emisiones y consumos del motor, analizando diferentes combinaciones de inicios de pre-inyección, cantidad de combustible pre-inyectado y duraciones de pre-inyección. También se utilizó MCDM para seleccionar la configuración más adecuada.

La diferencia con el trabajo anterior es que en lugar de 125 casos se analizaron un total de 337881. Como analizar 337881 casos utilizando CFD tardaría años debido al excesivo coste computacional, se empleó una ANN. Con ello se propone una metodología híbrida MCDM-ANN para analizar el motor.

5.3. Discusión de la publicación 3

Possibilities of ammonia as both fuel and NOx reductant in marine engines: a numerical study. Journal of Maritime Science and Engineering, vol. 10, 43, 2022.

Uno de los objetivos primordiales de esta publicación es avanzar en la descarbonización de los combustibles marinos. Para ello, se propone el empleo de amoníaco como combustible. Tal y como se mencionó previamente, la molécula de amoníaco, NH_3 , al no contener carbono, no produce CO_2 , CO ni HC en su combustión. Por el mismo motivo, al no contener azufre, tampoco produce SO_x .

En motores de ciclo Otto el empleo de amoníaco no presenta graves limitaciones. Sin embargo, de cara a la utilización en motores de ciclo diésel, el principal inconveniente del amoníaco es que se necesita una relación de compresión demasiado elevada para la autoignición dado que el amoníaco que tiene una temperatura de autoignición muy elevada. Por este motivo, el presente artículo propone una operación de combustible dual amoníaco y diesel-oil en la que se introduce amoníaco con el aire de admisión. Se analizaron varias proporciones amoníaco-diésel y se encontró que cuando se aumenta la proporción de amoníaco se obtienen reducciones importantes de dióxido de carbono, monóxido de carbono e hidrocarburos no quemados.

Desgraciadamente, el empleo de amoníaco como combustible no resuelven las emisiones de NO_x . Para reducir también el NO_x , se propone una segunda inyección de amoníaco a lo largo de la carrera de expansión. Con esta medida se pretende conseguir el efecto de equipos SCR (Selective Catalytic Reduction) pero sin la necesidad de emplear catalizadores, es decir, SNCR (Selective Non-Catalytic Reduction) y actuando dentro del cilindro en lugar de hacer un post-tratamiento de los gases de combustión. La medida propuesta condujo a importantes reducciones de NO_x pero a expensas de emitir cierta cantidad de amoníaco que no reacciona y N_2O , lo cual se propone analizar en trabajos futuros posteriores a la presente tesis doctoral.

6. Conclusiones

Debido a los preocupantes niveles de emisiones contaminantes provocadas por el sector marítimo, la presente tesis doctoral propone medidas de reducción de las mismas. Se presta especial interés al caso de los NO_x por su repercusión así como en un combustible alternativo de cara a la descarbonización del sector marítimo.

El trabajo se entrega a modo de compendio de publicaciones presentando tres artículos. En los artículos 1 y 2 se analiza el motor Wärtsilä 6L 46 funcionando con 100% diesel-oil. Como medida de reducción de NO_x se analiza el efecto de preinyección de combustible. Los resultados se obtuvieron utilizando un modelo de CFD, que permitió caracterizar el consumo y emisiones bajo diferentes condiciones de funcionamiento. No solamente la medida propuesta en la presente tesis doctoral, sino la mayoría de medidas de reducción de NO_x repercuten negativamente en el consumo y/o emisiones de otros gases no deseables, es decir, se reducen las emisiones de NO_x pero se aumenta el consumo y/o emisiones de otros gases no deseables. De acuerdo con ello, se aplicaron técnicas de decisión multicriterio MCDM para determinar los parámetros más idóneos de funcionamiento. También se emplearon ANNs con el fin de caracterizar el funcionamiento de motores bajo diversas configuraciones. La ventaja de las ANNs es que permiten analizar el motor de una manera mucho más rápida que las técnicas CFD.

En el artículo 3 presentado en la presente tesis doctoral se propuso el amoníaco como combustible alternativo de cara a una descarbonización del sector marítimo. Al contrario que en motores MEP, en motores MEC la implementación es complicada y se hace necesario utilizarlo a modo de dual-fuel. En el presente trabajo se propone un funcionamiento amoníaco y diesel-oil en el motor MAN 2840LE V10. Los análisis también se realizaron mediante técnicas de CFD. Las reducciones de CO₂, CO y HC fueron considerables sin embargo el empleo de amoníaco como combustible no resuelve el problema de emisiones de NO_x. Para ello, se analizó un novedoso método de reducción de NO_x que consiste en inyectar amoníaco directamente en la cámara de combustión, a lo largo de la carrera de expansión cuando los gases están a una

temperatura tal que esta segunda inyección de amoníaco funciona como reductor de NO_x en lugar de como combustible.

Con los resultados del presente trabajo se pretenden establecer unas directrices para el desarrollo de motores diésel menos contaminantes. El panorama actual hace que sea necesario avanzar hacia una descarbonización del sector marítimo, y el amoníaco es un combustible que puede ayudar en este sentido. Como inconvenientes principales recalcar su toxicidad y que en la combustión en un motor genera emisiones de amoníaco que no reaccionó y N_2O .

7. Bibliografía

Churchman, C. W.; Ackoff, R. L. An approximate measure of value. *Journal of Operations Research Society of America*, vol. 2, pp. 172–187, 1954.

European Energy Agency (EEA). Emission of Air Pollutants from Transport. Available online: <https://www.eea.europa.eu/dataand-maps/indicators/transport-emissions-of-air-pollutants-8/transport-emissions-of-air-pollutants-6#tab-related-briefings>.

Golmohammadi, D. Neural network application for fuzzy multi-criteria decision making problems. *International Journal of Production Economics*, vol. 131, pp. 490–504, 2011.

IMO (International Maritime Organization). International Convention for the Prevention of Pollution from Ships, MARPOL 73/78.

Kuiken, K. Diesel engines for ship propulsion and power plants. Target Global Energy Training, 2008.

Lamas Galdo, M.I.; Rodríguez Vidal, C.G.; Rodríguez García, J.D.; Fernández Quintás, M.V. Modelo de mecánica de fluidos computacional para el proceso de barrido en un motor Otto de dos tiempos. *DYNA*, vol. 86, pp.165-172, 2011.

Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G. Emissions from marine engines and NO_x reduction methods. *Journal of Maritime Research*, vol. 9, pp. 77-81, 2012.

Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G. Computational fluid dynamics analysis of the scavenging process in the MAN B&W 7S50MC two-stroke marine diesel engine. *Journal of Ship Research*, vol. 56, pp. 154-161, 2012.

Lamas Galdo, M.I.; Rodríguez Vidal, C.G.; Rodríguez García, J.D. Modelo de mecánica de fluidos computacional para el estudio de la combustión en un motor diésel de cuatro tiempos. *DYNA*, vol. 88, pp. 91-98, 2013.

Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G. Numerical model to study the combustion process and emissions in the Wärtsilä 6L 46 four-stroke marine engine. *Polish Maritime Research*, vol. 20, pp. 61–66, 2013.

Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G.; Aas, H.P. Computational fluid dynamics analysis of NO_x and other pollutants in the MAN B&W 7S50MC marine engine and effect of EGR and water addition. *International Journal of Maritime Engineering*, vol. 155, part A2, pp. A81-A88, 2013.

Mathieu, O.; Petersen, E.L. Experimental and modeling study on the high-temperature oxidation of ammonia and related NO_x chemistry. *Combustion and Flame*, vol. 162, pp. 554–570, 2015.

Miller, J.A.; Glarborg, P. Modeling the formation of N₂O and NO₂ in the thermal DeNO_x process. *Springer Series in Chemical Physics*, vol. 61, pp. 318–333, 1996.

Özcan, E.; Danişan, T.; Yumuşak, R.; Eren, T. An artificial neural network model supported with multi criteria decision making approaches for maintenance planning in hydroelectric power plants. *Eksploatacja i Niezawodno Maintenance and Reliability*, vol. 22, pp. 400–418.

Ra, Y.; D. Reitz, R.D. A reduced chemical kinetic model for IC engine combustion simulations with primary reference fuels. *Combustion and Flame*, vol. 155, pp. 713–738, 2008.

Rodríguez Vidal, C.G. Estudio de un motor de 2T con inyección directa y análisis CFD del sistema de barrido. Máster, Universidade da Coruña, Escuela Técnica Superior de Náutica y Máquinas, 2010.

Rodríguez Vidal, C.G.; Lamas Galdo, M.I. Descripción técnica y análisis CFD del motor marino de émbolos opuestos Fairbanks-Morse 38D8-1/8. *Ingeniería Naval*, no. 905, pp. 72-79, 2012.

Sietsma, J.; Dow, R.J.F. Creating artificial neural networks that generalize. *Neural Networks*, vol. 4, pp. 67–79, 1991.

Yang, H.; Krishnan, S.R.; Srinivasan, K.K.; Midkiff, K.C. Modeling of NO_x emissions using a superextended Zeldovich mechanism. *ASME 2003 Internal Combustion Engine and Rail Transportation Divisions Fall Technical Conference*, 2003.

Woodyard, D. *Pounder's marine diesel engines and gas turbines*. Elsevier, 2009.

Zincir, B. A short review of ammonia as an alternative marine fuel for decarbonised maritime transportation. Proceedings of the ICEESEN2020, Kayseri, Turkey, 19–21 November 2020.

Parte II. Publicaciones

En esta segunda parte se incluye el texto íntegro de las publicaciones que constituyen parte de la presente tesis doctoral.

Publicación 1

Carlos Gervasio Rodríguez; María Isabel Lamas; Juan de Dios Rodríguez; Claudio Giovanni Caccia. Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques. Brodogradnja, vol. 72, pp. 1-17, 2021.

Datos de la revista

Nombre: Brodogradnja

ISSN: 0007-215X

eISSN: 1845-5859

Primer año de publicación: 1950

Categoría en Web of Science: Engineering, Marine (en año 2021)

Factor de impacto: 1,5 (en año 2021)

Cuartil: Q3 (en año 2021)

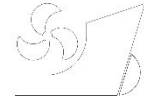
Ranking: 11/16 en categoría Engineering, Marine (en año 2021)

Brodogradnja/Shipbuilding/Open access



Volume 72 Number 4, 2021

Carlos Gervasio Rodríguez
María Isabel Lamas
Juan de Dios Rodríguez
Claudio Caccia

<http://dx.doi.org/10.21278/brod72401>

ISSN 0007-215X
eISSN 1845-5859

ANALYSIS OF THE PRE-INJECTION CONFIGURATION IN A MARINE ENGINE THROUGH SEVERAL MCDM TECHNIQUES

UDC 621.436.1:621.182.3

Original scientific paper

Summary

The present manuscript describes a computational model employed to characterize the performance and emissions of a commercial marine diesel engine. This model analyzes several pre-injection parameters, such as starting instant, quantity, and duration. The goal is to reduce nitrogen oxides (NO_x), as well as its effect on emissions and consumption. Since some of the parameters considered have opposite effects on the results, the present work proposes a MCDM (Multiple-Criteria Decision Making) methodology to determine the most adequate pre-injection configuration. An important issue in MCDM models is the data normalization process. This operation is necessary to convert the available data into a non-dimensional common scale, thus allowing ranking and rating alternatives. It is important to select a suitable normalization technique, and several methods exist in the literature. This work considers five well-known normalization procedures: *linear max*, *linear max-min*, *linear sum*, *vector*, and *logarithmic* normalization. As to the solution technique, the study considers three MCDM models: WSM (Weighted Sum Method), WPM (Weighted Product Method) and TOPSIS (Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution). The linear max, linear sum, vector, and logarithmic normalization procedures brought the same result: -22° CA ATDC pre-injection starting instant, 25% pre-injection quantity and 1-2° CA pre-injection duration. Nevertheless, the linear max min normalization procedure provided a result, which is different from the others and not recommended.

Key words: marine diesel engine; CFD; emissions; consumption

1. Introduction

Global pollution is currently reaching an alarming rate. In the marine field, marine engines are relevant sources of particulate matter (PM), NO_x, and other undesirable substances such as SO_x, CO₂, CO, HC, etc. [1-6]. Among those substances, NO_x and SO_x are currently receiving special attention due to the increasingly strict limitations imposed by the IMO (International Maritime Organization) and other organisms [7-16]. In recent years, the need to reduce NO_x emissions led to several measures. Briefly, these can be divided into *primary*

C.G. Rodriguez, M.I. Lamas,
J.D. Rodriguez, C. Caccia

Analysis of the pre-injection configuration in a
marine engine through several MCDM techniques

measures (which focus on the engine performance) and *secondary measures* (which focus on removing NO_x from the exhaust gases). Most of primary measures are of recent application. Among them, the present work focuses on modifying the injection system, particularly through pre-injection strategies. The main drawback of pre-injection policies (and most NO_x reduction methods in general), is that NO_x decreases at the expense of the increase in the emissions of other pollutants and/or overall fuel consumption. In accordance with this observation, it is crucially necessary to establish a formal procedure to select the most adequate pre-injection configuration. MCDM turns out to be a formal tool for handling decision problems involving conflicting criteria. Since its introduction in 1960, MCDM constitutes a continuously growing technique, employed in many fields. It is also referred to as MCDA (Multiple-Criteria Decision Analysis), MDDM (Multiple-Dimensions Decision Making), MODM (Multiple-Objective Decision Making), or MADM (Multiple-Attributes Decision Making).

The goal of MCDM is to find an appropriate compromise among conflicting criteria. In a nutshell, MCDM models consider different alternatives, criteria, and their corresponding weights. In most MCDM problems, criteria have different scales (e.g. consumption, emissions, mass, temperature...); for this reason, it is necessary to implement some procedures to normalize data and obtain a common non-dimensional scale. This allows the comparison of all data in order to provide a final score for each alternative. According to this, data normalization is a primary component of MCDM problems since it transforms the raw input data into numerical and comparable values. Several normalization methods have been proposed in the literature. Particularly, Jahan et al. [17] reviewed the state of the art about normalization techniques and identified. The effect of normalization procedures is still an open question and there is no consensus on an overall best method [18-19]. Consequently, the result may be different depending on the normalization technique employed [20]. As a matter of fact, several works compare different approaches [21-23]. Another important issue in MCDM models consists in the selection of the method. Several MCDM methods are available, and some authors affirm that choosing a MCDM method is a MCDM problem itself. In this regard, the so-called Pearson and Spearman correlations are useful to analyze the results deriving from different methods [24-26].

The present research aims at defining a pre-injection strategy to reduce the emission of NO_x in a commercial marine engine (the Wärtsilä 6L 46) using data from a CFD model which was built to collect data concerning SFC (Specific Fuel Consumption) and emissions of NO_x, CO, and HC using different pre-injection parameters.

The study uses data coming from 125 simulation cases carried out using different combinations of input parameters and employs MCDM techniques to define the most suitable alternative among them. It considers five normalization methods: *linear max* normalization, *linear max-min* normalization, *linear sum* normalization, *vector* normalization and *logarithmic* normalization. Moreover, the study compares the results of three different MCDM methods: WSM, WPM and TOPSIS.

2. Methodology

The first part of this section describes the engine and the corresponding CFD analysis. The second part shows the MCDM models, and the normalization techniques employed.

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques

C. G. Rodriguez, M.I. Lamas
J.D. Rodriguez, C. Caccia

2.1 Engine characteristics and CFD model

The marine engine Wärtsilä 6L 46 is a four-stroke diesel engine with 6 in-line cylinders. Each cylinder has 2 inlet and 2 exhaust valves. Previous works [27-33] describe the CFD model and its validation with experimental results.

The characterization of the pressure inside the cylinder of the engine employed the MALIN 6000 performance analyzer. It is a portable pressure transducer that can be connected to the bleed valve, located at the engine head. The characterization of the emissions of NO_x, CO, HC and CO₂ used the Gasboard-3000 series gas analyzers.

In order to characterize data at different loads, the engine operated two hours at different setups (25%, 35%, 50%, 75% and 100% load). Eight tests for each load condition have been performed.

The free software OpenFOAM was used for the CFD computations. A new solver was programmed using C++ language. The solver has the following characteristics:

- it solves the equations of conservation of mass, momentum, and energy in the domain,
- for the temporal evolution, it adopts a simple backward Euler scheme, using a constant time step corresponding to 0.1° CA,
- the spatial discretization uses a second order scheme,
- the PISO algorithm implements the pressure-velocity coupling,
- the employed turbulence model is k-ε,
- the fuel heat-up and evaporation is computed by the Dukowicz model [34],
- the fuel droplet and breakup is computed by the Kelvin-Helmoltz and Rayleigh-Taylor model [35],
- the combustion, NO_x formation, and NO_x reduction are modeled through the schemes developed by Ra and Reitz [36], Yang *et al.* [37], and Miller and Glarborg [38], respectively.

Figure 1 shows the mesh employed for the computational simulations. Fig. 1(a) represents the 3D mesh at TDC (top dead center) position, while Figs. 1(b) and 1(c) a cross section at BDC (bottom dead center) and TDC positions, respectively. The alternative cylinder movement was imposed to the mesh, as well as the opening-closing movement of the valves. This mesh is composed by 50125 elements at TDC and 802527 at BDC, and it is composed by hexahedrons and tetrahedrons.

