

کاهش مکانیزم احتراقی سوخت دی‌متیل‌اتر با استفاده از الگوریتم‌های بهینه‌سازی ازدحام ذرات، تکامل تفاضلی و مدولاسیون زاویه‌ای

سید محسن موسوی^۱، جواد خادم^{۲*}، علی صفوی‌نژاد^۳

۱- دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، mohsen_mousavi@birjand.ac.ir

۲- دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، jkhadem@birjand.ac.ir

۳- دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، asafavi@birjand.ac.ir

* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۲/۱۰، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۱/۰۳/۲۹، پذیرش: ۱۴۰۱/۰۴/۰۸)

چکیده: مدل‌سازی ریاضی به عنوان ابزاری برای پیش‌بینی رفتار احتراقی سوخت‌ها به کار می‌رود. استفاده از ساز و کارهای سینتیک شیمیایی مفصل در مدل‌های احتراقی به افزایش قابل توجه زمان محاسبات می‌انجامد. الگوریتم‌های بهینه‌سازی فراابتکاری یکی از روش‌های مورد استفاده برای کاهش مکانیزم‌های مفصل است. هدف این مقاله، بررسی امکان استفاده از الگوریتم‌های فراابتکاری پیوسته در فضای دودویی برای کاهش مکانیزم احتراقی سوخت دی‌متیل‌اتر است. به این منظور از الگوریتم‌های ازدحام ذرات و تکامل تفاضلی استفاده شده و با استفاده از نگاشتی تحت عنوان مدولاسیون زاویه‌ای برای نگاشت فضای پیوسته به فضای دودویی، تعداد متغیرهای مسئله از ۳۵۱ به ۶ متغیر کاهش یافته است. در نهایت، از مکانیزم مفصل دی‌متیل‌اتر شامل ۳۵۱ واکنش ابتدایی و ۷۹ گونه شیمیایی، مکانیزم کاهش-یافته‌ای با ۴۳ واکنش ابتدایی و ۱۷ گونه به دست آمده که نتایج حاصل از به‌کارگیری آن در شبیه‌سازی دو راکتور فشار ثابت و شعله آرام پیش‌آمیخته، حداکثر خطای ۰/۹۵ درصد را نسبت به مکانیزم مفصل نشان می‌دهد.

کلیدواژگان: سینتیک شیمیایی، مکانیزم کاهش‌یافته، ازدحام ذرات، تکامل تفاضلی، مدولاسیون زاویه‌ای.

مقدمه

احتراق نقش مهمی در جنبه‌های مختلف زندگی انسان بازی می‌کند و با تکامل نیازهای فناورانه و پیشرفت آن‌ها، نقش احتراق ادامه خواهد یافت. انرژی حاصل از احتراق، در درجه اول برای گرمایش و تولید توان استفاده می‌شود. به‌عنوان مثال، چالش‌هایی که امروزه با آن‌ها مواجه هستیم، از قبیل کاهش کیفیت انرژی، حل مسئله تغییرات اقلیمی جهانی و نگرانی‌های زیست‌محیطی، همگی نیازمند احتراق کارآمدتر و پاکیزه‌تر هستند. فرایند احتراق بهینه و با حداقل آلاینده‌گی، تنها زمانی قابل دستیابی است که سیستم به‌طور دقیق مدل‌سازی شود. دو رهیافت عمده در مدل‌سازی احتراق و جریان‌های واکنشی وجود دارد. رهیافت اول که هزینه محاسباتی کمتری دارد، به شیمی بی‌نهایت سریع معروف است که در آن واکنش احتراق در مقایسه با سایر پدیده‌های فیزیکی، بسیار سریع‌تر فرض می‌شود. این رهیافت در واقع رهیافت اولیه مطالعات احتراقی بوده است و در مطالعه فرایندهایی که در آن‌ها میزان حرارت آزاد شده از احتراق، اهمیت دارد، کاربرد فراوانی داشته است. اما امروزه با پیشرفت نیازهای مدل‌سازی، نیازمند استفاده از رهیافت شیمی با سرعت محدود هستیم. چنین شرایطی در کاربردهایی نظیر بررسی تشکیل آلاینده‌ها، شناسایی ساختار شعله یا بررسی اثرات واکنش‌های شیمیایی و خصوصیات آشفتنی جریان بر یکدیگر، وجود دارند. در این رهیافت، واکنش احتراق در مقیاس‌های زمانی قابل مقایسه با پدیده‌های فیزیکی، انجام می‌شود. بنابراین لازم است که سرعت و نحوه انجام واکنش‌های ابتدایی را بدانیم. چنین اطلاعاتی را می‌توان به کمک سینتیک

شیمیایی به دست آورد. مطالعات سینتیک غالباً با استفاده از مکانیزم‌های شیمیایی مفصل انجام می‌شود. مکانیزم‌های مفصل سوخت‌ها، توصیف دقیقی از سینتیک احتراق در محدوده وسیعی از دماها، فشارها و ترکیبات را ارائه می‌کنند. برای سوخت‌های کاربردی (که مخلوطی از چند هیدروکربن با تعداد اتم‌های کربن زیاد هستند) این مکانیزم‌های مفصل شامل چند هزار گونه و واکنش ابتدایی می‌باشند، به طوری که هرچه تعداد اتم‌های کربن موجود در سوخت، بیشتر باشد، اندازه مکانیزم نیز بزرگتر خواهد شد. به همین خاطر استفاده از مکانیزم‌های مفصل در شبیه‌سازی‌ها، به دلیل حجم محاسبات بسیار زیاد، زمان‌بر بوده و هزینه محاسباتی زیادی دارد. به این دلایل، شبیه‌سازی کارآمد سیستم‌های واکنشی، نیازمند توسعه و استفاده از مکانیزم‌های ساده شده و در عین حال دقیق با تعداد کمی متغیر است.

در دهه‌های اخیر، تحقیقات فراوانی برای کاهش مکانیزم‌های شیمیایی مفصل انجام شده است. به طور کلی، روش‌های کاهش مکانیزم را می‌توان به چهار گروه تقسیم کرد: روش‌های حذف گونه‌ها یا واکنش‌های غیرمهم، روش‌های مبتنی بر آنالیز مقیاس زمانی، روش‌های یکپارچه‌سازی و روش‌های جدول‌سازی-بازیابی. روش‌هایی که شامل انتخاب و حذف گونه‌ها و واکنش‌های غیرمهم هستند عبارتند از: آنالیز حساسیت^۱، گراف روابط جهت‌دار^۲ و روش‌های مختلف بهینه‌سازی^۳.

در آنالیز حساسیت، تغییرات برخی پارامترهای مهم مانند زمان تأخیر در اشتعال، غلظت گونه‌ها یا سرعت شعله آرام، در اثر تغییرات کوچک نرخ واکنش، محاسبه می‌شود که از آن جمله می‌توان به کارهای تانگ و همکاران [۱] و لو و همکاران [۲] اشاره کرد. آن‌ها برای کاهش مکانیزم احتراق سوخت دودکان نرمال، از ترکیب آنالیز حساسیت با روش‌های دیگر کاهش مکانیزم استفاده کرده و مکانیزم‌های کوچک‌تری را به دست آوردند. از آنالیز حساسیت به طور گسترده در بررسی و آنالیز سینتیک شیمیایی استفاده شده است. این روش با جزئیات بیشتری توسط سالتلی و همکاران [۳] توضیح داده شده است.

