



ΕΘΝΙΚΟ  
ΜΕΤΣΟΒΙΟ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Α.Π. : 44057  
Αθήνα, 31/8/18

ΚΟΣΜΗΤΟΡΑΣ

Προς τα Μέλη ΔΕΠ της  
Σχολής Μηχ/γων  
Μηχ/κών

### ΠΡΟΣΚΛΗΣΗ

Σας προσκαλούμε στην παρουσίαση της Διδακτορικής Διατριβής του Υ.Δ. κ. **ΜΑΛΛΙΩΤΑΚΗ Ζήση** που εκπόνησε στον Τομέα Θερμότητας, διπλωματούχος **ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΟΣ ΜΗΧΑΝΙΚΟΣ** του ΕΜΠ, η οποία θα πραγματοποιηθεί την *Τρίτη 11 Σεπτεμβρίου 2018*, ώρα *12:00π.μ.* στην αίθουσα Τηλεδιάσκεψης της Κεντρικής Βιβλιοθήκης του ΕΜΠ - Πολυτεχνειούπολη Ζωγράφου. Ο ελληνικός τίτλος της Διδακτορικής Διατριβής είναι ο εξής :

**«ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΜΗΧΑΝΙΣΜΩΝ ΧΗΜΙΚΗΣ ΚΙΝΗΤΙΚΗΣ ΓΙΑ ΤΗ ΚΑΥΣΗ C1-C7 ΥΔΡΟΓΟΝΑΝΘΡΑΚΩΝ ΚΑΙ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΑΛΗΘΕΥΣΗ»**

Και ο Αγγλικός τίτλος ως εξής:

**« DEVELOPMENT AND OPTIMIZATION OF CHEMICAL KINETIC MECHANISMS FOR THE COMBUSTION OF C1-C7 HYDROCARBONSPECIES AND EXPERIMENTAL VALIDATION»**

Ο Κοσμήτορας της Σχολής

  
N. Μαρμαράς  
Καθηγητής Ε.Μ.Π

## Περίληψη Διδακτορικής Διατριβής

Υ.Δ. Μηχ.- Μηχ. Ζήση Μαλλιωτάκη

### Τίτλος: ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΑΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΜΗΧΑΝΙΣΜΩΝ ΧΗΜΙΚΗΣ ΚΙΝΗΤΙΚΗΣ ΚΑΥΣΗΣ C1-C7 ΥΔΡΟΓΟΝΑΝΘΡΑΚΩΝ ΚΑΙ ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΕΠΑΛΗΘΕΥΣΗ

Η παρούσα διατριβή ασχολείται με την ανάπτυξη και βελτίωση μοντέλων χημικής κινητικής που περιγράφουν τη διαδικασία οξείδωσης καυσίμων σχετικών με τη λειτουργία κινητήρων, χρησιμοποιώντας μια πληθώρα υπολογιστικών και πειραματικών εργαλείων. Η μελέτη επικεντρώνεται σε α) οξυγονούχους υδρογονάνθρακες - πιθανά βιοκαύσιμα, β) σημαντικά ενδιάμεσα προϊόντα της καύσης που μπορεί να οδηγήσουν στο σχηματισμό ελεγχόμενων ρύπων και γ) μεγαλύτερους παραφινικούς και αρωματικούς υδρογονάνθρακες που θεωρούνται υποκατάστατα των καυσίμων.

Ειδικότερα μελετάται η χημική κινητική του οξικού οξέος, της αιθανόλη και της ακεταλδεΐδης, αξιοποιώντας πειραματικά δεδομένα από υπερστοιχειομετρικές φλόγες προανάμιξης αιθυλενίου.

Η διατριβή είναι η πρώτη που διερευνά τη συμπεριφορά των οξυγονούχων καυσίμων  $C_2$  από διαφορετικές οικογένειες χημικών ειδών σε παρόμοιες συνθήκες φλογών προανάμιξης. Έμφαση δίνεται στον ρόλο των  $>C_2$  ειδών στη συμπεριφορά και απόδοση του συνολικού μηχανισμού. Με παρόμοιο τρόπο εξετάζεται το κομμάτι του μηχανισμού που περιγράφει την κατανάλωση και το σχηματισμό του βενζολίου. Γίνεται χρήση αλγορίθμου για την αυτοματοποιημένη δημιουργία μοντέλων χημικής κινητικής με σκοπό την ανάπτυξη δύο μοντέλων για την καύση εξανίου. Τα αναπτυχθέντα μοντέλα επαληθεύονται έναντι πειραματικών δεδομένων συγκέντρωσης χημικών ειδών, ταχύτητας φλόγας και χρόνου υστέρησης ανάφλεξης. Αξιολογείται η επίδραση της χημείας των μικρότερων χημικών ειδών στην ανάπτυξη και την απόδοση του μηχανισμού. Επιπλέον, πραγματοποιήθηκαν μετρήσεις νέων πειραματικών δεδομένων πρωτογενών καυσίμων αναφοράς (TRF-Toluene Reference Fuels), δηλαδή: Μίγματα επτανίου και τολουολίου που καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα όσον αφορά την πίεση, θερμοκρασία, τον λόγο αέρα/καυσίμου και τον λόγο μεταξύ των δύο καυσίμων. Οι μετρήσεις αξιοποιήθηκαν για την επαλήθευση ενός μηχανισμού για TRF, ενώ πραγματοποιήθηκε ανάλυση του μηχανισμού δείχνοντας την επίδραση της χημείας του τολουολίου στην χημεία του επτανίου.

Αναδεικνύεται η σημασία της χημείας των χαμηλότερων χημικών ειδών στην ανάπτυξη μοντέλων για πραγματικά καύσιμα, ενώ παράλληλα παρέχονται δύο μηχανισμοί και αντίστοιχα πειραματικά δεδομένα ως στόχοι επαλήθευσης.