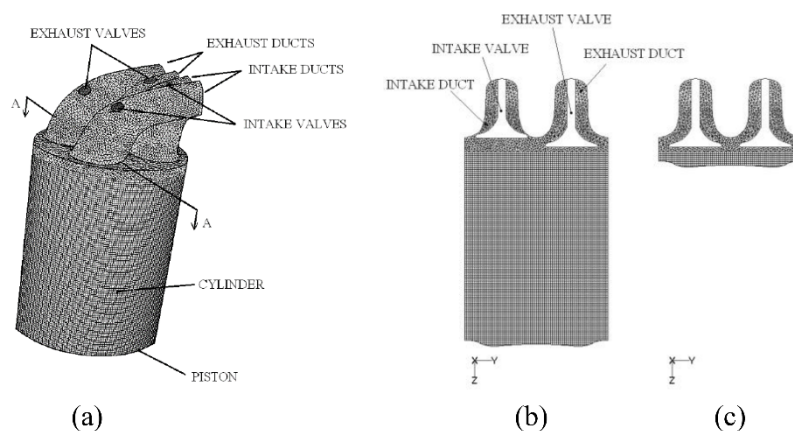


Figure 1. (a) 3D mesh at BDC; (b) AA section at BDC; (c) AA section at TDC.

C.G. Rodriguez, M.I. Lamas,
J.D. Rodriguez, C. Caccia

Analysis of the pre-injection configuration in a
marine engine through several MCDM techniques

Several mesh sizes have been considered in order to analyze their effects on the results. Table 1 summarizes the results obtained from three meshes of different sizes. The table shows the number of elements of these meshes at BDC and the error between experimental and numerical results regarding pressure and emissions of NO_x, CO, HC and CO₂. Since the results obtained with the meshes 2 and 3 were similar, the mesh 2 was selected for the computations carried out on the present work.

Table 1 Mesh independence test results.

| Mesh | 1 | 2 | 3 |
|---------------------------|---------|---------|-----------|
| Number of elements | 501,769 | 802,527 | 1,264,873 |
| Pressure error (%) | 4.2 | 4.1 | 4.1 |
| NO _x error (%) | 5.1 | 4.9 | 4.9 |
| CO error (%) | 8.1 | 7.9 | 7.9 |
| HC error (%) | 6.5 | 6.4 | 6.4 |
| CO ₂ error (%) | 4.7 | 4.6 | 4.6 |

Figs. 2 and 3 show the correspondence between experimental and numerical results . These figures illustrate the emissions, consumption and pressure obtained both numerically and experimentally. As it can be seen, the CFD model shows a good agreement in SFC, HC, CO, and CO₂ with respect to experimental results. Regarding NO_x emissions, the values obtained numerically are higher than the experimental ones for all engine loads. The main reason is that compression ignition engines, as opposed to spark ignition engines, operate under lean conditions. Most NO_x formation kinetic models are based on NO thermal mechanism, which becomes significant at high temperatures, and for that reason they are not able to properly model locally lean, low-temperature regions which are typical in compression ignition engines and less common in spark ignition engines [39, 40]. Nevertheless, the numerical model predicts the NO_x trend with an average error of 4.9%, and it is thus considered appropriate for the present work.

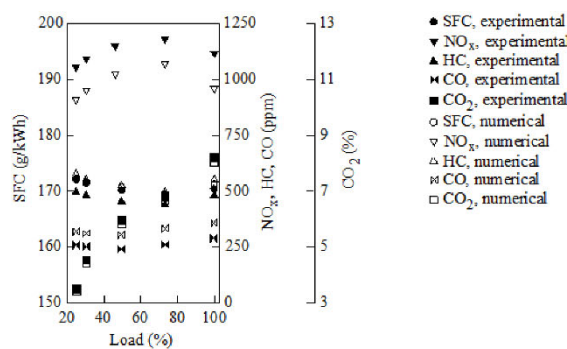


Fig. 2 Emissions and consumption at 20 to 100% load.

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques

C. G. Rodriguez, M.I. Lamas
J.D. Rodriguez, C. Caccia

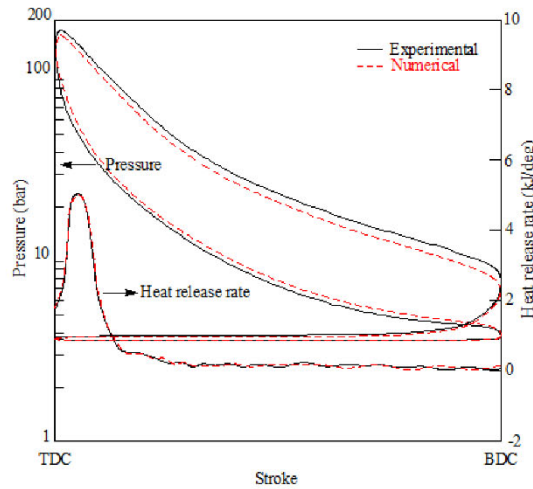


Fig. 3 In-cylinder pressure at 100% load.

2.2 MCDM analysis

The CFD model described in the previous section was employed to generate the data necessary to carry out the MCDM approach. 125 cases were analyzed, and they are schematically illustrated in Fig. 4. As can be seen, five pre-injection quantities (Q) were employed: 5%, 10%, 15%, 20%, and 25%; five pre-injection durations (D): 1° CA (Crank Angle), 2° CA, 3° CA, 4° CA, and 5° CA; and five pre-injection starting instants (S): -22° CA ATDC (Crank Angle After Top Dead Center), -21° CA ATDC, -20° CA ATDC, -19° CA ATDC, and -18° CA ATDC. These data ranges were chosen in order to define an appropriate engine performance. Pre-injection quantities higher than 25% and pre-injection starting instants before -22° are not recommended [32].

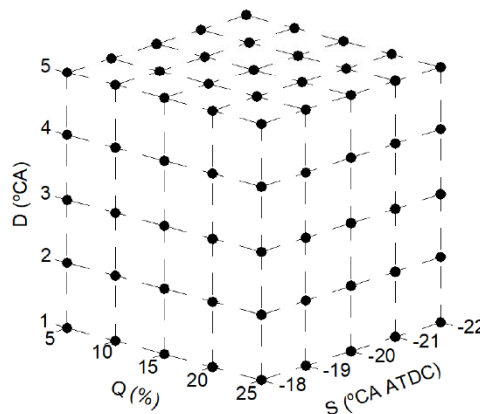


Fig. 4 Cases analyzed.

Taking into account the 125 simulations performed, and the four criteria considered: SFC, NO_x, CO, and HC, a $m \times n$ data matrix can be constituted with $m = 125$ rows and $n = 4$ columns, as shown in Eq. (1). This matrix is highlighted in red color in Table 2. To simplify, this table

C.G. Rodriguez, M.I. Lamas,
J.D. Rodriguez, C. Caccia

Analysis of the pre-injection configuration in a
marine engine through several MCDM techniques

only exhibits the first, second and last alternative (row). The case number and corresponding pre-injection starting angle, quantity and duration are also shown in this table.

$$DM = \begin{pmatrix} X_{11} & \dots & X_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{m1} & \dots & X_{mn} \end{pmatrix} \tag{1}$$

Table 2 Decision matrix.

| Alternative (<i>i</i>) | S (°CA ATDC) | Q (%) | D (°CA) | Criterion (<i>j</i>) | | | |
|-----------------------------|--------------------|----------|------------|------------------------|----------------------------|---------------|---------------|
| | | | | <i>j</i> = 1 | <i>j</i> = 2 | <i>j</i> = 3 | <i>j</i> = 4 |
| | | | | SFC (g/kWh) | NO _x (g/kWh) | CO (g/kWh) | HC (g/kWh) |
| 1 | -22 | 5 | 1 | 190.9 | 7.38 | 4.65 | 5.72 |
| 2 | -22 | 5 | 2 | 189.0 | 7.83 | 4.67 | 5.73 |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| 125 | -18 | 25 | 5 | 174.5 | 10.86 | 4.88 | 5.92 |
| Minimum value | | | | 173.4 | 3.70 | 4.57 | 5.60 |
| Maximum value | | | | 206.3 | 11.79 | 5.02 | 6.12 |

An important aspect in MCDM methods is the definition of the weight of each criterion. This refers to the degree of importance of each criterion. Instead of objective methods, subjective ones are recommended to establish the criteria weights, since experts in the field can directly define them. Objective weighting criteria methods are only recommended when there is no agreement between the experts or when the objectivity is extremely important [27, 41]. According to this, this study considers two main requirements: consumption and emissions. Equal importance has been assigned to consumption and emissions, *i.e.*, 50% each. Regarding emissions, the importance of NO_x, CO and HC was also distributed equally, *i.e.*, 33.3% for each one. To summarize, Table 3 shows these values in per-unit basis. Logically, each column in Table 3 sums to 1 for the requirements. Regarding sub-requirements, the value of the part of the column corresponding to SFC is 1 and the part of the column corresponding to emissions sums to 1. The weight of each criterion is obtained by multiplying the weight of the requirement by the weight of the sub-requirement, leading to 0.5, 0.167, 0.167, and 0.167 for SFC, NO_x, CO, and HC, respectively. These weights also sum to 1.

Table 3 Criteria weights, per unit basis.

| Requirement (α) | Sub-requirement (β) |
|--------------------------|-----------------------------|
| SFC (0.5) | SFC (1) |
| Emissions (0.5) | NO _x (0.333) |
| | CO (0.333) |
| | HC (0.333) |

Another important step consists on normalizing the decision matrix. The normalization process eliminates the units of each criterion to work in dimensionless form. Normalization

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques

C. G. Rodriguez, M.I. Lamas
J.D. Rodriguez, C. Caccia

converts the different measurable values into comparable similar ones, and the normalized decision matrix is a $m \times n$ matrix given by Eq. (2), whereby each V_{ij} element is the normalized value of X_{ij} . As mentioned above, many normalization techniques are available in the literature. The most employed ones, which will be compared in the present work, are listed in Table 4. This table shows the expressions used to normalize each term of the decision matrix, both for beneficial and non-beneficial criteria. Beneficial and non-beneficial terms refer to criteria for which a higher greater value is preferable or not, respectively. In the present work, all considered criteria are non-beneficial since the goal is to reduce SFC, NO_x , CO, and HC as much as possible. Table 4 shows the normalization criteria used in this study: $X_{j,\min}$ and $X_{j,\max}$ are the minimum and maximum grades of the alternatives for each criterion j.

$$NDM = \begin{pmatrix} V_{11} & \dots & V_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{m1} & \dots & V_{mn} \end{pmatrix} \tag{2}$$

Table 4 Normalization methods employed in the present work.

| Normalization technique | Criteria | Expression |
|------------------------------|----------------|---|
| Linear max normalization | Beneficial | $V_{ij} = \frac{X_{ij}}{X_{j,\max}}$ |
| | Non-beneficial | $V_{ij} = 1 - \frac{X_{ij}}{X_{j,\max}}$ |
| Linear max-min normalization | Beneficial | $V_{ij} = \frac{X_{ij} - X_{j,\min}}{X_{j,\max} - X_{j,\min}}$ |
| | Non-beneficial | $V_{ij} = \frac{X_{j,\max} - X_{ij}}{X_{j,\max} - X_{j,\min}}$ |
| Linear sum normalization | Beneficial | $V_{ij} = \frac{X_{ij}}{\sum_{i=1}^m X_{ij}}$ |
| | Non-beneficial | $V_{ij} = \frac{1/X_{ij}}{\sum_{i=1}^m (1/X_{ij})}$ |
| Vector normalization | Beneficial | $V_{ij} = \frac{X_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^m X_{ij}^2}}$ |
| | Non-beneficial | $V_{ij} = 1 - \frac{X_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^m X_{ij}^2}}$ |
| Logarithmic normalization | Beneficial | $V_{ij} = \frac{\ln(X_{ij})}{\ln\left(\prod_{i=1}^m X_{ij}\right)}$ |
| | Non-beneficial | $V_{ij} = \frac{1 - \ln(X_{ij})}{\ln\left(\prod_{i=1}^m X_{ij}\right)}$ |

Once the decision matrix is normalized, the adequacy index corresponding to each i -th alternative, AI_i , was computed through the three procedures described below.

C.G. Rodríguez, M.I. Lamas,
J.D. Rodríguez, C. Caccia

Analysis of the pre-injection configuration in a
marine engine through several MCDM techniques

2.2.1 WSM procedure

This procedure is also known as SAW (Simple Additive Weighting) or WLC (Weighted Linear Combination). This method, proposed by Churchman and Ackoff in 1954 [42], is the oldest and most widely used MCDM approach. The adequacy index is given by Eq. (3), and after applying the normalization procedures described, the most appropriate alternative is the one corresponding to the maximum AI .

$$AI_i = \sum_{j=1}^n w_j V_{ij} \quad (3)$$

whereby w_j the weight of the j -th criterion.

2.2.2 WPM procedure

This procedure is also known as MEW (Multiplicative Exponential Weighting). This method is quite similar to WSM, and computes the adequacy index as [43]:

$$AI_i = \prod_{j=1}^n (V_{ij})^{w_j} \quad (4)$$

2.2.3 TOPSIS procedure

The TOPSIS method, introduced by Hwang and Yoon [44], determines the so called positive ideal solution and the negative ideal solution. By computing the Euclidean distance to these two alternatives, this method provides the solution that is closest to the best one and farthest to the worst one. The main steps of the TOPSIS procedure are the following ones:

Step 1: Determining the normalized decision matrix. Although the classical TOPSIS uses the vector normalization technique, the normalization techniques described above have been compared.

Step 2: Weighting the data, given by the following expression:

$$R_{ij} = w_j V_{ij} \quad (5)$$

Step 3: Determining the positive ideal solution and negative ideal solution:

$$S^+ = (R_{1j}^+, R_{2j}^+, \dots, R_{mj}^+) \quad (6)$$

where $R_{ij}^+ = [\max(R_{ij}) \text{ if } j \in J^+; \min(R_{ij}) \text{ if } j \in J^-]$

$$S^- = (R_{1j}^-, R_{2j}^-, \dots, R_{mj}^-) \quad (7)$$

where $R_{ij}^- = [\min(R_{ij}) \text{ if } j \in J^+; \max(R_{ij}) \text{ if } j \in J^-]$

Step 4: Calculating the Euclidean distance of each alternative. Eqs (8) and (9) give the distance from the positive ideal solution and negative ideal solution., respectively:

$$D_i^+ = \sqrt{\sum_{j=1}^n (R_{ij}^+ - S^+)^2} \quad (8)$$

$$D_i^- = \sqrt{\sum_{j=1}^n (R_{ij}^- - S^-)^2} \quad (9)$$

Step 5: Calculating the relative closeness to the ideal solution:

$$C_i = \frac{D_i^-}{D_i^- + D_i^+} \quad (10)$$

Step 6: Ranking the alternatives according to the highest C_i . A value of $C_i = 1$ is the ideal solution and $C_i = 0$ is the worst solution.

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques

C. G. Rodriguez, M.I. Lamas
J.D. Rodriguez, C. Caccia

3. Results and discussion

Tables 5 to 9 show the normalized matrixes using each of the described methods (*i.e.*: linear max, linear max-min, linear sum, vector and logarithmic normalization techniques, respectively). The expressions presented in Table 4 produce the normalized values. Since all criteria are non-beneficial, the expressions corresponding to non-beneficial criteria are considered. The minimum and maximum normalized values corresponding to each criterion are also shown at the end of each of the Tables 5-9. As can be seen, the linear max normalization technique provides normalized values between 0 (minimum value) and a number lower than 1 (maximum value). The linear max-min normalization provides a normalized matrix with data within the range [0 1], where 0 is the worst value and 1 the best one. The linear sum and logarithmic normalization techniques provide normalized values considerably smaller than the other ones, and finally the vector normalization technique provides normalized values close to 1.