در روش‌های گرافی با تعیین میزان وابستگی بین هر دو گونه، ساختار گراف روابط جهت‌دار تعیین می‌شود. بعد از انتخاب گونه‌های هدف، برای هر یک از گونه‌های دیگر یک ضریب اهمیت محاسبه می‌شود که نشان‌دهنده میزان وابستگی آن‌ها به گونه‌های هدف است. سپس تمام گونه‌هایی که ضریب اهمیت آنها از اندازه‌ای که توسط کاربر تعیین شده، کمتر باشد، به همراه واکنش‌های مربوط به آنها از مکانیزم حذف می‌شوند. لو و همکاران [۵،۴] مکانیزم احتراق ترکیب متیل داکونیت، متیل-۹-داکونیت و هپتال نرمال را به عنوان نماینده سوخت بیودیزل، با ترکیب روش گرافی و آنالیز حساسیت، کاهش دادند. توساتو و همکاران [۶] روش‌های مختلف گرافی را به تنهایی و نیز در ترکیب با روش‌های آنالیز حساسیت و شار گونه‌ها، برای کاهش مکانیزم احتراق سوخت JP-8 استفاده کردند و توانستند با استفاده از این روش‌ها به صورت زنجیره‌ای، اندازه مکانیزم را از ۲۳۴ گونه به ۹۲ گونه کاهش دهند. نتایج آن‌ها همچنین نشان داد که مدل‌های کاهش یافته تولید شده توسط روش گراف روابط جهت‌دار و روش گراف روابط جهت‌دار با انتشار خطاً^۴ از نظر گونه‌هایی که برای کاهش انتخاب کردند بسیار متفاوت می‌باشند. همچنین زندگی و همکاران [۸،۷] ضمن بررسی خواص احتراقی ترکیبات مختلف بنزین و بیودیزل، ابتدا با روش‌های گرافی، مکانیزم اسکلتی این مکانیزم‌ها را به دست آورده و سپس به کمک آنالیز حساسیت گونه‌ها، اقدام به کاهش بیشتر مکانیزم‌ها کردند.

در روش‌های آنالیز مقیاس زمانی، واکنش‌های سریع و آهسته، مشخص شده و از هم تفکیک می‌شوند. به این ترتیب، دستگاه معادلات دیفرانسل بسیار ساده‌تر خواهد شد. معروف‌ترین این روش‌ها عبارتند از: روش فرض حالت شبه‌پایا^۵، روش فرض تعادل جزئی^۶، اغتشاش تکین محاسباتی^۷ و روش ساخت منیفولد کم بعد ذاتی^۸.

1. Sensitivity Analysis
2. Directed Relation Graph (DRG)
3. Optimization Methods
4. Directed Relation Graph Error Propagation (DRGEP)
5. Quasi-Steady-State Assumption
6. Partial Equilibrium Assumption
7. Computational Singular Perturbation
8. Intrinsic Low-Dimensional Manifolds

روش‌های فرض حالت شبه‌پایا و تعادل جزئی، این امکان را فراهم می‌کند که روابطی برای نرخ واکنش ایجاد شود که با کمترین ثابت‌های نرخ واکنش، جزئیات شیمی واکنش را نیز در بر داشته باشد. یکی از ویژگی‌های سیستم‌های واکنش شیمیایی، مقیاس‌های زمانی بسیار متفاوتی است که در طول آن‌ها، واکنش‌ها اتفاق می‌افتند. مکانیزم‌های پیچیده، اغلب شامل واکنش‌هایی هستند که ثابت نرخ آنها با چندین مرتبه بزرگی، با یکدیگر اختلاف دارند. اغلب گونه‌های بسیار فعال میانی با غلظت کم، به عنوان گونه‌های شبه‌پایا در نظر گرفته می‌شوند، زیرا می‌توان نرخ تولید و مصرف این گونه‌ها را در دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی مربوط به مکانیزم شیمیایی، صفر در نظر گرفت. با این کار روابطی جبری بین غلظت گونه‌های شبه‌پایا و گونه‌های دیگر به دست می‌آید. سیستم معادلات دیفرانسیل معمولی و سیستم معادلات جبری گونه‌های شبه‌پایا، با هم یک دستگاه معادلات دیفرانسیل جبری تشکیل می‌دهند که جواب آن نزدیک به جواب دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی اولیه است. روابط مربوط به این روش توسط تورانی و همکاران بررسی شده است [۹].

در روش فرض تعادل جزئی، ساده‌سازی مکانیزم با توجه به واکنش‌های سریع و آهسته انجام می‌شود. در یک مکانیزم پیچیده، برخی واکنش‌ها بسیار سریع‌تر از واکنش‌های دیگر انجام می‌شوند، به نحوی که بعد از هر گونه فاصله گرفتن از شرایط تعادل، مجدداً به حالت تعادل بازمی‌گردند. واکنش‌های آهسته‌تر دیگر، نرخ تغییر غلظت واکنش‌دهنده‌ها و محصولات را کنترل می‌کنند. اگر حالتی را در نظر بگیریم که در آن، تمام واکنش‌ها به غیر از یکی، به تعادل رسیده باشند، این واکنش آهسته باقیمانده را واکنش محدودکننده نرخ می‌نامند. با استفاده از روش فرض تعادل جزئی، یک مکانیزم مفصل را می‌توان به دو زیرمجموعه سریع و آهسته تقسیم کرد و فرض تعادل را برای زیرمجموعه حاوی واکنش‌های سریع، به کار برد [۱۰].

مفهوم اغتشاش تکین محاسباتی، اولین بار توسط لام در سال ۱۹۸۵ معرفی شد و سپس با توسعه آن، برای ساده‌سازی مدل‌های سینتیکی از طریق تجزیه مکانیزم‌ها به واکنش‌های سریع و آهسته، مورد استفاده قرار گرفت [۱۱]. هدف این روش، استخراج مکانیزم‌های ساده‌تر شیمیایی از مکانیزم‌های پیچیده، به صورت محاسباتی و با استفاده از مقیاس‌های زمانی است. در این روش، از مقادیر ویژه ماتریس ژاکوبین برای تعیین مدهای موقت استفاده شده و سپس با اجرای فرایند اصلاح بعدی، تجزیه مدهای موقت سریع و آهسته به صورت بهینه‌تر انجام می‌شود [۱۲].

روش منیفولد کم‌بعد ذاتی، از نظر تعیین و تجزیه گونه‌های سریع و آهسته با استفاده از آنالیز ماتریس ژاکوبین، مشابه روش اغتشاش تکین محاسباتی است. روش منیفولد کم‌بعد ذاتی به دنبال منیفولد کم‌بعدی است که نشان‌دهنده یک مدل ساده‌تر شیمیایی در فضای حالت باشد و این کار را با تعیین مقیاس‌های زمانی سریعی که تحت آن‌ها، مسیرها به تعادل می‌رسند، انجام می‌دهد [۱۳]. با در نظر گرفتن ترکیب یک مکانیزم شیمیایی به صورت یک نقطه در فضای چندبعدی، به طوری که هر بعد نشان‌دهنده غلظت یک گونه باشد، معادلات نرخ، چگونگی حرکت این نقطه را در فضای اسکالر توصیف می‌کنند [۱۴]. روش منیفولد کم‌بعد ذاتی با تعیین منیفولدهای جاذب در فضای اسکالر، معادلات حرکت این نقطه را آنالیز کرده و ساده می‌کند.

در روش یکپارچه‌سازی^۱، با ترکیب واکنش‌ها و گونه‌های مشابه (مانند ایزومرها که خواص گرمایی و انتقالی مشابهی دارند)، تعداد متغیرها و معادلات سیستم، کاهش می‌یابد [۱۵]. ولی از این روش، اغلب به صورت ترکیب با روش‌های دیگر جهت کاهش بیشتر مکانیزم مربوط به هیدروکربن‌های سنگین استفاده می‌شود و به ندرت به تنهایی مورد استفاده قرار می‌گیرد. در روش‌های جدول‌سازی-بازیابی، نتایج شبیه‌سازی برای استفاده در آینده ذخیره می‌شوند. از جمله این روش‌ها می‌توان به جدول جستجو^۲ و جدول‌سازی در جای تطبیق‌پذیر^۳ اشاره کرد [۱۶، ۱۷].