Table 5 Normalized matrix using the linear max normalization technique.

| Alternative (i) | S (°CA ATDC) | Q (%) | D (°CA) | Criterion (j) | | | |
|-----------------|--------------|-------|---------|---------------|------------------------|-----------|-----------|
| | | | | j = 1, SFC | j = 2, NO _x | j = 3, CO | j = 4, HC |
| 1 | -22 | 5 | 1 | 0.074593 | 0.374650 | 0.072703 | 0.066747 |
| 2 | -22 | 5 | 2 | 0.083981 | 0.335886 | 0.068517 | 0.063859 |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| 125 | -18 | 25 | 5 | 0.154040 | 0.079254 | 0.027977 | 0.033914 |
| Minimum value | | | | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Maximum value | | | | 0.159514 | 0.686433 | 0.088126 | 0.085443 |

Table 6 Normalized matrix using the linear max min normalization technique.

| Alternative (i) | S (°CA ATDC) | Q (%) | D (°CA) | Criterion (j) | | | |
|-----------------|--------------|-------|---------|---------------|------------------------|-----------|-----------|
| | | | | j = 1, SFC | j = 2, NO _x | j = 3, CO | j = 4, HC |
| 1 | -22 | 5 | 1 | 0.467628 | 0.545793 | 0.824986 | 0.781182 |
| 2 | -22 | 5 | 2 | 0.526481 | 0.489321 | 0.777482 | 0.747387 |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| 125 | -18 | 25 | 5 | 0.995682 | 0.115157 | 0.317462 | 0.336920 |
| Minimum value | | | | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Maximum value | | | | 1 | 1 | 1 | 1 |

C.G. Rodríguez, M.I. Lamas,
J.D. Rodríguez, C. Caccia

Analysis of the pre-injection configuration in a
marine engine through several MCDM techniques

Table 7 Normalized matrix using the linear sum normalization technique.

| Alternative (i) | S (°CA ATDC) | Q (%) | D (°CA) | Criterion (j) | | | |
|--------------------|-----------------|----------|------------|---------------|------------------------|-----------|-----------|
| | | | | j = 1, SFC | j = 2, NO _x | j = 3, CO | j = 4, HC |
| 1 | -22 | 5 | 1 | 0.007682 | 0.009063 | 0.008159 | 0.008122 |
| 2 | -22 | 5 | 2 | 0.007761 | 0.008534 | 0.008122 | 0.008097 |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| 125 | -18 | 25 | 5 | 0.008404 | 0.006156 | 0.007783 | 0.007846 |
| Minimum value | | | | 0.007109 | 0.005668 | 0.007566 | 0.007580 |
| Maximum value | | | | 0.008459 | 0.018075 | 0.008297 | 0.008288 |

Table 8 Normalized matrix using the vector normalization technique.

| Alternative (i) | S (°CA ATDC) | Q (%) | D (°CA) | Criterion (j) | | | |
|--------------------|-----------------|----------|------------|---------------|------------------------|-----------|-----------|
| | | | | j = 1, SFC | j = 2, NO _x | j = 3, CO | j = 4, HC |
| 1 | -22 | 5 | 1 | 0.907106 | 0.926984 | 0.912349 | 0.911944 |
| 2 | -22 | 5 | 2 | 0.908048 | 0.922458 | 0.911953 | 0.911671 |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| 125 | -18 | 25 | 5 | 0.915081 | 0.892494 | 0.908121 | 0.908846 |
| Minimum value | | | | 0.899618 | 0.883240 | 0.905476 | 0.905646 |
| Maximum value | | | | 0.915630 | 0.963388 | 0.913806 | 0.913708 |

Table 9 Normalized matrix using the logarithmic normalization technique.

| Alternative (i) | S (°CA ATDC) | Q (%) | D (°CA) | Criterion (j) | | | |
|--------------------|-----------------|----------|------------|---------------|------------------------|-----------|-----------|
| | | | | j = 1, SFC | j = 2, NO _x | j = 3, CO | j = 4, HC |
| 1 | -22 | 5 | 1 | 0.007859 | 0.007895 | 0.007841 | 0.007865 |
| 2 | -22 | 5 | 2 | 0.007860 | 0.007890 | 0.007840 | 0.007865 |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| 125 | -18 | 25 | 5 | 0.007863 | 0.007862 | 0.007834 | 0.007861 |
| Minimum value | | | | 0.007856 | 0.007855 | 0.007830 | 0.007857 |
| Maximum value | | | | 0.007863 | 0.007954 | 0.007843 | 0.007868 |

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques

C. G. Rodriguez, M.I. Lamas
J.D. Rodriguez, C. Caccia

The results show a strong dependency on the range of the normalized data. According to the expressions shown in Table 4 for the linear max-min method, the initial data are transformed into normalized values within the range [0 1]. Nevertheless, the other methods lead to a much narrower range of the normalized data. The variation of HC and CO emissions with the pre-injection starting instant and quantity is considerably small, as shown in Figs. 5 and 6, respectively. These figures represent the HC and CO emission against the pre-injection quantity and starting rate using 1° pre-injection duration. Other pre-injection durations provide similar results and thus are not presented here. As can be seen in Figs. 5 and 6, the variation of HC and CO is too small, and all normalization methods reflect this fact by providing close values in the normalized matrix, except for the linear max-min normalization. Since this method transforms the values corresponding to each criterion within the range [0 1], the importance of these small variations in CO and HC emissions is incremented, *i.e.*, small differences are always transformed to the range [0 1] independently of the initial data range, and thus small differences are extended. Nevertheless, the other normalization methods maintain the irrelevance of CO and HC during the normalization process and pay more attention to the variation of NO_x emissions and consumption with the pre-injection starting instant and quantity. The variation of NO_x and consumption with the pre-injection rate and starting angle is shown in Figs. 7 and 8, respectively. These figures underline an important dependence of NO_x and consumption on the pre-injection rate and starting angle.

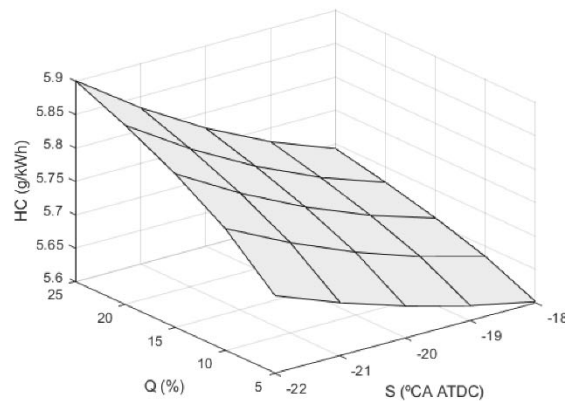


Fig. 5 HC emissions against the pre-injection quantity and starting instant. Pre-injection duration 1°CA.

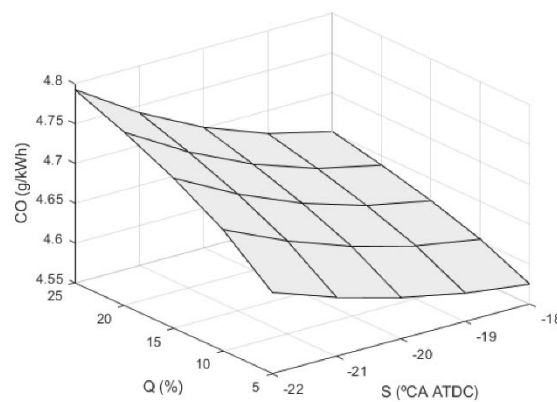


Fig. 6 CO emissions against the pre-injection quantity and starting instant. Pre-injection duration 1°CA.

C.G. Rodriguez, M.I. Lamas,
J.D. Rodriguez, C. Caccia

Analysis of the pre-injection configuration in a
marine engine through several MCDM techniques

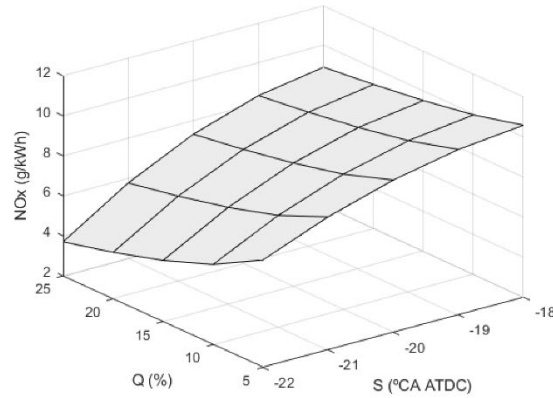


Fig. 7 NO_x emissions against the pre-injection quantity and starting instant. Pre-injection duration 1°CA.

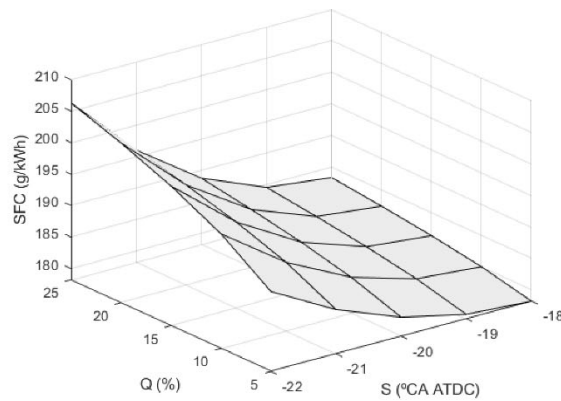


Fig. 8 Consumption against the pre-injection quantity and starting instant. Pre-injection duration 1°CA.

Table 10 shows the highest adequacy index using the different normalizations methods analyzed in the present work. As can be seen, the linear max, linear sum, vector and logarithmic normalization methods provide practically the same result, which corresponds to -22° pre-injection starting instant, 25% pre-injection quantity and 1° (WSM and WPM) or 2° (TOPSIS) pre-injection duration. Nevertheless, the linear max-min normalization method provides the alternative corresponding to -18° pre-injection starting instant, 5% pre-injection quantity, and 2° pre-injection duration.

Table 10 Most appropriate pre-injection pattern using different normalization methods.

| Normalization method | S (° CA ATDC) | Q (%) | D (%) |
|----------------------|---------------|-------|-------|
| Linear max | -22 | 25 | 1-2 |
| Linear max-min | -18 | 5 | 2 |
| Linear sum | -22 | 25 | 1-2 |
| Vector | -22 | 25 | 1-2 |
| Logarithmic | -22 | 25 | 1-2 |

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques

C. G. Rodriguez, M.I. Lamas
J.D. Rodriguez, C. Caccia

The linear max-min normalization method provides a different result since, as mentioned above, it transforms the negligible variations of CO and HC into significant values. According to this, this normalization technique leads to a solution with small CO and HC emissions. This alternative is a compromise between the four criteria analysed (NO_x, SFC, CO, and HC), providing more relevance to CO and HC than these really have. This alternative leads to a small contribution of pre-injection, with a 5% quantity, due to the increment of SFC, CO, and HC with the pre-injection quantity. Besides, this solution does not lead to important pre-injection advancements also due to the SFC, CO, and HC penalty. Since a 5% pre-injection quantity leads to excessive NO_x emissions, this solution is not recommended due to the current legislation about NO_x emissions.

On the other hand, the alternative obtained by the other normalization techniques provides significant NO_x reductions with a small increment of SFC in comparison with the case without pre-injection. This solution proposes a high pre-injection percentage (*i.e.* 25%) due to the effect on NO_x reduction. As shown in Fig. 5, advancing the pre-injection starting instant also leads to important NO_x reductions, resulting in -22° as pre-injection starting instant. Regarding pre-injection duration, low values emerge since short injections provide important NO_x reductions. NO_x is mainly caused by the high temperatures that are reached during the combustion process [45]. In order to reduce NO_x efficiently, the fuel must be rigorously injected at the optimum instant and thus under short injections.

4. Conclusions

The following conclusions may be drawn from the present work:

- Due to the important emissions of NO_x produced in the marine field, the present work analyses a NO_x reduction policy in a commercial marine diesel engine. The measure proposed is a pre-injection system. Besides NO_x, the objective is to maintain SFC and emissions of CO and HC as low as possible. It is worth mentioning that PM emissions should also be included in this model. These were not included due to the difficulties to accurately predict these emissions through CFD.
- A total of 125 alternatives with different values of the pre-injection starting instant, quantity and duration were analyzed.
- Since the pre-injection starting instant, quantity and duration are conflicting criteria, a MCDM methodology was employed to determine the most suitable pre-injection configuration.
- An important step in MCDM is the normalization process. Many normalization methods can be found in the literature, and the five most employed ones were compared in the present work: linear max normalization, linear max-min normalization, linear sum normalization, vector normalization and logarithmic normalization.
- 3 MCDM approaches were compared: WSM, WPM, and TOPSIS.
- It was found that linear max, linear sum, vector, and logarithmic normalization methods provided practically the same result as most appropriate pre-injection pattern: -22° CA ATDC pre-injection starting instant, 25% pre-injection quantity, and 1° (WSM and WPM) or 2° (TOPSIS) pre-injection duration due to the important NO_x reductions with a low SFC penalty. Nevertheless, the linear max-min normalization technique provided a very different result: -18° CA ATDC pre-injection starting instant, 5% pre-injection quantity, and 2° pre-injection duration. The reason of the discrepancy between the max-min normalization technique and the other normalization techniques lies in the range of the normalized values. The variation of CO and HC emissions in the 125 cases is practically irrelevant, but the linear max-min normalization technique increments the importance of these pollutants since it

C.G. Rodriguez, M.I. Lamas,
J.D. Rodriguez, C. Caccia

Analysis of the pre-injection configuration in a
marine engine through several MCDM techniques

converts its values into the range [0 1]. On the other hand, the other normalization methods maintain the irrelevance of the variations of CO and HC and thus lead to another optimal configuration.

- Among the limiting aspects of MCDM methods, it is worth mentioning that, even if they provide a formal tool for decision making problems, subjectivity is not removed, due to the procedure to establish the weights. In fact, different MCDM methods and different normalization procedures lead to different results, which means that there is no universal method suitable for all problems.

Nomenclature

| | |
|------------|---|
| <i>AI</i> | Adequacy index |
| α | Requirement |
| β | Sub-requirement |
| <i>C</i> | Relative closeness to the ideal solution |
| <i>D</i> | Pre-injection duration |
| D^+ | Euclidean distance from the positive ideal solution |
| D^- | Euclidean distance from the negative ideal solution |
| <i>DM</i> | Decision matrix |
| <i>i</i> | Alternative |
| <i>j</i> | Criterion |
| <i>m</i> | Number of alternatives |
| <i>n</i> | Number of criteria |
| <i>NDM</i> | Normalized decision matrix |
| <i>Q</i> | Pre-injection quantity |
| <i>R</i> | Weighted normalized data |
| <i>S</i> | Pre-injection starting instant |
| S^+ | Positive ideal solution |
| S^- | Negative ideal solution |
| <i>V</i> | Normalized data |
| <i>w</i> | Weight |
| <i>X</i> | Data |

Abbreviations

| | |
|-----------------|--------------------------------------|
| ATDC | After Top Dead Center |
| BDC | Bottom Dead Center |
| CA | Crank angle |
| CFD | Computational Fluid Dynamics |
| CO | Carbon monoxide |
| CO ₂ | Carbon dioxide |
| HC | Hydrocarbons |
| IMO | International Maritime Organization |
| MADM | Multi-Attributes Decision Making |
| MEW | Multiplicative Exponential Weighting |

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques

C. G. Rodríguez, M.I. Lamas
J.D. Rodríguez, C. Caccia

| | |
|-----------------|--|
| MCD A | Multiple-Criteria Decision Analysis |
| MCDM | Multiple-Criteria Decision Making |
| MDDM | Multiple-Dimensions Decision Making |
| MODM | Multiple-Objective Decision Making |
| NO _x | Nitrogen oxides |
| PM | Particulate matter |
| SFC | Specific Fuel Consumption |
| SO _x | Sulphur oxides |
| TDC | Top Dead Center |
| TOPSIS | Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution |
| WSM | Weighted Sum Method |
| WPM | Weighted Product Method |

Acknowledgements

The authors would like to express their gratitude to Norplan Engineering S.L. and recommend the courses “CFD with OpenFOAM” and “C ++ applied to OpenFOAM” available at www.technicalcourses.net.

REFERENCES

- [1] Sinay, J.; Puskar, M.; Kopas, M. Reduction of the NO_x emissions in vehicle diesel engine in order to fulfill future rules concerning emissions released into air. *Science of the Total Environment*, vol. 624, pp. 1421–1428, 2018, <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.12.266>
- [2] Sencic, T.; Mrzljak, B.; Bonefacic, I. 2D CFD simulation of water injection strategies in a large marine engine. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 7, 296, 2019, <https://doi.org/10.3390/jmse7090296>
- [3] Shen, H.; Zhang, J.; Yang, B.; Jia, B. Development of a marine two-stroke diesel engine MVEM with in-cylinder pressure trace predictive capability and a novel compressor model. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 204, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8030204>
- [4] Perez, J. R.; Reusser, C.A. Optimization of the emissions profile of a marine propulsion system using a shaft generator with optimum tracking-based control scheme. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 221, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8030221>
- [5] Sui, P.; Stapersma, D.; Visser, K.; Ding, Y. Fuel consumption and emissions of ocean-going cargo ship with hybrid propulsion and different fuels over voyage. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 588, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8080588>
- [6] Sead, C.; Dragan, I. Application of diagnosis as a basis of condition based maintenance of the marine propulsion diesel engine. *Brodogradnja*, vol. 71, pp. 119–134, 2020, <https://doi.org/10.21278/brod71307>
- [7] Seddiek, I. S.; Elgohary, M. M.; Ammar, N. R. The hydrogen-fuelled internal combustion engines for marine applications with a case study. *Brodogradnja*, vol. 66, pp. 23–38, 2015.
- [8] Elgohary, M. M.; Ammar, N. R.; Seddiek, I. S. Steam and soft based reforming options of pem fuel cells for marine applications. *Brodogradnja*, vol. 66, pp. 61–76, 2015.
- [9] Winnes, H.; Fridell, E.; Moldanová, J. Effects of marine exhaust gas scrubbers on gas and particle emissions. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 299, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8040299>
- [10] Puskar, M.; Kopas, M.; Sabadka, D.; Kliment, M.; Soltesova, M. Reduction of the gaseous emissions in the marine diesel engine using biodiesel mixtures. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 330, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8050330>
- [11] Pistek, V.; Kucera, P.; Fomin, O.; Lovska, A. Effective mistuning identification method of integrated bladed discs of marine engine turbochargers. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 379, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8050379>

C.G. Rodriguez, M.I. Lamas,
J.D. Rodriguez, C. Caccia

Analysis of the pre-injection configuration in a
marine engine through several MCDM techniques

- [12] Witkowski, K. Research of the effectiveness of selected methods of reducing toxic exhaust emissions of marine diesel engines. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 452, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8060452>
- [13] Zalacko, R.; Zoldy, M.; Simongati, G. Comparative study of two simple marine engine BSFC estimation methods. *Brodogradnja*, vol. 71, pp. 13-25, 2020, <https://doi.org/10.21278/brod71302>
- [14] Varbanets, R.; Fomin, O.; Pistek, V.; Klymenko, V.; Minchev, D.; Khrulev, A.; Zalozh, V.; Kucera, P. Acoustic method for estimation of marine low-speed engine turbocharger parameters. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 9, 321, 2021, <https://doi.org/10.3390/jmse9030321>
- [15] Monieta, J.; Sendcecki, A. Database and knowledge about essential manufacturers of marine self-ignition engines. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 239, 2020. <https://doi.org/10.3390/jmse8040239>
- [16] Monieta, J. Diagnosing marine piston engines driving generators at different operational loads. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 9, 132, 2021. <https://doi.org/10.3390/jmse9020132>
- [17] Jahan, A.; Edwards, K. L. A state-of-the-art survey on the influence of normalization techniques in ranking: Improving the materials selection process in engineering design. *Materials & Design*, vol. 65, pp. 335–342, 2015, <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2014.09.022>
- [18] Eftekhary, M.; Gholami, P.; Safari, S.; Shojaee, M. Ranking normalization methods for improving the accuracy of SVM algorithm by DEA method. *Modern Applied Science*, vol. 6, 2012, <https://doi.org/10.5539/mas.v6n10p26>
- [19] Milani, A. S.; Shanian, A.; Madoliat, R.; Nemes, J. A. The effect of normalization norms in multiple attribute decision making models: a case study in gear material selection. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, vol. 29, pp. 312–318, 2005, <https://doi.org/10.1007/s00158-004-0473-1>
- [20] Chatterjee, P.; Chakraborty, S. Investigating the effect of normalization norms in flexible manufacturing system selection using Multi-Criteria Decision-Making methods. *Journal of Engineering Science & Technology Review*, vol. 7, pp. 141–150, 2014, <https://doi.org/10.25103/jestr.073.23>
- [21] Pavlicic, D. M. Normalisation affects the results of MADM methods. *Yugoslav Journal of Operations Research*, vol. 11, pp. 251–265, 2001.
- [22] Chakraborty, S.; Yey, C. H. A simulation comparison of normalization procedures for TOPSIS. In 2009 International Conference on Computers & Industrial Engineering, Jul. 2009, pp. 1815–1820, <https://doi.org/10.1109/ICCIE.2009.5223811>
- [23] Acuña-Soto, C.; Liern, V.; Perez-Gladish, B. Normalization in TOPSIS-based approaches with data of different nature: application to the ranking of mathematical videos. *Annals of Operational Research*, vol. 296, pp. 541–569, 2021, <https://doi.org/10.1007/s10479-018-2945-5>
- [24] Celen, A. Comparative analysis of normalization procedures in TOPSIS method: with an application to Turkish deposit banking market. *Informatica*, vol. 25, pp. 185–208, 2014, <https://doi.org/10.15388/Informatica.2014.10>
- [25] Vafaei, N.; Ribeiro, R. A.; Camarinha-Matos, L. M. Normalization techniques for Multi-Criteria Decision Making: analytical hierarchy process case study. Doctoral Conference on Computing, Electrical and Industrial Systems, pp. 261–269, 2016. https://doi.org/10.1007/978-3-319-31165-4_26
- [26] Vafaei, N.; Ribeiro, R. A.; Matos, L. M. C. Data normalisation techniques in decision making: case study with TOPSIS method. *International Journal of Information and Decision Sciences*, vol. 10, pp. 19, 2018, <https://doi.org/10.1504/IJIDS.2018.090667>
- [27] Lamas, M. I.; Castro-Santos, L.; Rodriguez, C. G. Optimization of a multiple injection system in a marine diesel engine through a Multiple-Criteria Decision-Making approach. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, pp. 946, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8110946>
- [28] Lamas, M. I.; Rodriguez, C. G.; Rebolledo, J. Numerical model to study the valve overlap period in the Wärtsilä 6L 46 four-stroke marine engine. *Polish Maritime Research*, vol. 19, 2012, <https://doi.org/10.2478/v10012-012-0004-8>
- [29] Lamas, M. I.; Rodriguez, C. G.; Rodriguez, J. D.; Telmo, J. Internal modifications to reduce pollutant emissions from marine engines. A numerical approach. *International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering*, vol. 5, 2013, <https://doi.org/10.2478/IJNAOE-2013-0148>
- [30] Lamas, M. I.; Rodriguez, C. G. Numerical model to study the combustion process and emissions in the Wärtsilä 6L 46 four-stroke marine engine. *Polish Maritime Research*, vol. 20, pp. 61–66, 2013, <https://doi.org/10.2478/pomr-2013-0017>

Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques

C. G. Rodríguez, M.I. Lamas
J.D. Rodríguez, C. Caccia

- [31] Lamas, M. I.; Rodríguez, C. G.; Telmo, J.; Rodríguez, J. D. Numerical analysis of emissions from marine engines using alternative fuels. *Polish Maritime Research*, vol. 22, pp. 48-52, 2015, <https://doi.org/10.1515/pomr-2015-0070>
- [32] Lamas, M. I.; Rodríguez, J. D.; Castro-Santos, L.; Carral, L. M. Effect of multiple injection strategies on emissions and performance in the Wärtsilä 6L 46 marine engine. A numerical approach. *Journal of Cleaner Production*, vol. 206, pp. 1-10, 2019, <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.09.165>
- [33] Lamas Galdo, M. I.; Castro-Santos, L.; Rodríguez Vidal, C. G. Numerical analysis of NO_x reduction using ammonia injection and comparison with water injection. *Journal of Marine Science and Engineering*, vol. 8, 109, 2020, <https://doi.org/10.3390/jmse8020109>
- [34] Dukowicz, J. K. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, vol. 35, pp. 229-253, 1980, [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(80\)90087-X](https://doi.org/10.1016/0021-9991(80)90087-X)
- [35] Ricart, L. M.; Xin, J.; Bower, G. R.; Reitz, R. D. In-cylinder measurement and modeling of liquid fuel spray penetration in a heavy-duty diesel engine. 1997, <https://doi.org/10.4271/971591>
- [36] Ra, Y.; Reitz, R. D. A reduced chemical kinetic model for IC engine combustion simulations with primary reference fuels. *Combustion and Flame*, vol. 155, pp. 713-738, 2008, <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2008.05.002>
- [37] Yang, G. H.; Krishnan, S. R.; Srinivasan, K. K.; Midkiff, K. C. Modeling of NO_x emissions using a superextended Zeldovich mechanism. 2003. <https://doi.org/10.1115/ICF2003-0713>
- [38] Miller, J. A.; Glarborg, P. Modeling the formation of N₂O and NO₂ in the thermal DeNO_x process. *International Journal of Chemical Kinetics*, vol. 26, pp. 421-436, 1996. https://doi.org/10.1007/978-3-642-80299-7_25
- [39] Löffler, G.; Sieber, R.; Harasek, M.; Hofbauer, H.; Hauss, R.; Landaul, J. NO_x formation in natural gas combustion-a new simplified reaction scheme for CFD calculations. *Fuel*, vol. 85, 513-523, 2006, doi: 10.1016/j.fuel.2005.07.012. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2005.07.012>
- [40] Hernandez, J.J.; Lapuerta, M.; Perez-Collado, J. A combustion kinetic model for estimating diesel engine NO_x emissions. *Combustion Theory and Modelling*, vol. 10, 639-657, 2006, <https://doi.org/10.1080/13647830600632758>
- [41] Vinogradova, I.; Podvezko, V.; Zavadskas, E. The recalculation of the weights of criteria in MCDM methods using the bayes approach. *Symmetry (Basel)*, vol. 10, 205, 2018, <https://doi.org/10.3390/sym10060205>
- [42] Churchman, C. W.; Ackoff, R. L. (1954). An approximate measure of value. *Journal of Operations Research Society of America*, vol. 2, pp. 172-187, 1954. <https://doi.org/10.1287/opre.2.2.172>
- [43] Bridgman, P. W. *Dimensional Analysis*. New Haven: Yale University Press. 1922.
- [44] Hwang C. L., Yoon K. *Methods for Multiple Attribute Decision Making*. In: *Multiple Attribute Decision Making. Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems*, vol 186. 1981. Springer, Berlin, Heidelberg, https://doi.org/10.1007/978-3-642-48318-9_3
- [45] Lamas-Galdo, M. I.; Castro-Santos, L.; Rodríguez-Vidal, C. G. Selection of an appropriate pre-injection pattern in a marine diesel engine through a multiple-criteria decision making approach. *Applied Sciences*, vol. 10, 2482, 2020, <https://doi.org/10.3390/app10072482>

Submitted: 05.08.2021. Carlos Gervasio Rodríguez
University of Coruña, Spain

Accepted: 12.10.2021. María Isabel Lamas, isabel.lamas.galdo@udc.es
University of Coruña, Spain
Juan de Dios Rodríguez
University of Coruña, Spain
Claudio Caccia
Politecnico di Milano, Italy

Publicación 2

Rodríguez, C.G.; Lamas, M.I.; Rodríguez, J.D.; Abbas, A. Analysis of the pre-injection system of a marine diesel engine through multiple-criteria decision-making and artificial neural networks. Polish Maritime Research, vol. 4, pp. 88-96, 2021.

Datos de la revista

Nombre: Polish Maritime Research

ISSN: 1233-2585

eISSN: 2083-7429

Primer año de publicación: 1994

Categoría en Web of Science: Engineering, Marine (en año 2021)

Factor de impacto: 1,873 (en año 2021)

Cuartil: Q3 (en año 2021)

Ranking: 10/16 en categoría Engineering, Marine (en año 2021)



POLISH MARITIME RESEARCH 4 (112) 2021 Vol. 28; pp. 88-96
10.2478/pomr-2021-0051

ANALYSIS OF THE PRE-INJECTION SYSTEM OF A MARINE DIESEL ENGINE THROUGH MULTIPLE-CRITERIA DECISION-MAKING AND ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS

C.G. Rodríguez¹

M.I. Lamas^{*1}

J.D. Rodríguez¹

A. Abbas²

¹ University of Coruña, Spain

² Mississippi State University, USA

* Corresponding author: isabellamas@udc.es (M.I. Lamas)

ABSTRACT

The present work proposes several pre-injection patterns to reduce nitrogen oxides in the Wärtsilä 6L 46 marine engine. A numerical model was carried out to characterise the emissions and consumption of the engine. Several pre-injection quantities, durations, and starting instants were analysed. It was found that oxides of nitrogen can be noticeably reduced but at the expense of increasing consumption as well as other emissions such as carbon monoxide and hydrocarbons. According to this, a multiple-criteria decision-making (MCDM) model was established to select the most appropriate parameters. Besides, an artificial neural network (ANN) was developed to complement the results and analyse a huge quantity of alternatives. This hybrid MCDM-ANN methodology proposed in the present work constitutes a useful tool to design new marine engines.

Keywords: Marine engine, emissions, consumption, artificial neural networks, multi-criteria decision making, computational fluid dynamics

INTRODUCTION

The maritime industry is currently facing a crucial time regarding emission control, and engines have to deal with ever increasing legislative emission requirements. Special attention has been paid to NO_x emissions from marine engines mainly due to legislation imposed by the IMO (International Maritime Organization) through the MARPOL convention. The International Convention for the Prevention of Pollution from Ships (MARPOL) is the main international convention covering prevention of pollution of the marine environment by ships. It was adopted on 2nd November 1973 and has been updated through the years. Regarding air pollution, limits are established in annex VI "Prevention of air pollution from ships". Several works have been published to characterise NO_x emissions from marine engines [1-4], and both primary and

secondary NO_x reduction measures have been developed in recent years. Primary measures focus on reducing NO_x during the combustion phase, while secondary measures reduce NO_x in the exhaust gas through after-treatment devices. Both primary and secondary measures were summarised in recent reviews about emission reduction technologies for marine engines [5-7].

Engine experiments are usually expensive and time-consuming. In order to solve this issue, artificial neural networks (ANNs) have demonstrated the ability to reduce the experimentation cost and time. ANNs are computing systems inspired by the biological neural networks that constitute human brains. Such systems progressively improve their performance by a process called learning. They are able to learn complex non-linear and multivariable relationships between parameters and model nonlinear problems. The objective is to create a predictive model for the objects or

phenomena under investigation. ANNs have demonstrated great progress in recent years, and have been applied in many fields such as engineering, medical diagnosis, economics, etc. Regarding internal combustion engines, ANNs have been employed to predict different characteristics like performance, combustion, emissions, etc. in both compression-ignition and spark ignition engines [8]. Regarding compression-ignition engines, one can refer to the work of Kowalski [9], who characterised NO_x and fuel consumption from 15 and 16 inputs, respectively. Celik and Arcaklioglu [10] predicted the consumption, fuel-air equivalence ratio, and EGT, using as inputs the engine power, engine speed, and water temperature. Siami-Irdemoosa and Dindarloo [11] predicted the fuel consumption using the loading time, idle time to load, empty travel time, payload, idled empty time, and loaded travel time as inputs. Bietresato *et al.* [12] predicted the consumption and torque using the exhaust gas temperature and motor oil temperature as inputs. Goudarzi *et al.* [13] predicted the exhaust valve temperature using two temperatures at different points of the seat. Arcaklioglu and Çelikten [14] predicted the power, consumption and emissions using the injection pressure, throttle position, and speed as inputs. Nikzadfar and Shamekhi [15] used 10 engine inputs to predict consumption, torque, NO_x , and soot. Besides these works about diesel engines, other analysis can be found in the literature applied to compression-ignition engines using alternative fuels such as biodiesel [16-18], butanol [19], bioethanol [20], ethanol [21], different dual-fuel configurations [22-29], etc.

Primary measures that are commonly employed to reduce NO_x in engines involve multiple evaluation objectives which conflict with each other, *i.e.*, the improvement on one objective such as NO_x reduction sacrifices others such as emissions and/or consumption. Taking this into account, some researchers have developed multi-criteria decision-making (MCDM) models to complement ANN analyses. Prediction studies focused on ANN used together with MCDM can be found in some studies in the literature, applied to different aspects such as supplier selection for industries, failure estimations, machine selection, maintenance, etc. In these analyses, an MCDM is formulated, and ANNs are used to learn the relation among the criteria and alternatives and rank the alternatives. In engine engineering, hybrid MCDM-ANN methods can be found in the work of Tasdemir *et al.* [30], who analysed hydrocarbon emission, consumption, torque, and power using intake valve advancement and speed as inputs; Martínez-Morales *et al.* [31], who analysed NO_x emissions from the injection timing, torque, intake pressure, speed, ignition point, and throttle data; Etghani *et al.* [32], who developed a model to maximise the power and minimise the consumption and CO , CO_2 , NO_x , and PM; Majumber *et al.* [33], who optimised the performance and emission parameters in a diesel engine using hydrogen in dual-fuel mode, etc.

The present work proposes a hybrid MCDM-ANN model to analyse the pre-injection pattern in the Wärtsilä 6L 46 marine engine. The data were obtained through a CFD (computational fluid dynamics) model previously validated with experimental

data. A pre-injection system was proposed to reduce NO_x emissions and the developed model was developed to analyse the most appropriate injection pattern. The effects of the pre-injection starting instant (S), quantity (Q), and duration (D) were studied.

METHODOLOGY

This section first describes the engine analysed and the corresponding CFD analysis employed to obtain the data samples necessary to train, learn and test the ANN. After that, the MCDM and ANN methodologies are addressed.

ENGINE ANALYSED AND CFD ANALYSIS

As indicated above, the present work analyses the commercial marine engine Wärtsilä 6L 46. This is a four-stroke engine with 6 in-line cylinders, and each cylinder has 2 inlet and 2 exhaust valves. The CFD analysis and validation with experimental results was developed in previous works [22-27]. The simulations were realised using the open software OpenFOAM. Turbulence was treated through the $k-\epsilon$ model. The fuel heat-up and evaporation was treated through the Dukowicz [34] model and the fuel droplet breakup through the Kelvin-Helmholtz and Rayleigh-Taylor [35] model. As a combustion model, Ra and Reitz's kinetic scheme [36], based on 131 reactions and 41 species, was employed. As the NO_x formation model, Yang *et al.*'s kinetic scheme [37], based on 43 reactions and 20 species, was employed. As the NO_x reduction model, Miller and Glarborg's kinetic scheme [38], based on 131 reactions and 24 species, was employed.

A comparison between the numerical and experimental results is illustrated in Figs. 1 and 2. Fig. 1 shows the emissions and SFC (specific fuel consumption) obtained numerically and experimentally at several loads, and Fig. 2 shows the in-cylinder pressure and heat release rate obtained numerically and experimentally at 100% load. As can be seen, both figures show a reasonable correspondence between the numerical and experimental results.