1. Lumping Method
2. Lookup Table
3. In Situ Adaptive Tabulation

در سال‌های اخیر، استفاده از الگوریتم‌های بهینه‌سازی فراابتکاری^۱، مورد توجه زیادی قرار گرفته است. حضور یا عدم حضور یک واکنش ابتدایی در یک مکانیزم شیمیایی، کاهش مکانیزم مفصل را به یک مسئله بهینه‌سازی دودویی تبدیل می‌کند. به همین دلیل باید از الگوریتم‌های بهینه‌سازی گسسته یا نسخه‌های دودویی الگوریتم‌های پیوسته، برای این نوع مسئله‌ها استفاده کرد. در بین الگوریتم‌های بهینه‌سازی فراابتکاری، الگوریتم ژنتیک، به دلیل ماهیت گسسته بودن آن، بیشترین کاربرد را برای کاهش مکانیزم‌های احتراقی داشته است. این الگوریتم، توسط ادواردز و همکاران [۱۸] برای کاهش مکانیزم‌های کوچک با استفاده از دو رویکرد حذف واکنش‌های زائد و حذف گونه‌های زائد مورد استفاده قرار گرفت. الیوت و همکاران [۱۹-۲۱] برای کاهش مکانیزم احتراق متان، سوخت هواپیما و نفت سفید و حذف گونه‌های زائد، از الگوریتم ژنتیک استفاده کرده و سپس از نسخه متغیر حقیقی آن برای بهینه‌سازی ضرایب سرعت واکنش‌ها در مکانیزم کاهش‌یافته به دست آمده، استفاده کردند. همچنین الگوریتم ژنتیک توسط مائوریا و همکاران [۲۳،۲۲] برای کاهش مکانیزم‌های بیوشیمیایی و بهینه‌کردن ضرایب سرعت آن‌ها نیز به کار گرفته شده است. مونتگومری و همکاران [۲۴] نیز در پژوهش خود، برای انتخاب گونه‌های حالت شبه‌پایا در احتراق متان و کاهش اندازه دستگاه معادلات دیفرانسیل، از الگوریتم ژنتیک استفاده کردند. هرناندز و همکاران [۲۵] بر خلاف تحقیقات قبلی که عمدتاً بر حذف گونه‌ها تمرکز کردند، از این الگوریتم برای حذف واکنش‌ها و کاهش مکانیزم‌های کوچک و متوسط احتراق متان و سوخت دیزل در موتورهای احتراق داخلی، به‌عنوان پایه‌ای برای کاهش مکانیزم‌های بزرگ در ترکیب با روش‌های دیگر، استفاده کردند. سیکالو و همکاران [۲۶] گزینه‌های مختلفی را برای کاربرد الگوریتم ژنتیک در کاهش مکانیزم‌ها، با هم مقایسه کرده و به جستجوی یک وضعیت بهینه بین اندازه و دقت مکانیزم‌های به‌دست آمده، پرداختند. در نهایت، با بهینه‌سازی ضرایب واکنش‌های ابتدایی مکانیزم کاهش‌یافته، دقت آن را برای شبیه‌سازی راکتور فشار ثابت همگن و شعله پایدار، افزایش دادند.

برای استفاده از الگوریتم‌های فراابتکاری، ابتدا باید تا چند برابر تعداد واکنش‌های ابتدایی مکانیزم شیمیایی مفصل، یک جمعیت اولیه از رشته‌های دودویی تولید کرده و سپس با اعمال الگوریتم مورد نظر روی این جمعیت اولیه، جواب بهینه را به دست آورد. بنابراین به دلیل تعداد زیاد متغیرها و نیز جمعیت اولیه ایجاد شده، حجم محاسبات به شدت افزایش می‌یابد. همچنین در صورت استفاده از الگوریتم‌های فراابتکاری پیوسته، به دلیل دودویی بودن متغیرها، باید از نسخه‌های دودویی این الگوریتم‌ها استفاده شود. به همین دلیل، الگوریتم‌های بهینه‌سازی فضای پیوسته را نمی‌توان به‌طور مستقیم و بدون منطبق کردن آنها، در فضای دودویی به کار گرفت، زیرا ریاضیات مورد استفاده در آن‌ها برای فضای دودویی معتبر نیست. تطبیق الگوریتم‌های بهینه‌سازی فضای پیوسته بر فضای دودویی ممکن است منجر به تغییر رفتار و در نتیجه کاهش کارایی آنها شود. علاوه بر این، مشکلاتی مانند افزایش ابعاد و کاهش دقت را نیز در بر دارد.

در این مقاله، امکان استفاده از الگوریتم‌های فراابتکاری پیوسته ازدحام ذرات و تکامل تفاضلی، در فضای دودویی برای کاهش مکانیزم‌های شیمیایی مفصل، پیشنهاد شده و مورد بررسی قرار گرفته است. به این ترتیب ضمن حفظ قابلیت‌های الگوریتم پیوسته، ابعاد مسئله نیز بسیار کاهش یافته و حجم محاسبات، به شدت کاهش می‌یابد. به این صورت که از یک مکانیزم مدولاسیون زاویه‌ای برای تولید رشته‌های بیتی و از الگوریتم‌های ازدحام ذرات و تکامل تفاضلی برای بهینه‌سازی ضرایب تابع مولد رشته‌های بیتی استفاده می‌شود. علاوه بر این، برای بهبود پایداری الگوریتم و سرعت همگرایی، تابع مولد اصلاح شده مورد استفاده قرار می‌گیرد. در نهایت، این الگوریتم برای کاهش مکانیزم احتراق سوخت دی‌متیل‌اتر^۲ (DME) اجرا شده و نتایج حاصل از شبیه‌سازی با استفاده از مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته با یکدیگر مقایسه می‌شوند. مکانیزم مفصل مورد استفاده برای این سوخت شامل ۳۵۱ واکنش ابتدایی و ۷۹ گونه شیمیایی است که در سایت آزمایشگاه ملی لارنس لایمور موجود است [۲۷]. دی‌متیل‌اتر با فرمول شیمیایی CH_3OCH_3 ، به‌عنوان ساده‌ترین و سبک‌ترین سوخت اکسیژن‌دار

1. Metaheuristic Optimization Algorithms
2. Dimethyl Ether

که قابلیت استفاده در موتورهای اشتعال تراکمی را دارد، مطرح است. خواص فیزیکی DME مشابه LPG^۱ است، لذا مخازن ذخیره LPG و همچنین فناوری‌های به‌کار رفته در توزیع، انتقال و مصرف آن، برای DME نیز قابل استفاده است.

الگوریتم‌های بهینه‌سازی

۱- الگوریتم تکامل تفاضلی

الگوریتم تکامل تفاضلی^۲ (DE)، یک الگوریتم جستجوی تصادفی و مبتنی بر جمعیت است که توسط استرن و پرایس [۲۸] معرفی شد. در الگوریتم DE، بعد از ایجاد یک جمعیت اولیه، با اجرای فرایند جستجو، فاصله بین افراد جمعیت، کمتر شده و همگی به جواب یکسانی همگرا می‌شوند. عملگر جهش برای هر یک از افراد جمعیت فعلی، یک بردار موقتی تولید می‌کند و این کار را با جهش یک بردار هدف توسط یک بردار وزن‌دار انجام می‌دهد. سپس با اعمال عملگر تقاطع روی این بردار موقتی، فرزند برای جمعیت بعدی تولید می‌شود. برای هر یک از والدین، $x_i(t)$ ، بردار موقتی $u_i(t)$ ، به این صورت ایجاد می‌شود: ابتدا یک بردار هدف، $x_{i_1}(t)$ از جمعیت انتخاب می‌شود، به نحوی که $i \neq i_1$. سپس به صورت تصادفی و با توزیع یکنواخت، دو بردار x_{i_2} و x_{i_3} انتخاب می‌شوند، به نحوی که $i \neq i_1 \neq i_2 \neq i_3$. با استفاده از این بردارها، بردار موقتی مطابق فرمول زیر و با تغییر بردار هدف، به دست می‌آید:

$$u_i(t) = x_{i_1}(t) + \beta(x_{i_2}(t) - x_{i_3}(t)) \quad (1)$$

که در آن $\beta \in (0, \infty)$ ، یک ضریب مقیاس است که اندازه تغییر تفاضلی را تعیین کند. طبق نتایج تجربی، مقدار 0.5 برای این پارامتر، اغلب منجر به پاسخ‌های خوبی خواهد شد [۲۹]. ولی در این مقاله، به منظور افزایش تنوع پاسخ‌ها، این پارامتر به صورت تصادفی در بازه $[0.2 - 0.8]$ انتخاب شده است. البته ابتدا و انتهای این بازه به نحوی انتخاب شده است که علاوه بر مثبت و کوچک‌تر از ۱ بودن، میانگین آن نیز برابر با همان مقدار 0.5 شود. عملگر تقاطع الگوریتم DE، بردار موقتی $u_i(t)$ و بردار والد $x_i(t)$ را به صورت گسسته، ترکیب کرده و فرزند $x'_i(t)$ را تولید می‌کند. تقاطع به صورت زیر انجام می‌شود:

$$x'_{ij}(t) = \begin{cases} u_{ij}(t) & \text{if } j \in J \\ x_{ij}(t) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