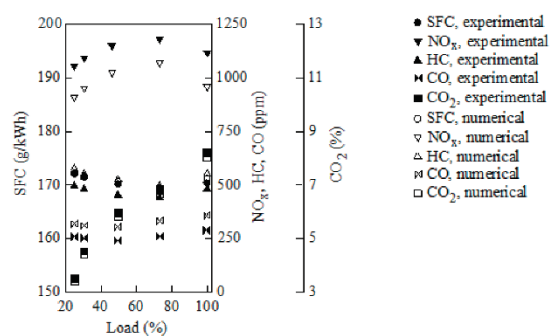


Fig. 1. SFC and emissions at different loads

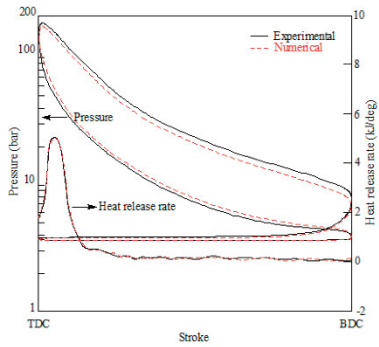


Fig. 2. In-cylinder pressure at 100% load

The data obtained through this CFD model were used as samples to train, validate and test the ANN. 180 cases were characterised through CFD using pre-injection quantities from 5 to 30%, starting instants from -23° to -18° CA ATDC (crank angle after top dead centre), and durations from 1 to 5° CA. All of these simulations were realised at 100% load and 500 rpm. Some of the results obtained for these 180 cases are illustrated in Figs. 3-6. These figures show the consumption, NO_x, CO and HC against the pre-injection quantity and starting angle using 1° injection duration, respectively. As can be seen in these figures, the NO_x emissions are reduced with increments of the pre-injection quantity and advances of the pre-injection starting instant. It is well known that NO_x is formed mainly due to the high temperatures reached during the combustion process. If these temperatures are reduced, the NO_x emissions are reduced too. Unfortunately, low combustion temperatures lead to lower power and thus higher consumption. Besides, lower combustion temperatures promote incomplete combustion, which is the main source of CO and HC emissions. According to these results, it can be seen that SFC, NO_x, CO and HC constitute conflicting criteria since none of the measures proposed in the present work are able to reduce all of them together.

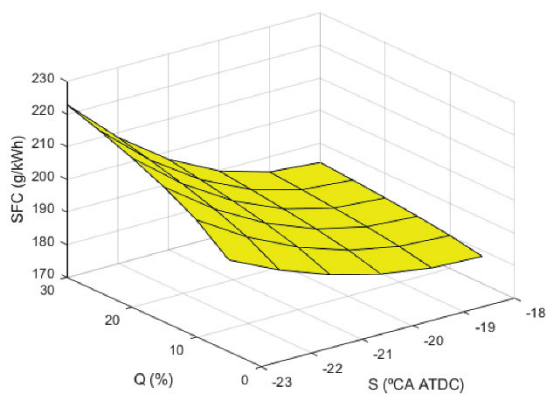


Fig. 3. Consumption against the pre-injection quantity and starting instant. 1° pre-injection duration

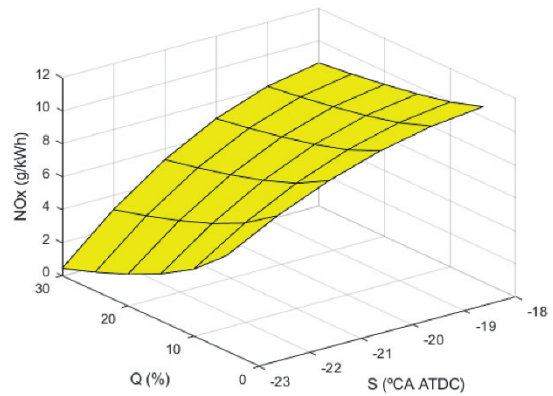


Fig. 4. NO_x emissions against the pre-injection quantity and starting instant. 1° pre-injection duration

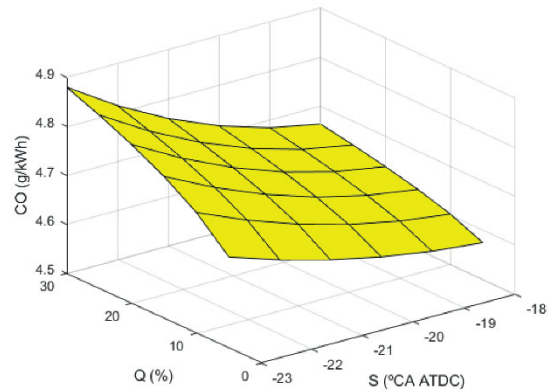


Fig. 5. CO emissions against the pre-injection quantity and starting instant. 1° pre-injection duration

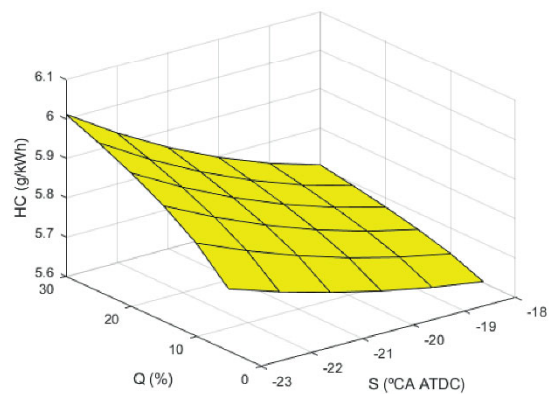


Fig. 6. HC emissions against the pre-injection quantity and starting instant. 1° pre-injection duration

MCDM ANALYSIS

Taking into account the 180 alternatives analysed through the CFD model and the four criteria considered (SFC, NO_x, CO, and HC), a 180 × 4 data matrix can be constituted with 180 rows and 4 columns. Each element X_{ij} indicates the performance of alternative *i* when it is evaluated in terms of the decision criterion *j*. This matrix is highlighted in red in Table 1. This table also shows the pre-injection starting instant, quantity, and duration corresponding to each alternative.

Tab. 1. Decision matrix

| Case (<i>i</i>) | S (°CA ATDC) | C (%) | D (°CA) | Criterion (<i>j</i>) | | | |
|----------------------|-----------------|----------|------------|------------------------|-------------------------|--------------|--------------|
| | | | | <i>j</i> = 1 | <i>j</i> = 2 | <i>j</i> = 3 | <i>j</i> = 4 |
| | | | | SFC (g/kWh) | NO _x (g/kWh) | CO (g/kWh) | HC (g/kWh) |
| 1 | -23 | 5 | 1 | 198.2 | 5.79 | 4.69 | 5.76 |
| 2 | -23 | 5 | 2 | 196.3 | 6.25 | 4.71 | 5.78 |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| . | . | . | . | . | . | . | . |
| 180 | -18 | 25 | 5 | 174.5 | 10.86 | 4.88 | 5.92 |

An important issue in MCDM methods consists in establishing the criteria weights, *i.e.*, the degree of importance of each criterion. Although several objective methods can be found in the literature, subjective methods are recommended since these are directly defined by experts in the field [8, 33]. In the present work, two main requirements were considered, consumption and emissions. An importance of 20% was provided for consumption and 80% for emissions. Regarding emissions, the importance of NO_x, CO and HC was also distributed equally, *i.e.*, 33.3% for each one. To summarise, these values on a per-unit basis are shown in Table 2. Logically, each column in Table 1 sums to 1 for the requirements. Regarding sub-requirements, the value of the part of the column corresponding to SFC is 1 and the part of the column corresponding to emissions sums to 1 too. The weight of each criterion is obtained by multiplying the weight of the requirement by the weight of the sub-requirement, leading to 0.5, 0.167, 0.167, and 0.167 for SFC, NO_x, CO, and HC, respectively. Logically, these weights also sum to 1. A sensitivity analysis of these criteria weights will be shown in the results section.

Tab. 2. Criteria weights, per unit basis

| Requirement (α) | Sub-requirement (β) |
|--------------------------|-----------------------------|
| SFC (0.5) | SFC (1) |
| Emissions (0.5) | NO _x (0.333) |
| | CO (0.333) |
| | HC (0.333) |

Another important step consists in normalising the decision matrix. Normalisation is used to eliminate the units

of each criterion so that all the criteria become dimensionless and to set the ratings of different alternatives into the same range. Normalisation changes the different measurable values into comparable similar ones. Many normalisation techniques are available in the literature. In the present work, the so-called linear max-min normalisation technique was employed, according to which each normalised value, V_{ij}, is given by:

$$V_{ij} = 1 - \frac{X_{ij}}{X_{j,max}} \tag{1}$$

The adequacy index was computed by the WSM (weighted sum method), according to which the adequacy index is given by Eq. (2). This procedure is also called SAW (simple additive weighting) and WLC (weighted linear combination). Taking into account the normalisation procedure applied, the most appropriate alternative is the one corresponding to the maximum AI.

$$AI_i = \sum_{j=1}^n w_j V_{ij} \tag{2}$$

where AI is the adequacy index, w_j the weight of the *j*-th criterion, and *n* the number of criteria.

ANN ANALYSIS

ANNs are structures that model human intuition by simulating the physical process upon which intuition is based, *i.e.*, the process of biological learning. In the present work the ANN was employed to obtain the adequacy index (AI) from three inputs: pre-injection starting instant, quantity, and duration. The software Matlab 2021b was used to develop the analysis. The structure of the ANN employed is shown in Fig. 7. As can be seen in this figure, the ANN has three parallel layers. The first layer, *i.e.*, the input layer, contains the three independent variables: S, Q, and D. The second layer is the hidden layer that contains the so-called hidden nodes, and the third layer is the output layer, containing the dependent variable/s. In this problem, a single variable, AI, was employed. Regarding the number of hidden layers, the general recommendation is to employ a single layer for most problems [39] [40], and multi-layered structures are only recommended for complex problems since too many hidden layers may cause memorising instead of generalising. The number of neurons in the hidden layer was established by comparing ANNs with a number of hidden neurons between 3 and 15. A low number of neurons may lead to inaccuracy and a high number to over-fitting. In this case, it was found that the ANN with 12 neurons provided the lowest error and thus this structure was selected.

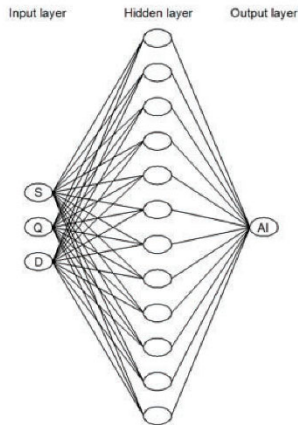


Fig. 7. ANN structure employed in the present work

As mentioned previously, 180 samples were employed and their data were obtained from CFD. 126 of these samples were used for learning, 27 for testing, and 27 for validation. Fig. 8 shows the regression results with respect to training, validation, testing, and all of them. This figure shows a satisfactory performance since $R = 0.99966$, very close to the optimum value of 1, indicating that the ANN provides an appropriate prediction accuracy.

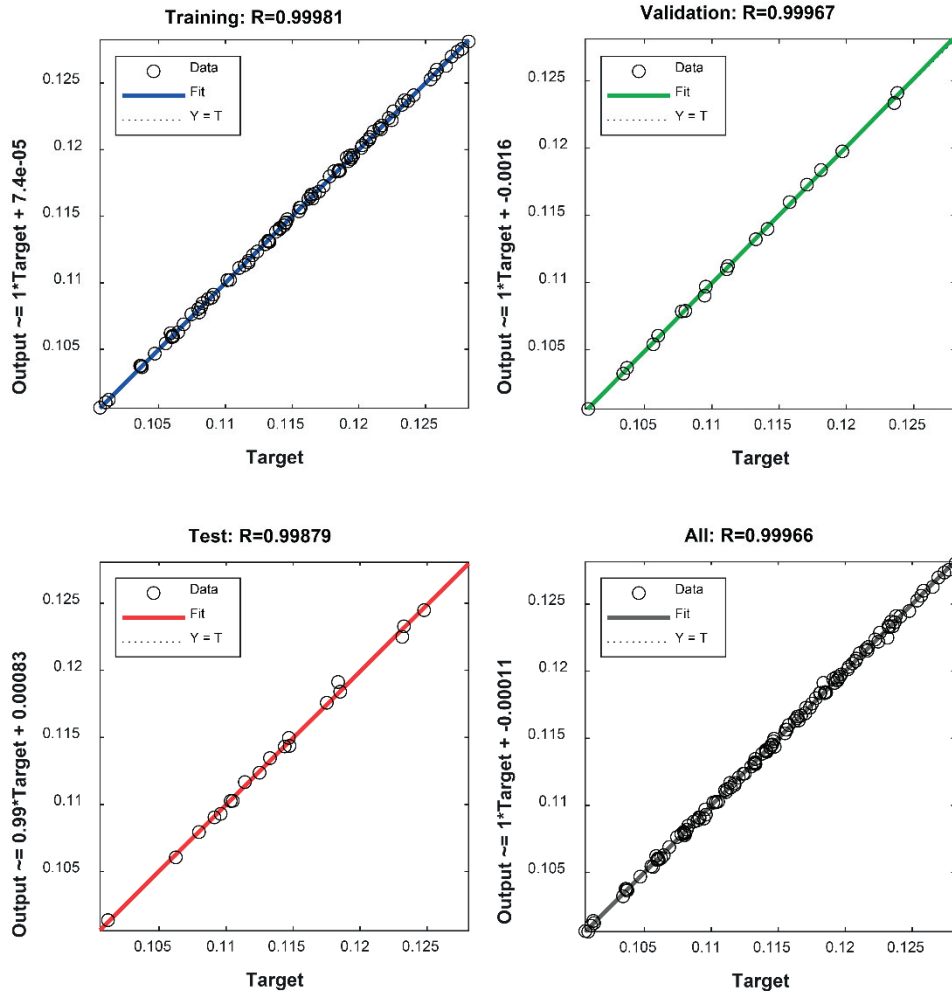


Fig. 8. Regression graphs of the ANN

RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 9 shows the most appropriate option provided by the hybrid ANN-MCDM model, which corresponds to a -22.2° pre-injection starting instant, 25.4% quantity and 1° duration. This solution was obtained using the criteria weights shown in Table 2. It is useful to perform a sensitivity analysis of the criteria weights. According to this, Table 3 shows the most appropriate option under different weights of the consumption. In this analysis, the emissions were assigned equally with the remaining weight. As can be seen, as more importance is provided to the consumption, a lower pre-injection rate and more retarded starting instants are obtained since these effects reduce consumption. It is worth mentioning that some of the results obtained in Table 3 are not recommended in practical application despite the significant NO_x reductions obtained. A 30.5% pre-injection quantity is too high for an appropriate performance of the engine. Besides, a -23.1° starting instant is too early since the combustion must be produced after TDC. Regarding the injection duration, injections shorter than 1° were not analysed since some injectors are not able to provide these short injections.

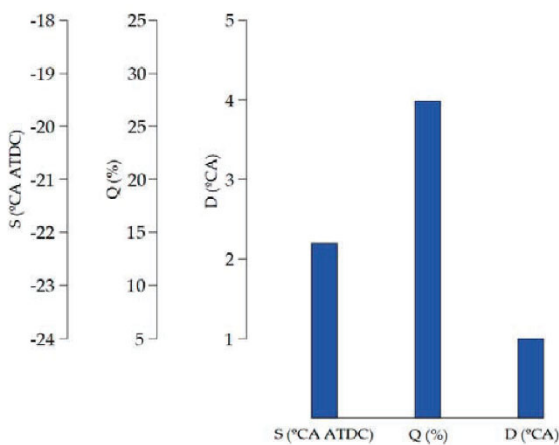


Fig. 9. Most appropriate option according to the MCDM model alone

Tab. 3. Most appropriate option under several criteria weights for the consumption according to the hybrid MCDM-ANN model

| α_{src} | S (°) | Q (%) | D (°) |
|----------------|-------|-------|-------|
| 40 | -23.1 | 28.3 | 1.5 |
| 45 | -22.8 | 27.1 | 1.2 |
| 50 | -22.2 | 25.4 | 1 |
| 55 | -20.9 | 23.2 | 1 |
| 60 | -18.5 | 19.8 | 1 |

CONCLUSIONS

This paper proposes a hybrid MCDM-ANN model to select the most suitable pre-injection pattern in the Wärtsila 6L 46 marine engine. The purpose is to reduce emissions and consumption as much as possible. The motivation comes from the ever stricter legislation, especially IMO MARPOL. The pre-injection quantity, starting instant, and duration were analysed. Since these measures have conflicting criteria on emissions and consumption, the hybrid MCDM-ANN developed in the present work model provides a tool to facilitate the selection for decision makers. The pre-injection quantity, starting instant, and duration were selected as input data for the ANN model, while the adequacy index was selected as the output data. The model is fast in application and allows the user to vary the input parameters in order to show their effects on the results.

This work provides useful information for marine engine designers. MCDM tools are becoming necessary to select between conflicting criteria, and ANN allows a huge quantity of alternatives to be analysed. Once the ANN is trained, it can be used for predicting solutions, in this case the adequacy index of each alternative. Manufacturers can find in the present study an assessment tool for designing their engines. The proposed model is applicable for a wide variety of multi-attribute decision-making problems and can be used for future ranking or selection. Future studies will focus on analysing more pollutant reduction measurements and other marine engines.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors would like to express their gratitude to Norplan Engineering S.L. and recommend the courses “CFD with OpenFOAM” and “C++ applied to OpenFOAM” available at www.technicalcourses.net.

REFERENCES

1. J. Kowalski and W. Tarelko, “NO_x emission from a two-stroke ship engine. Part 1: Modeling aspect,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 29, no. 11–12, pp. 2153–2159, Aug. 2009, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2008.06.032.
2. J. Kowalski and W. Tarelko, “NO_x emission from a two-stroke ship engine: Part 2 – Laboratory test,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 29, no. 11–12, pp. 2160–2165, Aug. 2009, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2008.06.031.
3. J. Girtler, “A method for evaluating the performance of a marine piston internal combustion engine used as the main engine on a ship during its voyage in different sailing conditions,” *Polish Marit. Res.*, vol. 17, no. 4, Jan. 2010, doi: 10.2478/v10012-010-0033-0.

4. R. Zhao *et al.*, “A numerical and experimental study of marine hydrogen–natural gas–diesel tri-fuel engines,” *Polish Marit. Res.*, vol. 27, no. 4, pp. 80–90, Dec. 2020, doi: 10.2478/pomr-2020-0068.
5. X. Lu, P. Geng, and Y. Chen, “NOx emission reduction technology for marine engine based on Tier-III: A review,” *J. Therm. Sci.*, vol. 29, no. 5, pp. 1242–1268, Oct. 2020, doi: 10.1007/s11630-020-1342-y.
6. S. Lion, I. Vlaskos, and R. Taccani, “A review of emissions reduction technologies for low and medium speed marine Diesel engines and their potential for waste heat recovery,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 207, p. 112553, Mar. 2020, doi: 10.1016/j.enconman.2020.112553.
7. J. Deng, X. Wang, Z. Wei, L. Wang, C. Wang, and Z. Chen, “A review of NOx and SOx emission reduction technologies for marine diesel engines and the potential evaluation of liquefied natural gas fuelled vessels,” *Sci. Total Environ.*, vol. 766, p. 144319, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.scitotenv.2020.144319.
8. A. N. Bhatt and N. Shrivastava, “Application of artificial neural network for internal combustion engines: A state of the art review,” *Arch. Comput. Methods Eng.*, May 2021, doi: 10.1007/s11831-021-09596-5.
9. J. Kowalski, “ANN based evaluation of the NOx concentration in the exhaust gas of a marine two-stroke diesel engine,” *Polish Marit. Res.*, vol. 16, no. 2, Jan. 2009, doi: 10.2478/v10012-008-0023-7.
10. V. Çelik and E. Arcaklioglu, “Performance maps of a diesel engine,” *Appl. Energy*, vol. 81, no. 3, pp. 247–259, Jul. 2005, doi: 10.1016/j.apenergy.2004.08.003.
11. E. Siami-Irdemoosa and S. R. Dindarloo, “Prediction of fuel consumption of mining dump trucks: A neural networks approach,” *Appl. Energy*, vol. 151, pp. 77–84, Aug. 2015, doi: 10.1016/j.apenergy.2015.04.064.
12. M. Bietresato, A. Calcante, and F. Mazzetto, “A neural network approach for indirectly estimating farm tractors engine performances,” *Fuel*, vol. 143, pp. 144–154, Mar. 2015, doi: 10.1016/j.fuel.2014.11.019.
13. K. Goudarzi, A. Moosaei, and M. Gharaati, “Applying artificial neural networks (ANN) to the estimation of thermal contact conductance in the exhaust valve of internal combustion engine,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 87, pp. 688–697, Aug. 2015, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2015.05.060.
14. E. Arcaklioglu and İ. Çelikten, “A diesel engine’s performance and exhaust emissions,” *Appl. Energy*, vol. 80, no. 1, pp. 11–22, Jan. 2005, doi: 10.1016/j.apenergy.2004.03.004.
15. K. Nikzadfar and A. H. Shamekhi, “Investigating the relative contribution of operational parameters on performance and emissions of a common-rail diesel engine using neural network,” *Fuel*, vol. 125, pp. 116–128, Jun. 2014, doi: 10.1016/j.fuel.2014.02.021.
16. K. Muralidharan and D. Vasudevan, “Applications of artificial neural networks in prediction of performance, emission and combustion characteristics of variable compression ratio engine fuelled with waste cooking oil biodiesel,” *J. Brazilian Soc. Mech. Sci. Eng.*, vol. 37, no. 3, pp. 915–928, May 2015, doi: 10.1007/s40430-014-0213-4.
17. S. Arumugam, G. Sriram, and P. R. S. Subramanian, “Application of artificial intelligence to predict the performance and exhaust emissions of diesel engine using rapeseed oil methyl ester,” *Procedia Eng.*, vol. 38, pp. 853–860, 2012, doi: 10.1016/j.proeng.2012.06.107.
18. A. Duran, M. Lapuerta, and J. Rodriguez-Fernandez, “Neural networks estimation of diesel particulate matter composition from transesterified waste oils blends,” *Fuel*, vol. 84, no. 16, pp. 2080–2085, Nov. 2005, doi: 10.1016/j.fuel.2005.04.029.
19. S. Gürgen, B. Ünver, and İ. Altın, “Prediction of cyclic variability in a diesel engine fueled with n-butanol and diesel fuel blends using artificial neural network,” *Renew. Energy*, vol. 117, pp. 538–544, Mar. 2018, doi: 10.1016/j.renene.2017.10.101.
20. H. Oğuz, I. Saritas, and H. E. Baydan, “Prediction of diesel engine performance using biofuels with artificial neural network,” *Expert Syst. Appl.*, vol. 37, no. 9, pp. 6579–6586, Sep. 2010, doi: 10.1016/j.eswa.2010.02.128.
21. P. Shanmugam, V. Sivakumar, A. Murugesan, and M. Ilangkumaran, “Performance and exhaust emissions of a diesel engine using hybrid fuel with an artificial neural network,” *Energy Sources, Part A Recover. Util. Environ. Eff.*, vol. 33, no. 15, pp. 1440–1450, May 2011, doi: 10.1080/15567036.2010.539085.
22. K. Çelebi, E. Uludamar, E. Tosun, Ş. Yıldızhan, K. Aydın, and M. Özcanlı, “Experimental and artificial neural network approach of noise and vibration characteristic of an unmodified diesel engine fuelled with conventional diesel, and biodiesel blends with natural gas addition,” *Fuel*, vol. 197, pp. 159–173, Jun. 2017, doi: 10.1016/j.fuel.2017.01.113.
23. N. Akkouche, K. Loubar, F. Nepveu, M. E. A. Kadi, and M. Tazerout, “Micro-combined heat and power using dual fuel engine and biogas from discontinuous anaerobic digestion,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 205, p. 112407, Feb. 2020, doi: 10.1016/j.enconman.2019.112407.

24. S. Javed, R. U. Baig, and Y. V. V. S. Murthy, "Study on noise in a hydrogen dual-fuelled zinc-oxide nanoparticle blended biodiesel engine and the development of an artificial neural network model," *Energy*, vol. 160, pp. 774–782, Oct. 2018, doi: 10.1016/j.energy.2018.07.041.
25. S. Javed, Y. V. V. Satyanarayana Murthy, R. U. Baig, and D. Prasada Rao, "Development of ANN model for prediction of performance and emission characteristics of hydrogen dual fuelled diesel engine with Jatropa Methyl Ester biodiesel blends," *J. Nat. Gas Sci. Eng.*, vol. 26, pp. 549–557, Sep. 2015, doi: 10.1016/j.jngse.2015.06.041.
26. T. F. Yusaf, D. R. Buttsworth, K. H. Saleh, and B. F. Yousif, "CNG-diesel engine performance and exhaust emission analysis with the aid of artificial neural network," *Appl. Energy*, vol. 87, no. 5, pp. 1661–1669, May 2010, doi: 10.1016/j.apenergy.2009.10.009.
27. E. Uludamar *et al.*, "Evaluation of vibration characteristics of a hydroxyl (HHO) gas generator installed diesel engine fuelled with different diesel-biodiesel blends," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 42, no. 36, pp. 23352–23360, Sep. 2017, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.01.192.
28. J. Syed, R. U. Baig, S. Algarni, Y. V. V. S. Murthy, M. Masood, and M. Inamurrahman, "Artificial neural network modeling of a hydrogen dual fuelled diesel engine characteristics: An experiment approach," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 42, no. 21, pp. 14750–14774, May 2017, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.04.096.
29. H. Taghavifar, H. Taghavifar, A. Mardani, A. Mohebbi, S. Khalilarya, and S. Jafarmadar, "On the modeling of convective heat transfer coefficient of hydrogen fueled diesel engine as affected by combustion parameters using a coupled numerical-artificial neural network approach," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 40, no. 12, pp. 4370–4381, Apr. 2015, doi: 10.1016/j.ijhydene.2015.01.140.
30. S. Tasdemir, I. Saritas, M. Ciniviz, and N. Allahverdi, "Artificial neural network and fuzzy expert system comparison for prediction of performance and emission parameters on a gasoline engine," *Expert Syst. Appl.*, May 2011, doi: 10.1016/j.eswa.2011.04.198.
31. J. Martínez-Morales, H. Quej-Cosgaya, J. Lagunas-Jiménez, E. Palacios-Hernández, and J. Morales-Saldaña, "Design optimization of multilayer perceptron neural network by ant colony optimization applied to engine emissions data," *Sci. China Technol. Sci.*, vol. 62, no. 6, pp. 1055–1064, Jun. 2019, doi: 10.1007/s11431-017-9235-y.
32. M. M. Etghani, M. H. Shojaeefard, A. Khalkhali, and M. Akbari, "A hybrid method of modified NSGA-II and TOPSIS to optimize performance and emissions of a diesel engine using biodiesel," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 59, no. 1–2, pp. 309–315, Sep. 2013, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2013.05.041.
33. M. Deb, P. Majumder, A. Majumder, S. Roy, and R. Banerjee, "Application of artificial intelligence (AI) in characterization of the performance–emission profile of a single cylinder CI engine operating with hydrogen in dual fuel mode: An ANN approach with fuzzy-logic based topology optimization," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 32, pp. 14330–14350, Aug. 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.07.016.
34. J. K. Dukowicz, "A particle-fluid numerical model for liquid sprays," *J. Comput. Phys.*, vol. 35, no. 2, pp. 229–253, Apr. 1980, doi: 10.1016/0021-9991(80)90087-X.
35. L. M. Ricart, J. Xin, G. R. Bower, and R. D. Reitz, "In-cylinder measurement and modeling of liquid fuel spray penetration in a heavy-duty diesel engine," May 1997, doi: 10.4271/971591.
36. Y. Ra and R. D. Reitz, "A reduced chemical kinetic model for IC engine combustion simulations with primary reference fuels," *Combust. Flame*, vol. 155, no. 4, pp. 713–738, Dec. 2008, doi: 10.1016/j.combustflame.2008.05.002.
37. H. Yang, S. R. Krishnan, K. K. Srinivasan, K. C. Midkiff, "Modeling of NOx emissions using a superextended Zeldovich mechanism," *ASME 2003 Internal Combustion Engine and Rail Transportation Divisions Fall Technical Conference*, 2003, doi: 10.1115/ICEF2003-0713.
38. J. A. Miller and P. Glarborg, "Modeling the formation of N2O and NO2 in the thermal DeNOx process," *Springer Ser. Chem. Phys.*, vol. 61, pp. 318–333, 1996.
39. J. Sietsma and R. J. F. Dow, "Creating artificial neural networks that generalize," *Neural Networks*, vol. 4, no. 1, pp. 67–79, Jan. 1991, doi: 10.1016/0893-6080(91)90033-2.
40. D. Golmohammadi, "Neural network application for fuzzy multi-criteria decision making problems," *Int. J. Prod. Econ.*, vol. 131, no. 2, pp. 490–504, Jun. 2011, doi: 10.1016/j.ijpe.2011.01.015.

CONTACT WITH THE AUTHORS

M.I. Lamas

e-mail: isabellamas@udc.es

University of Coruna,

Mendizabal, 15403 Ferrol,

SPAIN

C.G. Rodriguez

e-mail: c.rodriguez.vidal@udc.es

University of Coruña,

Paseo Ronda, 15011 Coruña,

SPAIN

J.D. Rodriguez

e-mail: de.dios.rodriguez@udc.es

University of Coruña,

19 de Febreiro, 15405 Ferrol,

SPAIN

A. Abbas

e-mail: aa2642@mmsstate.edu

Missisipi State University,

Rood Hoad, 39762 Missisipi,

USA

Publicación 3

Carlos Gervasio Rodríguez; María Isabel Lamas; Juan de Dios Rodríguez; Amr Abbas. Possibilities of ammonia as both fuel and NOx reductant in marine engines: a numerical study. Journal of Maritime Science and Engineering, vol. 10, 43, 2022.

Datos de la revista

Nombre: Journal of Marine Science and Engineering

eISSN: 2077-1312

Primer año de publicación: 2013

**Categorías en Web of Science: Engineering, Marine; Engineering, Ocean;
Oceanography (en año 2021)**


Factor de impacto: 2,744 (en año 2021)

Cuartil: Q1 (en año 2021, en categoría Engineering, Marine)

Ranking: 10/16 en categoría Engineering, Marine (en año 2021)

Article

Possibilities of Ammonia as Both Fuel and NO_x Reductant in Marine Engines: A Numerical Study

 Carlos Gervasio Rodríguez ¹, María Isabel Lamas ^{1,*} , Juan de Dios Rodríguez ² and Amr Abbas ³
¹ Nautical Sciences and Marine Engineering Department, University of A Coruña, Mendizabal s/n, 15403 Ferrol, A Coruña, Spain; c.rodriguez.vidal@udc.es

² Industrial Engineering Department, University of A Coruña, Mendizabal s/n, 15403 Ferrol, A Coruña, Spain; de.dios.rodriguez@udc.es

³ Department of Mechanical Engineering, Mississippi State University, Starkville, MS 39762, USA; aa2642@msstate.edu

* Correspondence: isabel.lamas.galdo@udc.es

Abstract: Nowadays, the environmental impact of shipping constitutes an important challenge. In order to achieve climate neutrality as soon as possible, an important priority consists of progressing on the decarbonization of marine fuels. Free-carbon fuels, used as single fuel or in a dual-fuel mode, are gaining special interest for marine engines. A dual fuel ammonia-diesel operation is proposed in which ammonia is introduced with the intake air. According to this, the present work analyzes the possibilities of ammonia in marine diesel engines. Several ammonia-diesel proportions were analyzed, and it was found that when the proportion of ammonia is increased, important reductions of carbon dioxide, carbon monoxide, and unburnt hydrocarbons are obtained, but at the expense of increments of oxides of nitrogen (NO_x), which are only low when too small or too large proportions of ammonia are employed. In order to reduce NO_x too, a second ammonia injection along the expansion stroke is proposed. This measure leads to important NO_x reductions.

Keywords: ammonia; emissions; decarbonization; marine engines



Citation: Rodríguez, C.G.; Lamas, M.I.; Rodríguez, J.d.D.; Abbas, A. Possibilities of Ammonia as Both Fuel and NO_x Reductant in Marine Engines: A Numerical Study. *J. Mar. Sci. Eng.* **2022**, *10*, 43. <https://doi.org/10.3390/jmse10010043>

Academic Editor: Tie Li

Received: 27 November 2021

Accepted: 24 December 2021

Published: 1 January 2022

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2022 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

Marine transport, mainly powered by diesel engines, accounts for more than 90% of the transport of international trade goods [1]. The climate impact of shipping is one of the most important areas of ecology since ships are responsible for 2.2% of carbon dioxide (CO₂), 20.8% of nitrogen oxides (NO_x), 11.8% of sulfur oxides (SO_x), 8.57% of particulate matter 2.5 (PM_{2.5}), and 4.63% of particulate matter 10 (PM₁₀) emissions worldwide in 2019 [2,3]. Several restrictions have been imposed to reduce emissions from ships. The most crucial ones are included in the 73/78 MARPOL convention, (International Convention for the Prevention of Pollution from Ships), by the International Maritime Organization (IMO). This convention, which came into force in 2005 and is revised periodically, regulates several aspects of marine environmental pollution and has recently proposed a decarbonization strategy. One of the objectives of the IMO is the decarbonization of marine diesel engines as soon as possible along this century. Although renewable natural fuels such as biodiesel are gaining importance [4], carbon-free fuels are crucial to achieving the decarbonization of diesel engines. Two promising fuels which fulfill this requirement are hydrogen (H₂) and ammonia (NH₃). These fuels do not contain carbon nor sulfur and thus their combustion does not generate carbon emissions (CO₂, CO, HC, soot), or SO_x. Despite the good performance and low emissions of hydrogen, its storage is too complicated to be employed in marine engines [5]. Nevertheless, storage and distribution of ammonia are much easier. Besides, there is available infrastructure for the storage and transport of ammonia which can be used. Ammonia can be easily liquefied and stored at moderate pressures and temperatures, which makes ammonia easy to store on a ship.

On the other hand, hydrogen needs pressures that are too high at ambient temperature or too low, around 20 K [6]. According to this, ammonia storage is considerably cheaper than hydrogen storage. Another advantage of ammonia is that its manipulation under safe conditions is well documented. On the other hand, the main disadvantages are NH₃ slip and emissions of NO_x and N₂O. Ammonia is toxic, and its high slip concentration leads to risks and eutrophication.