که در آن $x_{ij}(t)$ ، نشان‌دهنده مولفه j ام بردار $x_i(t)$ و J نیز، مجموعه اندیس مولفه‌هایی است که تغییر می‌کنند (یا به عبارت دیگر، مجموعه نقاط تقاطع است). روش‌های مختلفی برای تعیین مجموعه J وجود دارد که در این مقاله، از روش تقاطع دوجمله‌ای استفاده شده است. در این روش، نقاط تقاطع به صورت تصادفی از مجموعه نقاط تقاطع ممکن، یعنی $\{1, 2, \dots, n_x\}$ ، انتخاب می‌شوند. n_x ، ابعاد مسئله یا تعداد متغیرها است. p_r ، احتمال این است که فرایند تقاطع، شامل نقطه تقاطع مورد نظر، باشد. هرچه مقدار p_r بزرگ‌تر باشد، نقاط تقاطع بیشتری انتخاب می‌شوند، یعنی مولفه‌های بیشتری از بردار موقتی و مولفه‌های کمتری از بردار والد، برای تولید فرزند، استفاده می‌شوند. مقدار بهینه این پارامتر، به نوع مسئله و ابعاد آن وابسته است و به طور صریح، مقدار مشخصی برای آن تعیین نشده است. ولی معمولاً بین 0.1 تا 0.3 در نظر گرفته می‌شود. در این مقاله، پاسخ‌های به دست آمده برای مقدار 0.2 ، دقت خوبی را نشان می‌دهند. برای اطمینان از اینکه حداقل یک مولفه از بردار فرزند، با والد خود، تفاوت داشته باشد، مجموعه نقاط تقاطع، J ، به نحوی تشکیل می‌شود که شامل یک نقطه انتخاب شده

1. Lequefied Petroleum Gas
2. Differential Evolution

تصادفی j^* ، باشد. برای تعیین اینکه چه افرادی از جمعیت، برای اعمال عملگر جهش و تولید بردار موقتی، مورد استفاده قرار گیرند و تعیین اینکه کدام والد یا فرزند، در نسل بعدی، باقی بماند، از عملگر انتخاب استفاده می‌شود. با توجه به عملگر جهش، فرایند انتخاب را می‌توان به روش‌های مختلفی اجرا کرد. در این مقاله برای انتخاب افراد جهت محاسبه بردارهای تفاضلی، از انتخاب تصادفی استفاده شده است.

۲- الگوریتم ازدحام ذرات

الگوریتم ازدحام ذرات (PSO)، یک الگوریتم جستجوی تصادفی مبتنی بر جمعیت است که از رفتار دسته‌جمعی پرندگان الهام گرفته شده و اولین بار توسط کندی و ابرهارت [۳۰] در سال ۱۹۹۵ معرفی شد. این الگوریتم، مجموعه‌ای از جواب‌های احتمالی یک مسئله بهینه‌سازی را در نظر می‌گیرد. هر یک از این جواب‌ها، یک ذره نامیده می‌شود. هر ذره، مقدار تابع هدف را در موقعیتی از فضا که در آن قرار گرفته است، محاسبه می‌کند. سپس با استفاده از ترکیب اطلاعات بهترین موقعیتی که تاکنون در آن بوده (این موقعیت، به عنوان بهترین تجربه شخصی یا pbest نیز شناخته می‌شود) و بهترین موقعیتی که تاکنون توسط جمعیت ذرات بدست آمده است (که به عنوان بهترین تجربه جمعی یا gbest نیز شناخته می‌شود)، جهتی را برای حرکت انتخاب می‌کند. به همین ترتیب، همه ذرات جهتی را برای ادامه حرکت انتخاب می‌کنند و پس از انجام حرکت، یک مرحله از الگوریتم به پایان می‌رسد. این مراحل چندین بار تکرار می‌شوند تا جواب مسئله به دست آید. روابط (۳) و (۴) که به ترتیب روابط به‌روزرسانی سرعت و به‌روزرسانی موقعیت هستند، برای انتخاب جهت و انجام حرکت، استفاده می‌شوند:

$$v^{k+1} = wv^k + c_1r_1(pb^k - x^k) + c_2r_2(gb^k - x^k) \quad (3)$$

$$x^{k+1} = x^k + v^{k+1} \quad (4)$$

که در آن v ، سرعت ذره؛ x ، موقعیت ذره؛ pb ، بهترین تجربه شخصی ذره یا pbest؛ gb ، بهترین تجربه جمعی ذرات یا gbest و k ، تعداد تکرار است. همچنین سرعت و موقعیت ذره، توسط پارامترهایی کنترل می‌شوند که عبارتند از r_1 و r_2 اعدادی تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه $[0, 1]$ ؛ c_1 و c_2 ، ضرایب شتاب ($c_1 + c_2 \leq 4$) و w ، ضریب اینرسی ($w < 1$). ضرایب c_1 و c_2 به همراه مقادیر تصادفی r_1 و r_2 اثرات فردی و جمعی را بر فرایند جستجوی تصادفی تعیین می‌کنند و ضریب اینرسی نیز موازنه‌ای بین جستجوی محلی و سراسری برقرار می‌کند. در مقاله حاضر، با اجرای کد عددی در حالت‌های مختلف در محدوده‌ی متداول مقادیر پیشنهادی ضرایب، در نهایت برای ضرایب شتاب، مقدار ۲ و برای ضریب اینرسی، مقدار ۱ منجر به تولید بهترین پاسخ‌ها شد.

۳- الگوریتم‌های بهینه‌سازی مدوله‌شده زاویه‌ای

پامپارا و همکاران [۳۱] روشی برای به کارگیری الگوریتم‌های بهینه‌سازی فضای پیوسته در حل مسائل دودویی، بدون تغییر عملکرد آنها، معرفی کردند. در این روش از مدولاسیون زاویه‌ای (AM) برای انجام نگاشت بین فضای دودویی و پیوسته استفاده می‌شود. هدف این روش، تکامل یک تابع مولد رشته بیتی در فضای پیوسته است که از آن برای تولید بردارهای بیتی جواب در فضای اصلی استفاده می‌شود. تابع مولد مورد استفاده به صورت زیر است:

$$g(x) = \sin(2\pi(x - a) \times b \times \cos(2\pi(x - a) \times c)) + d \quad (5)$$

1. Particle Swarm Optimization (PSO)
2. Angular Modulation (AM)

که در آن، چهار ضریب a ، b ، c و d ، شکل تابع را کنترل می‌کنند: a ، نشان‌دهنده جابجایی افقی تابع مولد؛ b ، فرکانس بیشینه تابع سینوسی؛ c ، فرکانس تابع کسینوسی و d ، جابجایی عمودی تابع مولد است. الگوریتم‌های بهینه‌سازی مقادیر تکاملی این چهار ضریب را تعیین می‌کنند. به این ترتیب، حل یک مسئله دودویی، به حل یک مسئله چهار بعدی در فضای پیوسته تبدیل می‌شود. در مرحله مقداردهی اولیه، ذرات جمعیت، با توزیع یکنواخت از دامنه $[-1, 1]^4$ ، مقداردهی اولیه می‌شوند. بعد از هر تکرار الگوریتم، برازندگی هر فرد از جمعیت، با جایگزینی مقادیر دودویی معادل آنها که از رابطه (۶) به دست می‌آید، تعیین می‌شود. برای ایجاد رشته‌های بیتی، ابتدا مقدار تابع در فواصل منظم $x = (1, 2, \dots, n_b)$ ، محاسبه می‌شود که در آن، n_b طول موردنظر رشته بیتی است. سپس مقدار محاسبه شده $g(x)$ در هر x ، به صورت زیر به یک بیت دودویی نگاشته می‌شود:

$$\begin{cases} \text{if } g(x) > 0 & \rightarrow 1 \\ \text{if } g(x) \leq 0 & \rightarrow 0 \end{cases} \quad (6)$$

اگر خروجی تابع در رابطه (۶) مثبت باشد، مقدار بیت برابر با ۱ و در غیر این صورت، برابر با صفر در نظر گرفته می‌شود. رشته بیتی به دست آمده، با تابع برازندگی تعریف شده، ارزیابی می‌شود تا کیفیت جواب، مشخص شود. دونگ و همکاران [۳۲] و وانگ و همکاران [۳۳] نشان دادند که الگوریتم‌های AMPPO^۱ و AMDE^۲ و بسیار کارآمد بوده و به جواب‌هایی با دقت قابل قبول برای مسائل دودویی با ابعاد کم، می‌رسند. همچنین این الگوریتم‌ها، این مزیت را دارند که یک مسئله n_x بعدی دودویی را به یک مسئله چهار بعدی کوچک‌تر، تبدیل می‌کنند.

اولین محدودیت این روش، مربوط به تابع مولد است که در آن، دامنه متغیر موج سینوسی حذف شده است. تابع مولد، ترکیبی از موج‌های سینوسی و کسینوسی است. در حالی که دامنه موج کسینوسی، با ضریب b ، کنترل می‌شود، ولی هیچ ضربی برای تغییر دامنه موج سینوسی وجود ندارد. در نتیجه، بدون یک جابجایی عمودی به اندازه کافی بزرگ (حداقل $d > 1$ یا $d < -1$)، همیشه در تعدادی از نواحی، تابع مولد، بیت یک و در تعدادی دیگر، بیت صفر تولید می‌کند. این محدودیت، به همراه کوچک بودن بازه مقداردهی اولیه یعنی $[-1, 1]^4$ ، مشکلاتی را در یافتن جواب‌های دودویی، که شامل تعداد زیادی صفر و یک است، ایجاد می‌کند. بنابراین، استفاده از پارامتر تغییر دامنه می‌تواند منجر به یافتن سریع‌تر جواب بهینه شود. دومین محدودیت، نمونه‌برداری از یک دامنه از پیش تعریف شده در فواصل منظم است. اثر این محدودیت این است که اگر در برخی ناحیه‌ها، رشته بیتی صحیح توسط تابع مولد، ایجاد شود، الگوریتم باید برای آوردن جواب به دامنه نمونه‌برداری، به ضریب جابجایی افقی a ، متکی باشد. علاوه بر این، باید اطمینان حاصل شود که فرکانس تابع مولد، به طور صحیح توسط ضرایب فرکانسی b و c ، با فاصله بین نمونه‌ها، مطابقت دارد. بنابراین ضرایب a ، b و c وابسته به هم هستند. در صورتی که الگوریتم بتواند مستقل از ضرایب تابع مولد، دامنه نمونه‌برداری و نیز فاصله نمونه‌برداری را کنترل کند، در افزایش سرعت همگرایی، تأثیر زیادی خواهد داشت. برای رفع این محدودیت‌ها، بارند و همکاران [۳۴] نسخه اصلاح شده‌ای پیشنهاد کردند که در آن از دو بعد اضافی، برای بردارهای موقعیت استفاده می‌شود. این ابعاد اضافی، بازه نمونه‌برداری تابع مولد را کنترل می‌کنند. بنابراین، موقعیت ذره λ_m ، یک بردار ۶ بعدی است:

$$\vec{x}_i = (a, b, c, d, \alpha_1, \alpha_2) \quad (7)$$

که در آن α_1 و α_2 ، حدود دامنه نمونه‌برداری هستند. با تعریف $\alpha_l = \min\{\alpha_1, \alpha_2\}$ و $\alpha_u = \max\{\alpha_1, \alpha_2\}$ نمونه‌برداری در فواصل δ از بازه $[\alpha_l, \alpha_u]$ انجام می‌شود:

$$\delta = \frac{\alpha_u - \alpha_l}{n_b} \quad (8)$$

1. Angular Modulated Particle Swarm Optimization
2. Angular Modulated Differential Evolution

این کار باعث اطمینان از فاصله‌های نمونه‌برداری منظم در محدوده مشخص شده، خواهد شد. در این نسخه، از همان تابع مولد AM اصلی استفاده می‌شود. مزیت این نسخه نسبت به نسخه اولیه، این است که به ازای مقادیر معلوم b ، a ، c و d ، جواب‌های متنوع‌تری تولید می‌شوند، زیرا α_1 و α_2 ، می‌توانند به‌طور موثری بر بخش‌های مختلف تابع مولد، تمرکز کنند.

تابع هدف

در فرایند کاهش مکانیزم و بهینه‌سازی آن، تعریف تابع هدف معمولاً بر اساس تفاوت بین نتایج شبیه‌سازی به‌دست آمده با استفاده از مکانیزم مفصل و کاهش‌یافته، انجام می‌شود. دستیابی به یک مکانیزم کاهش‌یافته تا حد امکان کوچک، به همراه حفظ ویژگی‌های شیمیایی کلی، نیازمند جستجوی حداقل انحراف خواص شیمیایی بین مکانیزم کاهش‌یافته و مکانیزم مفصل است. به بیان دیگر، این اختلاف قابل قبول باید مشخص شده و در تابع هدف وارد شود. الیوت و همکاران [۲۰] از پروفایل غلظت گونه‌ها به صورت زیر در تابع هدف استفاده کردند:

$$f_{\text{PREMIX}} = \left\{ \varepsilon + \sum_{j=1}^{N_{\text{conditions}}} \left(\sum_{k=1}^{n_s^{\text{reduced}}} W_k \frac{\|Y_{jk}^{\text{calc}} - Y_{jk}^{\text{orig}}\|_{L^2}}{\|Y_{jk}^{\text{orig}}\|_{L^2}} \right) \right\}^{-1} \quad (9)$$

که در آن $N_{\text{conditions}}$ ، تعداد شرط‌های مرزی؛ Y_{jk}^{orig} و Y_{jk}^{calc} ، غلظت مولی گونه k ام در j امین شرط مرزی مربوط به مکانیزم کاهش‌یافته و مفصل؛ W_k ، ضریب وزنی (در محدوده بین ۰ و ۱) برای هر گونه که نشان‌دهنده اهمیت آن است، است. همچنین مقدار ε ، برای جلوگیری از سرریز عددی استفاده شده است. هرناندز و همکاران [۲۵]، در تابع هدفی که معرفی کردند از اختلاف زمان تأخیر در اشتعال (τ) و دمای احتراق (T^{comb}) حاصل از مکانیزم کاهش‌یافته و مفصل استفاده کردند. سیکالو و همکاران [۲۶] از زمان تأخیر در اشتعال و دمای حالت پایا در تابع هدف استفاده کردند. علاوه بر معیار دقت، هزینه محاسباتی را نیز در تابع هدف وارد کردند تا علاوه بر کاهش سفتی مکانیزم کاهش‌یافته، زمان اجرای الگوریتم بهینه‌سازی نیز کاهش یابد. آن‌ها در ابتدا از عبارات خطی ساده برای تشکیل تابع هدف استفاده کردند. اگرچه این عبارات، ساده هستند، ولی رضایت‌بخش نبودند و به همین خاطر باید با عبارت پیچیده‌تری جایگزین می‌شدند. به این ترتیب، آن‌ها برای عبارت خطای زمان تأخیر در اشتعال و نیز دمای حالت پایا، یک تابع لگاریتمی به همراه یک ضریب تندی (σ) انتخاب کردند. مزیت این تابع لگاریتمی، همگرایی سریع‌تر به سمت نقطه بهینه است. ضریب تندی نیز برای تنظیم شیب تابع و در نتیجه، هدایت جواب به سمت نقطه مرجع با فشار بیشتر یا کمتر تکامل، استفاده می‌شود. تغییر ضریب تندی، معمولاً وزن بیشتری به دقت می‌دهد و به همین خاطر، مکانیزم‌هایی با زمان تأخیر در اشتعال و دمای حالت پایای دقیق‌تر به‌دست می‌آیند. در این مقاله، در تابع هدف از معیارهای دمای حالت پایا، زمان تأخیر در اشتعال و غلظت گونه‌های CH_3OCH_3 ، H_2O ، O_2 ، CO_2 ، CO و OH استفاده شده است. انتخاب گونه‌های CH_3OCH_3 ، H_2O و CO_2 ، با توجه به اصلی بودن این گونه‌ها در احتراق رقیق، استوکیومتریکی و غنی انجام شده است. همچنین گونه CO در محصولات احتراق رقیق و گونه O_2 در محصولات احتراق غنی، یک گونه فرعی به‌شمار می‌روند. با این حال، گونه‌های CO و O_2 به ترتیب در نواحی غنی و رقیق، به گونه‌های اصلی تبدیل می‌شوند. گونه OH نیز یکی از گونه‌های میانی مهم در احتراق هیدروکربن‌ها است. در نهایت، تابع هدف به‌صورت زیر تشکیل شده است:

$$f_{\text{obj}} = \left(\varepsilon + \sum_{k=1}^{n_s^{\text{reduced}}} W_k \frac{\|Y_{jk}^{\text{calc}} - Y_{jk}^{\text{orig}}\|_{L^2}}{\|Y_{jk}^{\text{orig}}\|_{L^2}} \right)^{-1} + \ln \left(1 + \sigma \left| \frac{T_s(r) - T_s(0)}{T_s(0) - T_{\text{init}}} \right| \right) + \ln \left(1 + \sigma \left| \frac{\tau_i(r) - \tau_i(0)}{\tau_i(0)} \right| \right) \quad (10)$$