Ammonia was first used as fuel in 1822. Sir Goldsworghy Gurney was the first person who used ammonia as fuel and applied it to a locomotive. The application of ammonia as fuel presents two main periods in history: developing an alternative fuel to face any oil crisis and, in the recent period, protecting the environment. The 1940s was an important decade for ammonia as a fuel due to the shortage of conventional fossil fuels during World War II. After World War II, the goal of engineers was to focus on alternative fuels to face any other possible future oil crisis. After this research, no significant research about ammonia as fuel was developed for a long time. However, ammonia has regained interest in recent years due to environmental reasons. It is worth mentioning that, despite it being applied as a fuel many years ago, the research of ammonia as a fuel for internal combustion engines is still in its infancy.

The literature shows that ammonia can be used in both spark ignition (SI) and compression ignition (CI) engines [7–11]. In SI engines, an important advantage is the high-octane number of ammonia, which improves the combustion properties and knock (when the fuel is abnormally auto ignited in local hot spots). On the other hand, the combustion of ammonia in CI engines is much more difficult due to the high autoignition temperature, narrow flammability limits, low flame speed, and high heat of vaporization. An appropriate performance in CI operation was only achieved with high compression ratios required for the autoignition of the fuel [7]. However, the option of partially replacing diesel fuel with ammonia in a dual fuel operation is a realistic option since diesel can be used to start the combustion of the mixture. Several authors obtained satisfactory combustion when ammonia gas is mixed into the intake air [8–14]. Regarding the marine field, currently, there are no commercial solutions but the main marine engines manufacturers such as MAN B&W, Wärtsilä, Caterpillar, etc., are developing encouraging studies to employ ammonia as fuel [15].

In the present work, ammonia is proposed to be used as a fuel for marine diesel engines. A dual fuel mode was analyzed using CFD (computational fluid dynamics), in which ammonia gas is introduced into the air-intake manifold, while diesel fuel was injected directly into the cylinder to trigger the mixture. Since one of the main drawbacks of ammonia is NO_x production, a second ammonia injection along the expansion stroke is proposed. This second injection leads to important NO_x reductions.

2. Materials and Methods

The engine analyzed in the present work, the MAN D2840LE V10, is a four-stroke diesel engine with 10 V-form cylinders and 18270 cm³ cylinder displacement volume. Each cylinder has one inlet and one exhaust valve, and the fuel injector is placed at the center of the cylinder head. The main characteristics at 100% load are summarized in Table 1.

Table 1. Engine characteristics.

| Parameter | Value |
|--------------------------|--------|
| Power (kW) | 320 |
| Speed (rpm) | 1500 |
| Compression ratio | 13.5:1 |
| Injection pressure (bar) | 220 |

Regarding the CFD model, Figure 1 shows the computational mesh at the bottom dead center position. A deforming mesh was employed in order to implement the movement of the valves and pistons.

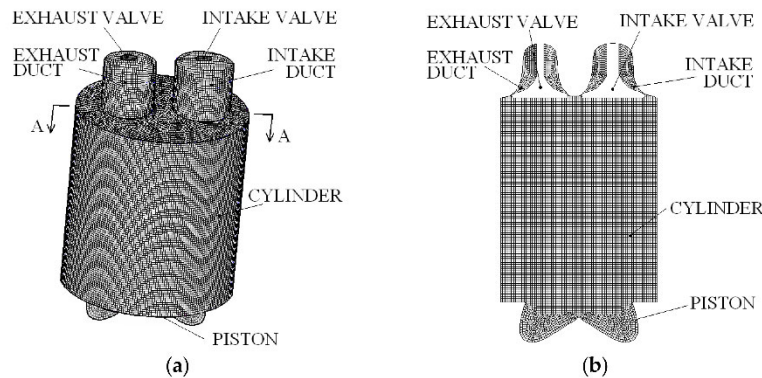


Figure 1. Computational mesh at bottom dead center. (a) Tri-dimensional view; (b) A-A section.

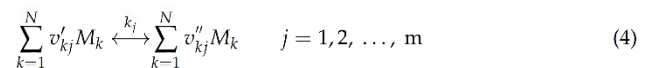
The CFD simulations were carried out through the open software OpenFOAM. As diesel combustion, ammonia combustion, and NO_x reduction schemes, the models of Ra and Reitz [16], Mathieu and Peterson [17], and Miller and Glarborg [18] were employed, respectively. The fuel heat-up and evaporation were treated through the Dukowicz [19] model and the fuel droplet breakup through the Kelvin-Helmoltz and Rayleigh-Taylor [20] model. The CFD model is based on the equations of conservation of mass, momentum, and energy, Equations (1)–(3), respectively.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\rho \overline{u'_i u'_j}) \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i H) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_h} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) + S_{rad} \tag{3}$$

where ρ represents the density, τ_{ij} the viscous stress tensor, σ_h the turbulent Prandtl number, μ_t the turbulent viscosity, and H the total enthalpy. The chemical reactions were treated through additional equations. Given a set of N species and m reactions, Equation (4), the local mass fraction of each species, f_k , can be expressed by Equation (5).



$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho f_k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i f_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{S_{ct}} \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \right) + S_k \tag{5}$$

where v'_{kj} are the stoichiometric coefficients of the reactant species M_k in the reaction j , v''_{kj} the stoichiometric coefficients of the product species M_k in the reaction j , S_{ct} the turbulent Schmidt number and S_k the net rate of production of the species M_k by chemical reaction, given by the molecular weight multiplied by the production rate of the species, Equation (6).

$$S_k = MW_k \frac{d[M_k]}{dt} \tag{6}$$

where MW_k is the molecular weight of the species M_k and $[M_k]$ its concentration. The net progress rate is given by the production of the species M_k minus the destruction of the species M_k along the m reactions:

$$\frac{d[M_k]}{dt} = \sum_{j=1}^m \left\{ (v_{kj}'' - v_{kj}') \left[k_{fj} \prod_{k=1}^N [M_k]^{v_{kj}'} - k_{bj} \prod_{k=1}^N [M_k]^{v_{kj}''} \right] \right\} \quad (7)$$

where k_{fj} and k_{bj} are the forward and backward reaction rate constants for each reaction j .

Operating under diesel, the validation with experimental results was developed in previous works [21–23] and thus is not shown here in detail. Figure 2 illustrates the experimentally and numerically obtained in-cylinder pressure against the crank angle at 100% load and Figure 3 the experimentally and numerically obtained SFC (specific fuel consumption) and emissions at several loads. In the experimental tests, the gas analyzers Gasboard-3000 and Gasboard-3030 were employed. Operating under the dual fuel mode ammonia-diesel, the validation using experimental results was not realized due to safety reasons. Ammonia is highly toxic and any accident during the experimental sets could have dramatic consequences for the staff. Nevertheless, the ammonia combustion mechanism was validated for several equivalence ratios, temperatures, and pressures elsewhere [17], in which satisfactory results have been obtained for the species concentrations. NO_x is mainly produced by thermal, fuel and prompt mechanisms, and Mathieu and Peterson found that their model is able to accurately predict NO_x .

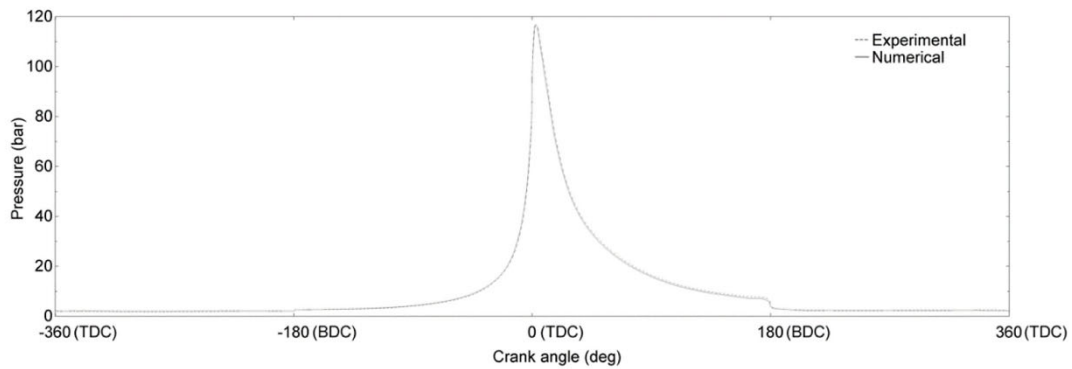


Figure 2. In-cylinder pressure.

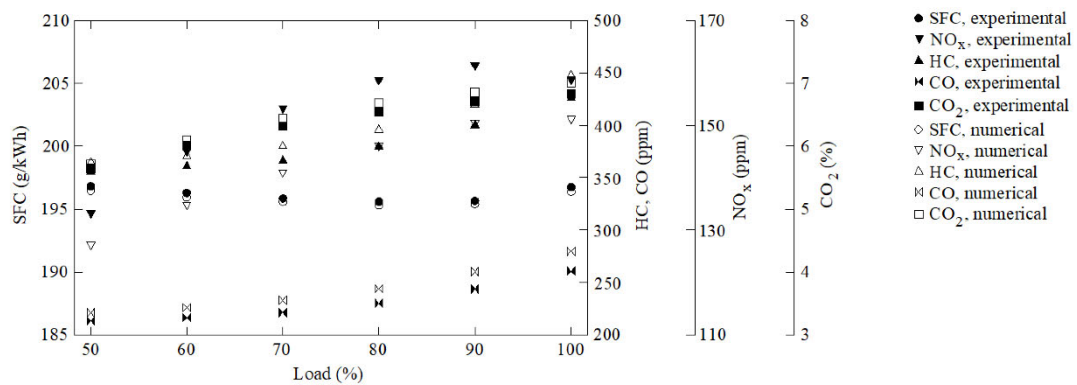


Figure 3. Emissions and consumption.

Regarding Figure 2, the relation between the crank angle and volume is given by Equation (8) [24].

$$V = V_c + \frac{\pi B^2}{4} \left(L + A - A \cos \theta - \sqrt{L^2 - A^2 \sin^2 \theta} \right) \quad (8)$$

where V is the cylinder volume, V_c is the clearance volume, B the bore, L the connecting rod length, A the crank radius and θ the crank angle.

3. Results and Discussion

Once validated, this CFD model was employed to analyze the dual-mode ammonia-diesel operation. Different proportions of diesel and ammonia were employed under the same power, 320 kW, corresponding to the nominal power using diesel fuel alone. The intake energy rate from diesel or ammonia fuel was computed by the fuel flow rate multiplied by the lower heating value. According to this, the energy contribution from diesel fuel can be obtained by the following expression:

$$\dot{E}_{diesel} = \frac{\dot{m}_{diesel} LHV_{diesel}}{\dot{m}_{diesel} LHV_{diesel} + \dot{m}_{NH_3} LHV_{NH_3}} \quad (9)$$

where \dot{m}_{diesel} and \dot{m}_{NH_3} are the fuel flow rate of diesel and ammonia, respectively, while LHV_{diesel} and LHV_{NH_3} are the lower heating value of diesel and ammonia, respectively.

Several experimental results available in the literature concluded that a 100% ammonia fuel mode (i.e., $\dot{E}_{diesel} = 0$) leads to performance problems in compression ignition engines because ammonia has a high resistance to autoignition [25,26]. According to this, the power contribution from diesel fuel analyzed in the present work encompasses the range from 10 to 100%. It is worth mentioning that it is possible to reach 320 kW using only 10% diesel power contribution but at expenses of an excessive ammonia fuel contribution and thus considerable emissions of non-reacted ammonia to the exhaust gas. Nevertheless, these low proportions of power contribution from diesel fuel were also analyzed for illustrative purposes. Regarding NO_x , it is well-known that almost all NO_x produced by compression ignition engines is NO [22,27]. The NO emissions obtained in the present work against the power contribution from diesel fuel are shown in Figure 4. On the one hand, ammonia promotes NO emissions due to its nitrogen content. On the other hand, ammonia leads to lower combustion temperatures (Figure 5 illustrates the in-cylinder average temperature under 50% and 100% power contribution from diesel fuel). Since the main source of NO in internal combustion engines are the high temperatures that are reached in the cylinder [28–31], a reduction of these temperatures leads to a NO emission reduction too. These opposed effects between promoting/mitigating NO formation by ammonia fuel make the net result unpredictable and are responsible for the pattern shown in Figure 4. Under low power contributions from diesel fuel, the quantity of ammonia introduced into the cylinder is so excessive that the NO emissions are high. As the power contribution from diesel fuel is increased, the quantity of ammonia is reduced, and thus NO emissions. At around 70% power contribution from diesel fuel, the NO emissions are minimal and these slightly increase again when the power contribution from diesel fuel is increased due to the increment of the combustion temperature.

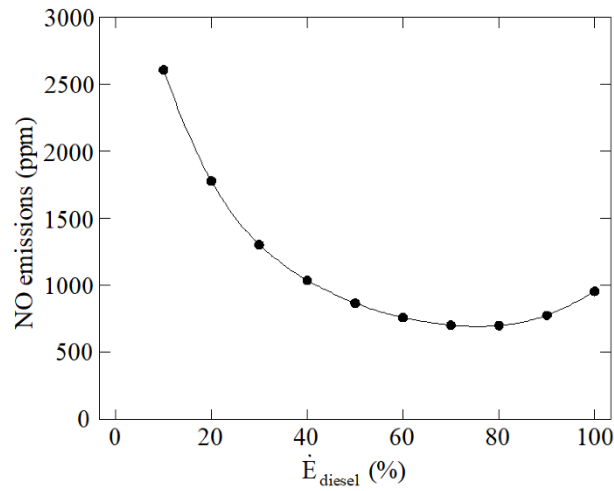


Figure 4. NO emissions against the power contribution from diesel fuel.

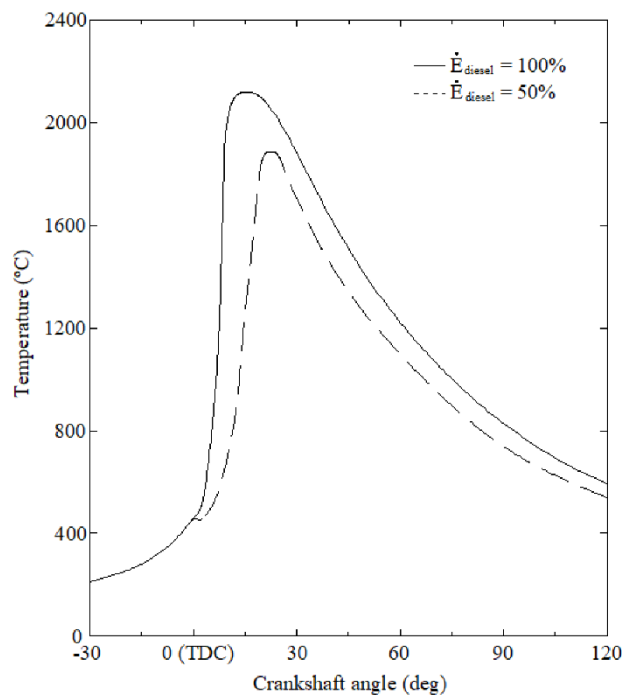


Figure 5. In-cylinder average temperature under 100% and 50% power contribution from diesel fuel.

Regarding CO and HC emissions, these are shown in Figures 6 and 7, respectively. As in the case of NO, two opposed effects can also be found. On the one hand, high quantities of ammonia promote less CO and HC emissions due to the lower carbon content of the whole fuel, since ammonia has no carbon. On the other hand, the lower combustion temperatures obtained when using ammonia promote incomplete combustion and thus

lead to CO and HC formation. HC and CO are produced mainly by the slow combustion and partial burning caused by lower combustion temperatures. These opposing effects can be shown in Figures 6 and 7. As can be seen, when the power contribution from diesel fuel is low the CO and HC emissions are low too, these increment to a maximum value corresponding to around 50% power contribution from diesel fuel. From this power contribution, the CO and HC emissions decrease again.

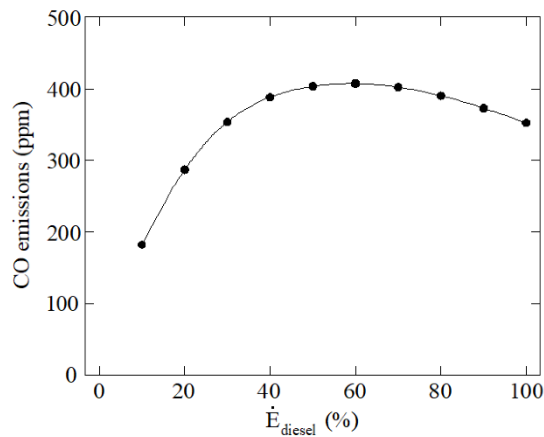


Figure 6. CO emissions against the power contribution from diesel fuel.

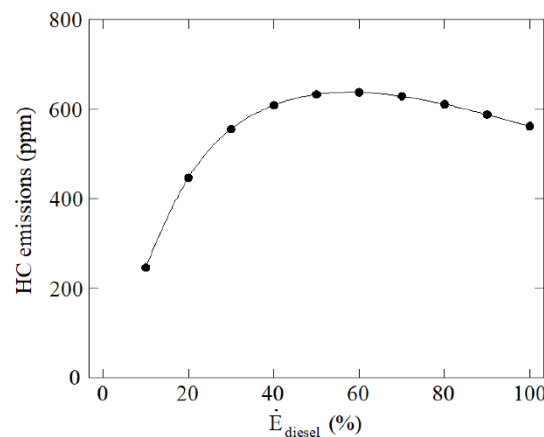


Figure 7. HC emissions against the power contribution from diesel fuel.