که در آن $T_s(0)$ و $T_s(r)$ به ترتیب دمای حالت پایا مربوط به مکانیزم کاهش‌یافته و مفصل؛ T_{init} دمای اولیه و $\tau_i(r)$ و $\tau_i(0)$ نیز به ترتیب زمان تأخیر در اشتعال مربوط به مکانیزم کاهش‌یافته و مفصل است. W_k نشان دهنده ضریب وزنی (در محدوده بین ۰ و ۱) است که بسته به اهمیت گونه می‌تواند برای هر گونه اعمال شود. مواردی ممکن است رخ دهد که یک مکانیزم کاهش‌یافته، حاوی گونه‌های موردنظر کاربر نیست و یا غلظت آن‌ها به خوبی پیش‌بینی نشده است. برای چنین مواردی، عملکرد تابع هدف را می‌توان به راحتی، با کنترل مقدار ضرایب وزنی گونه‌ها، تغییر داد تا اطمینان حاصل شود که گونه‌های خاصی همیشه در مکانیزم کاهش‌یافته حضور دارند. در این تحقیق، برای گونه‌هایی که حداکثر غلظت آن‌ها بیشتر از 10^{-7} باشد، مقدار ضریب وزنی برابر با ۱ و برای سایر گونه‌ها برابر با صفر تنظیم شده است. همچنین مقدار ϵ برابر با 10^{-8} و ضریب تندی (σ) نیز برابر با ۱ در نظر گرفته شده است.

نتایج عددی

هدف این مقاله، به‌دست آوردن کوچکترین مکانیزم کاهش‌یافته‌ای است که بتواند با تقریب خوبی، نتایج حاصل از مکانیزم مفصل را پیش‌بینی کند. به این منظور، از راکتورهای فشار ثابت و شعله آرام پیش‌آمیخته استفاده شده است. مراحل انجام کاهش مکانیزم به این صورت است که ابتدا شرایط عملکردی هر یک از راکتورها تنظیم شده و سپس شبیه‌سازی با استفاده از مکانیزم مفصل انجام می‌شود. در مرحله بعد، با فراخوانی کد عددی نوشته شده، از نگاهت مدولاسیون زاویه‌ای برای به‌کارگیری الگوریتم‌های DE و PSO در فضای دودویی استفاده می‌شود. جدول (۱)، مقدار پارامترهای مورد استفاده در این الگوریتم‌ها را نشان می‌دهد. اکنون می‌توان با مقایسه رشته‌های دودویی تولید شده و مکانیزم مفصل، مکانیزم‌های کاهش یافته را به دست آورده و مقدار تابع هدف را ارزیابی کرد. هنگام مقایسه رشته‌های دودویی تولید شده و مکانیزم مفصل، بیت با مقدار یک، به معنی حضور واکنش ابتدایی معادل آن در مکانیزم کاهش‌یافته و بیت با مقدار صفر، به معنی عدم حضور آن است.

جدول ۱- پارامترهای مربوط به الگوریتم‌های DE و PSO

Table 1- Parameters of DE and PSO algorithms

Differential Evolution Algorithm				Particle Swarm Optimization Algorithm			
Scale factor (β)	crossover	Probability of crossover (Pr)	Population size	Inertia weight	Acceleration constant (c_1)	Acceleration constant (c_2)	Population size
0.2-0.8	binomial	0.2	20	1.0	2.0	2.0	20

با اجرای کد عددی نوشته شده در محیط کانتر^۱ در هریک از شرایط عملکردی برای راکتورهای فشار ثابت و شعله آرام پیش‌آمیخته، از مکانیزم مفصل دی‌متیل‌تر شامل ۳۵۱ واکنش ابتدایی و ۷۹ گونه شیمیایی، یک مکانیزم کاهش یافته مجزا به دست آمد که نتایج آن در جدول (۲) آمده است. هنگام انتخاب مکانیزم کاهش‌یافته نهایی، شاید به نظر برسد که مکانیزم‌های بزرگ‌تر، همواره شرایط کارکردی گسترده‌تری را پوشش می‌دهند، اما این موضوع لزوماً برای همه مکانیزم‌های بزرگ‌تر، صحیح نیست، زیرا گونه‌ها و واکنش‌های ابتدایی هر مکانیزم، در حالت کلی متفاوتند و ممکن است گونه‌ها و واکنش‌های ابتدایی مهمی در مکانیزم‌های کوچک‌تر وجود داشته باشند، ولی در مکانیزم‌های بزرگ‌تر، حذف شده باشند. به همین دلیل، با استفاده از مکانیزم‌های کاهش‌یافته به دست آمده، شبیه‌سازی راکتورها در تمام شرایط کارکردی مورد نظر، مجدداً انجام شد. پس از انجام این شبیه‌سازی‌ها مشخص شد که عملکرد تمامی مکانیزم‌ها بسیار نزدیک به یکدیگر بوده و می‌توان از تفاوت ناچیز آنها با یکدیگر، صرف‌نظر کرد. بنابراین مکانیزم کاهش‌یافته با ۱۷ گونه و ۴۳ واکنش ابتدایی، به‌عنوان مکانیزم کاهش‌یافته نهایی انتخاب شد.

1. Cantera

جدول ۲- مکانیزم‌های کاهش یافته حاصل از الگوریتم‌های AMDE و AMPSO

Table 2- Reduced mechanisms by MADE and AMPSO

Reactor	Performance Conditions		Size of Reduced Mechanism by MADE	Reactor	Performance Conditions		Size of Reduced Mechanism by AMPSO
	Phi	P	Reactions : Species :		Phi	P	Reactions : Species :
Constant Pressure Reactor	Phi = 0.5	P = 1 atm	Reactions : 74 Species : 31	Constant Pressure Reactor	Phi = 0.5	P = 1 atm	Reactions : 77 Species : 34
		P = 5 atm	Reactions : 63 Species : 24			P = 5 atm	Reactions : 67 Species : 23
		P = 50 atm	Reactions : 66 Species : 21			P = 50 atm	Reactions : 58 Species : 20
	Phi = 1.0	P = 1 atm	Reactions : 43 Species : 17		Phi = 1.0	P = 1 atm	Reactions : 45 Species : 18
		P = 5 atm	Reactions : 59 Species : 22			P = 5 atm	Reactions : 55 Species : 17
		P = 50 atm	Reactions : 49 Species : 21			P = 50 atm	Reactions : 49 Species : 20
	Phi = 1.5	P = 1 atm	Reactions : 70 Species : 19		Phi = 1.5	P = 1 atm	Reactions : 68 Species : 19
		P = 5 atm	Reactions : 53 Species : 17			P = 5 atm	Reactions : 50 Species : 19
		P = 50 atm	Reactions : 61 Species : 23			P = 50 atm	Reactions : 62 Species : 21
Flame	Phi = 0.5	P = 1 atm T = 300 K	Reactions : 47 Species : 16	Flame	Phi = 0.5	P = 1 atm T = 300 K	Reactions : 45 Species : 17
	Phi = 1.0	P = 1 atm T = 300 K	Reactions : 44 Species : 16		Phi = 1.0	P = 1 atm T = 300 K	Reactions : 44 Species : 19
	Phi = 1.5	P = 1 atm T = 300 K	Reactions : 45 Species : 19		Phi = 1.5	P = 1 atm T = 300 K	Reactions : 49 Species : 18

ابتدا به منظور اعتبارسنجی مکانیزم کاهش یافته، از اثر ضریب دمای منفی^۱ (NTC)، در راکتور فشار ثابت استفاده شده است. این اثر، یکی از ویژگی‌های مهم اکسیداسیون دما پایین برای سوخت‌های هیدروکربنی است که ارتباط ویژه‌ای با خوداشتعالی دارد و راکتور فشار ثابت نیز به خوبی ناحیه NTC را نشان می‌دهد. شکل (۱)، زمان تأخیر در اشتعال را برای خوداشتعالی در یک راکتور فشار ثابت، برحسب دمای اولیه و در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف، در ناحیه اثر NTC نشان می‌دهد. در این اعتبارسنجی، شرایط عملکردی گسترده‌ای شامل فشارهای ۱ تا ۵۰ اتمسفر، دماهای اولیه ۶۰۰ تا ۱۸۰۰ کلوین و نسبت‌های هم‌ارزی ۰/۵ تا ۱/۵ در نظر گرفته شده است. همان‌طور که در شکل (۱) مشاهده می‌شود در مجموع، نتایج حاصل از دو مکانیزم کاهش یافته به خوبی با مکانیزم مفصل مطابقت دارند.

1. Negative Temperature Coefficient

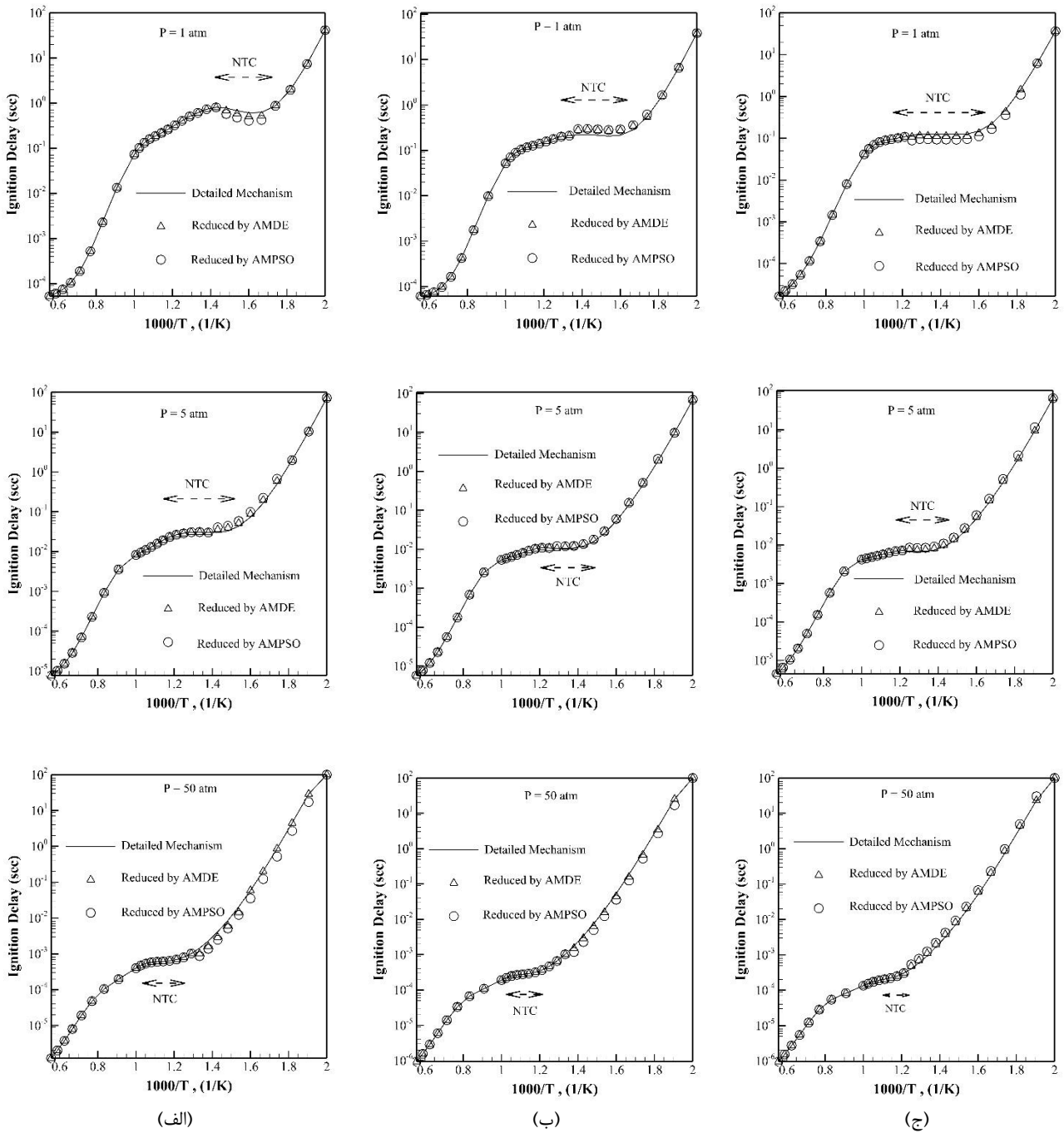


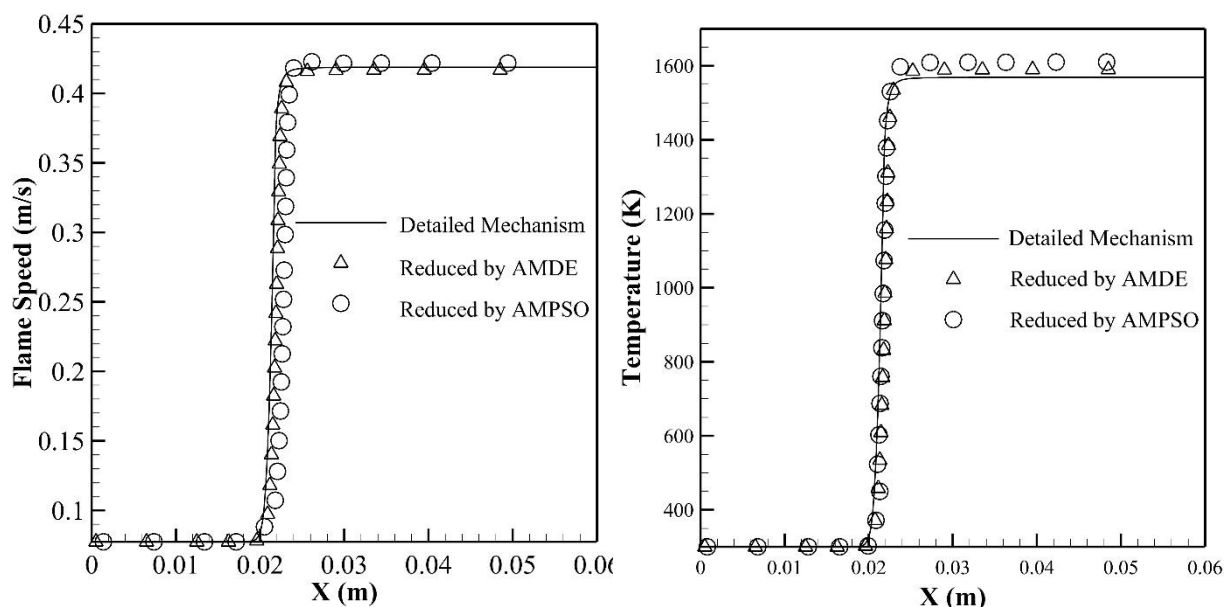
Figure 1- Comparison of ignition delays calculated by detailed and reduced mechanisms in a constant pressure reactor, (a) equivalence ratio = 0.5, (b) equivalence ratio = 1, (c) equivalence ratio = 1.5

شکل ۱- مقایسه زمان تاخیر در اشتعال حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته در یک راکتور فشار ثابت، (الف) نسبت هم‌ارزی ۰/۵؛