CO₂ emissions are illustrated in Figure 8. These emissions are clearly reduced as diesel fuel contribution is reduced too due to the lower carbon content when more ammonia and less diesel is employed as fuel. The relation between the power contribution from diesel fuel and CO₂ emissions is not linear because when the power contribution from diesel fuel is low the proportion of ammonia in the fuel is too high to reach the 320 kW established. The heating value of ammonia, 18.6 MJ/kg, is considerably lower than the heating value of diesel, 42.4 MJ/kg. According to this, CO₂ is drastically reduced under low power contributions from diesel fuel since the quantity of diesel fuel is much lower than the quantity of ammonia fuel.

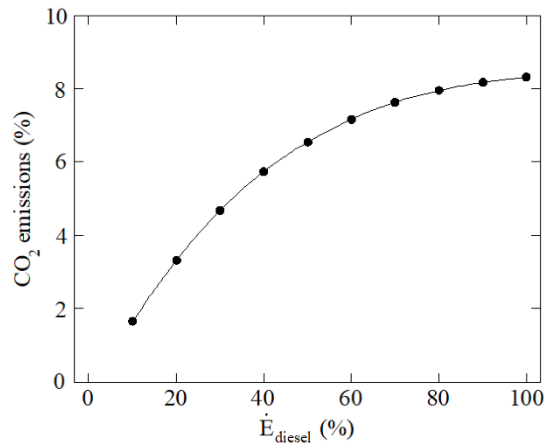


Figure 8. CO₂ emissions against the power contribution from diesel fuel.

The thermodynamic efficiency is shown in Figure 9. As can be seen, this efficiency decreases as more ammonia is employed. The main reason is that ammonia does not burn completely, and a proportion of the intake ammonia is emitted with the exhaust gases. Another reason is that as more ammonia is employed the compression ratio is reduced. Since the efficiency is related to the compression ratio, this is another reason that explains the reduction of thermodynamic efficiency when using ammonia. The ammonia utilization efficiency is also represented in Figure 9, which was computed through the following expression:

$$\eta_{\text{NH}_3} = 1 - \frac{\dot{m}_{\text{NH}_3\text{output}}}{\dot{m}_{\text{NH}_3\text{input}}} \tag{10}$$

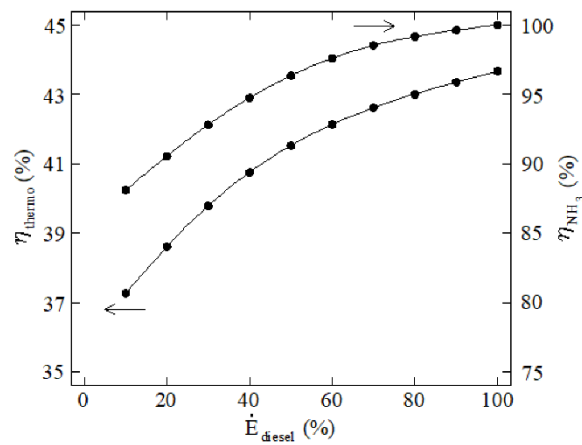


Figure 9. Thermodynamic and ammonia utilization efficiencies against the power contribution from diesel fuel.

Figure 10 shows the in-cylinder pressure against the whole cycle for 50% and 100% diesel contribution. As can be seen, the pressure is reduced when ammonia is employed.

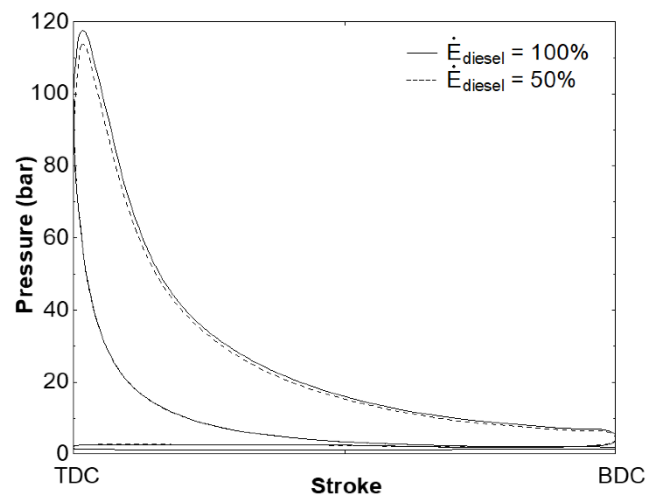


Figure 10. In-cylinder pressure under 100% and 50% power contribution from diesel fuel.

Besides fuel, another application of ammonia consists of NO_x reduction agent. Ammonia is highly employed in SCR (Selective Catalytic Reduction) and SNCR (selective non-catalytic reduction) post-treatments. The main disadvantage of SNCR is that this procedure is only efficient in a narrow temperature range, around 1100–1400 K, considerably higher than the usual temperatures of flue gas from diesel engines. In SCR, the NO_x reduction can be realized at the common temperatures of flue gas from diesel engines by the use of catalysts. The main disadvantages of SCR are the price and limited durability of catalysts. According to this, the present work proposes to realize an additional ammonia injection along the expansion stroke, when the in-cylinder temperature is optimal for NO_x reduction. For instance, the low NO emissions obtained for 70% power contribution from diesel fuel in Figure 4 can be further reduced by injecting ammonia along the expansion stroke. Particularly, in Figure 8 ammonia was injected at 40° crankshaft angle after top dead center, and several ammonia to initial NO (NO_i) ratios were analyzed. As can be seen in Figure 9, NO emissions are highly reduced, but it is worth mentioning the increment of non-reacting ammonia into the exhaust gas when too much ammonia is employed. This non-reacting ammonia is called ammonia slip. According to this, this measure requires precise control of the ammonia injection rate to avoid too high ammonia emissions to the atmosphere. This problem is also characteristic of SCR systems, which also require precise control of the ammonia injected. Another handicap of ammonia consists of the formation of N_2O , which has a high global warming effect. Figure 11 also includes N_2O emissions, which increase as more ammonia is introduced into the engine.

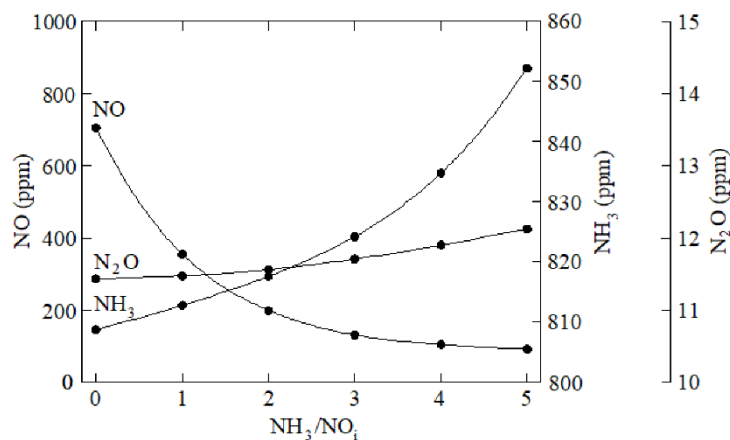


Figure 11. NO, N₂O, and NH₃ emissions against the NH₃/NO_x ratio.

4. Conclusions

The present work focuses on ammonia application as an alternative fuel to be used in compression ignition engines, especially marine engines. The goal is the decarbonization of the marine field. A dual fuel mode based on ammonia injection with the intake air was modeled through CFD. Different proportions of diesel and ammonia were analyzed. It was found that the thermodynamic efficiency was reduced as more ammonia is employed, which leads to a higher engine energy consumption when using ammonia compared to diesel fuel. As expected, a considerable reduction of CO₂ was obtained when using ammonia since this fuel does not contain carbon. Regarding CO and HC emissions, too high ammonia proportions led to low CO and HC emissions. On the other hand, too low ammonia proportions also reduce CO and HC emissions due to the higher combustion temperatures, which facilitates complete combustion. Regarding NO_x emissions, two opposed effects were also found. On the one hand, low proportions of ammonia lead to high NO_x emissions due to the high combustion temperatures. On the other hand, high proportions of ammonia lead to high nitrogen introduced into the engine and thus high NO emissions. These two opposing effects caused decreasing/increasing NO emissions depending on the ammonia proportion. Since high ammonia proportions lead to extremely high NO emissions, a measure to reduce these emissions was proposed in the present work. This measure consists of injecting ammonia again during the expansion stroke in order to act as NO reductant. Considerable NO reductions were obtained through this measure but at expenses of excessive NH₃ slip to the exhaust gas (which exceeds safe limits) and N₂O emissions. In order to be a viable alternative, the ammonia injection procedure must be carefully analyzed and/or after-treatment systems since NH₃ is highly toxic and N₂O is a powerful greenhouse gas, much more dangerous than carbon dioxide. Future works will focus on reducing both NH₃ and N₂O emissions.

Author Contributions: Conceptualization, C.G.R., M.I.L., J.d.D.R. and A.A.; methodology, C.G.R., M.I.L., J.d.D.R. and A.A.; software, C.G.R., M.I.L., J.d.D.R. and A.A.; validation, C.G.R.; formal analysis, M.I.L.; investigation, C.G.R., M.I.L., J.d.D.R. and A.A.; resources, C.G.R.; data curation, C.G.R.; writing—original draft preparation, M.I.L.; writing—review and editing, C.G.R., J.d.D.R. and A.A.; supervision, M.I.L., J.d.D.R. and A.A.; project administration, C.G.R., M.I.L., J.d.D.R. and A.A. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research received no external funding.

Informed Consent Statement: Not applicable.

Acknowledgments: The authors would like to express their gratitude to Norplan Engineering S.L. and recommend the courses “CFD with OpenFOAM” and “C++ applied to OpenFOAM” available at www.technicalcourses.net (accessed on 26 November 2021).

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

References

- Deng, J.; Wang, X.; Wei, Z.; Wang, L.; Wang, C.; Chen, Z. A review of NO_x and SO_x emission reduction technologies for marine diesel engines and the potential evaluation of liquefied natural gas fuelled vessels. *Sci. Total Environ.* **2021**, *766*, 144319. [CrossRef] [PubMed]
- Zincir, B. A short review of ammonia as an alternative marine fuel for decarbonised maritime transportation. In Proceedings of the ICEESEN2020, Kayseri, Turkey, 19–21 November 2020.
- European Energy Agency (EEA). Emission of Air Pollutants from Transport. Available online: <https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/indicators/transport-emissions-of-air-pollutants-8/transport-emissions-of-air-pollutants-6#tab-related-briefings> (accessed on 26 November 2021).
- Pušćár, M.; Kopas, M.; Sabadka, D.; Kliment, M.; Šoltésová, M. Reduction of the gaseous emissions in the marine diesel engine using biodiesel mixtures. *J. Mar. Sci. Eng.* **2020**, *8*, 330. [CrossRef]
- Seddiek, I.S.; Elgohary, M.M.; Ammar, N.R. The hydrogen-fuelled internal combustion engines for marine applications with a case study. *Brodogradnja* **2015**, *66*, 23–38.
- Dimitriou, P.; Javadi, R. A review of ammonia as a compression ignition engine fuel. *Int. J. Hydrog. Energy.* **2020**, *45*, 7098–7118. [CrossRef]
- Lee, D.; Song, H.H. Development of combustion strategy for the internal combustion engine fueled by ammonia and its operating characteristics. *J. Mech. Sci. Technol.* **2018**, *32*, 1905–1925. [CrossRef]
- Reiter, A.J.; Jong, S.C. Demonstration of compression-ignition engine combustion using ammonia in reducing greenhouse gas emissions. *Energy Fuels.* **2008**, *22*, 2963–2971. [CrossRef]
- Reiter, A.J.; Kong, S.C. Combustion and emissions characteristics of compression-ignition engine using dual ammonia-diesel fuel. *Fuel* **2011**, *90*, 87–97. [CrossRef]
- Niki, Y.; Nitta, Y.; Sekiguchi, H.; Hirata, K. Diesel fuel multiple injection effects on emission characteristics of diesel engine mixed ammonia gas into intake air. *J. Eng. Gas Turbines Power* **2019**, *141*, 061020. [CrossRef]
- Gill, S.S.; Chatha, G.S.; Tsolakis, A.; Golunski, S.E.; York, A.P.E. Assessing the effects of partially decarbonising a diesel engine by co-fuelling with dissociated ammonia. *Int. J. Hydrog. Energy* **2012**, *37*, 6074–6083. [CrossRef]
- Niki, Y.; Nitta, Y.; Sekiguchi, H.; Hirata, K. Emission and combustion characteristics of diesel engine fumigated with ammonia. In Proceedings of the ASME 2018 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference, San Diego, CA, USA, 7 November 2018. [CrossRef]
- Tay, K.L.; Wang, W.M.; Li, J.; Zhou, D. Numerical investigation on the combustion and emissions of a kerosene-diesel fueled compression ignition engine assisted by ammonia fumigation. *Appl. Energy* **2017**, *204*, 1476–1488. [CrossRef]
- Tay, K.L.; Yang, W.; Chou, S.K.; Zhou, D.; Li, J.; Yu, W.; Zhao, F.; Mohan, B. Effects of injection timing and pilot fuel on the combustion of a kerosene-diesel/ammonia dual fuel engine: A numerical study. *Energy Procedia* **2017**, *105*, 4621–4626. [CrossRef]
- Kim, K.; Roh, G.; Kim, W.; Chun, K. A preliminary study on an alternative ship propulsion system fueled by ammonia: Environmental and economic assessments. *J. Mar. Sci. Eng.* **2020**, *8*, 183. [CrossRef]
- Ra, Y.; Reitz, R.D. A reduced chemical kinetic model for IC engine combustion simulations with primary reference fuels. *Combust. Flame* **2008**, *155*, 713–738. [CrossRef]
- Mathieu, O.; Petersen, E.L. Experimental and modeling study on the high-temperature oxidation of ammonia and related NO_x chemistry. *Combust. Flame* **2015**, *162*, 554–570. [CrossRef]
- Miller, J.A.; Glarborg, P. *Modeling the Formation of N₂O and NO₂ in the Thermal DeNO_x Process*; Springer Series in Chemical Physics; Springer: Berlin, Germany, 1996; pp. 318–333.
- Dukowicz, J.K. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *J. Comput. Phys.* **1980**, *35*, 229–253. [CrossRef]
- Ricart, L.M.; Xin, J.; Bower, G.R.; Reitz, R.D. *In-Cylinder Measurement and Modeling of Liquid Fuel Spray Penetration in a Heavy-Duty Diesel Engine*. SAE Technical Paper 971591; SAE International: Warrendale, PA, USA, 1997. [CrossRef]
- Lamas Galdo, M.I.; Rodríguez García, J.D.; Rodríguez Vidal, C.G. Modelo de mecánica de fluidos computacional para el estudio de la combustión en un motor diésel de cuatro tiempos. *DYNA Ing. E Ind.* **2013**, *88*, 91–98. [CrossRef]
- Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G. Numerical model to analyze NO_x reduction by ammonia injection in diesel-hydrogen engines. *Int. J. Hydrog. Energy.* **2017**, *42*, 26132–26141. [CrossRef]
- Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G. NO_x reduction in diesel-hydrogen engines using different strategies of ammonia injection. *Energies* **2019**, *12*, 1255. [CrossRef]
- Heiwood, H.B. *Internal Combustion Engine Fundamentals*, 2nd ed.; McGraw-Hill: New York, NY, USA, 1988; ISBN 007028637X.
- Reusser, C.A.; Pérez Osses, J.R. Challenges for zero-emissions ship. *J. Mar. Sci. Eng.* **2021**, *9*, 1042. [CrossRef]
- Mallouppas, G.; Yfantis, E.A. Decarbonization in shipping industry: A review of research, technology development, and innovation proposals. *J. Mar. Sci. Eng.* **2021**, *9*, 415. [CrossRef]

27. Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G.; Aas, H.P. Computational fluid dynamics analysis of NO_x and other pollutants in the MAN B&W 7S50MC marine engine and effect of EGR and water addition. *Trans. RINA Int. J. Marit. Eng.* **2013**, *155*, 81–88.
28. Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G.; Rodríguez, J.D.; Telmo, J. Computational fluid dynamics analysis of NO_x reduction by ammonia injection in the MAN B&W 7S50MC marine engine. *Trans. RINA Int. J. Marit. Eng.* **2014**, *156*, 213–220. [[CrossRef](#)]
29. Lamas, M.I.; Rodríguez, C.G.; Rodríguez, J.D.; Telmo, J. Internal modifications to reduce pollutant emissions from marine engines. A numerical approach. *Int. J. Nav. Archit. Ocean Eng.* **2013**, *5*, 493–501. [[CrossRef](#)]
30. Rodríguez, C.G.; Lamas, M.I.; Rodríguez, J.D.; Caccia, C. Analysis of the pre-injection configuration in a marine engine through several MCDM techniques. *Brodogradnja* **2021**, *72*, 1–17. [[CrossRef](#)]
31. Rodríguez, C.G.; Lamas, M.I.; Rodríguez, J.D.; Abbas, A. Analysis of the pre-injection system of a marine diesel engine through multiple-criteria decision making and artificial neural networks. *Polish Marit. Res.* **2021**, *28*, 88–96. [[CrossRef](#)]