(ب) نسبت هم‌ارزی ۱؛ (ج) نسبت هم‌ارزی ۱/۵

علی‌رغم کوچک بودن مقدار خطا، نتایج نشان می‌دهد که مقدار خطا برای مخلوط‌های رقیق و در ناحیه NTC بیشتر است. با افزایش فشار در مخلوط رقیق، مقدار خطا کاهش یافته به طوری که در فشار ۵۰ اتمسفر به ۰/۶۹ درصد می‌رسد. همچنین بیشتر خطای ناشی از کاهش مکانیزم، در ناحیه NTC اتفاق می‌افتد. حداکثر مقدار خطا در این ناحیه در نسبت‌های هم‌ارزی ۰/۵، ۱ و ۱/۵ به ترتیب ۰/۹۵، ۰/۸۷ و ۰/۸۱ است. با توجه به شکل (۱)، مشاهده می‌شود که در این نسبت‌های هم‌ارزی با افزایش فشار، مقدار خطا کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش دماهای اولیه نیز میزان خطا کمتر می‌شود که نشان می‌دهد کاهش مکانیزم بر شیمی اشتعال سوخت در دمای پایین، تاثیر زیادتری دارد. برای بررسی بیشتر عملکرد مکانیزم کاهش‌یافته، سرعت، دما و غلظت گونه‌های مختلف در شعله آرام پیش آمیخته یک بعدی تحت فشار ۱ اتمسفر و دمای ورودی ۳۰۰ کلوین در نسبت‌های هم‌ارزی مختلف، برای مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده است. این نوع شعله‌ها اغلب برای بررسی احتراق ترکیبات مختلف سوخت و اکسیدکننده و تعیین حدود اشتعال‌پذیری مخلوط، سینتیک احتراق در مشعل‌ها و نیز انتشار شعله در موتورهای اشتعال جرقه‌ای استفاده می‌شوند. شکل‌های (۲) تا (۷) روند تغییرات سرعت، دما و غلظت برخی گونه‌ها را در سراسر شعله نشان می‌دهد.

همان‌طور که در شکل‌های (۲) تا (۷) مشاهده می‌شود، پیش‌بینی سرعت توسط مکانیزم مفصل و کاهش‌یافته از تطابق خوبی با یکدیگر برخوردارند. همچنین مکانیزم کاهش‌یافته، روند تغییرات دما و غلظت گونه‌ها را در سراسر شعله با دقت خوبی نسبت به مکانیزم مفصل پیش‌بینی می‌کند. به‌طور خلاصه می‌توان گفت که با مصرف سوخت، گونه میانی CO تشکیل شده و سپس با اکسید شدن به CO₂ تبدیل می‌شود. موقعیت بیشترین غلظت CO، در نزدیکی مکانی است که غلظت سوخت به سمت صفر میل می‌کند. همچنین درحالی که غلظت CO₂ در ابتدا نسبت به غلظت CO تاخیر دارد، اما با اکسید شدن CO به افزایش خود ادامه می‌دهد. همچنین همان‌طور که انتظار می‌رود، به دلیل سرعت بیشتر واکنش تشکیل H₂O نسبت به CO₂، افزایش غلظت گونه H₂O بسیار سریع‌تر اتفاق می‌افتد.



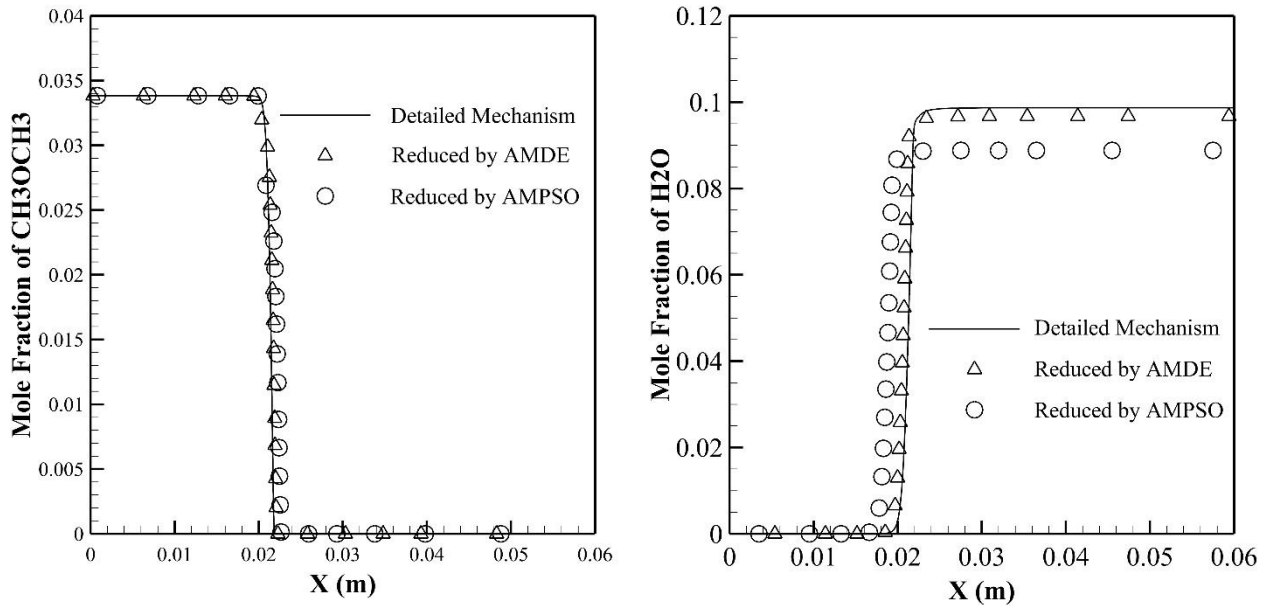
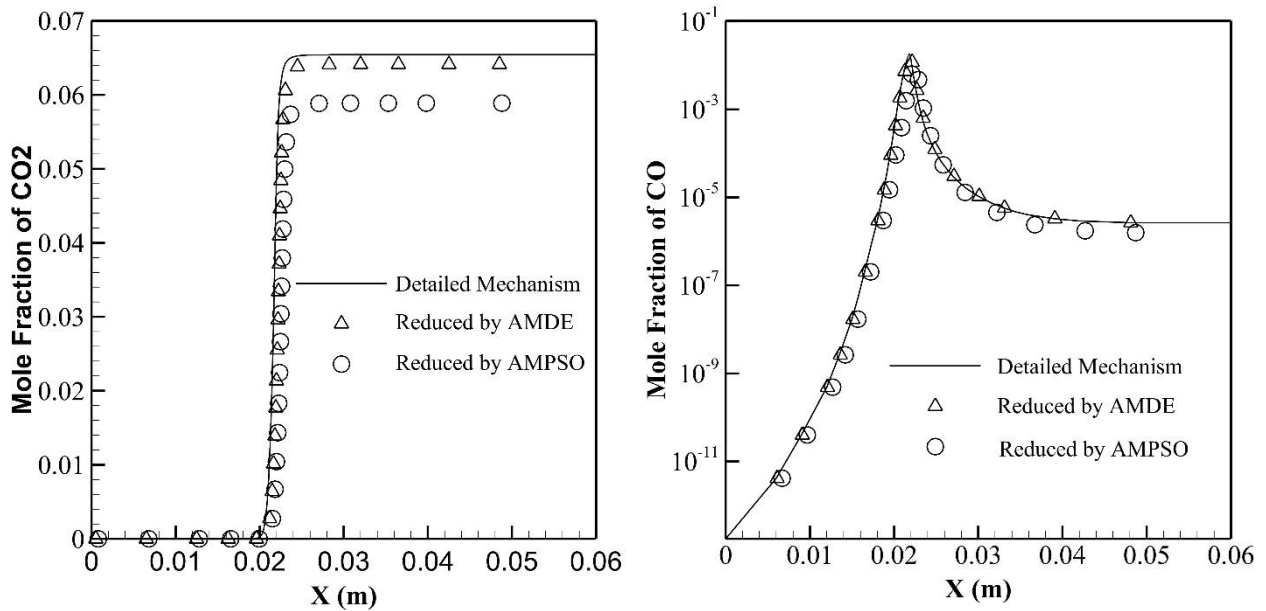


Figure 2- Comparison of flame speed, temperature and molar fractions calculated by detailed and reduced mechanisms in a one-dimensional laminar flame ($P = 1 \text{ atm}$, $T_{in} = 300 \text{ K}$ and equivalence ratio = 0.5)

شکل ۲- مقایسه سرعت، دما و کسرهای مولی حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش یافته در شعله آرام یک بعدی (فشار ۱ اتمسفر، دمای ورودی ۳۰۰ کلوین و نسبت هم‌ارزی ۰/۵)



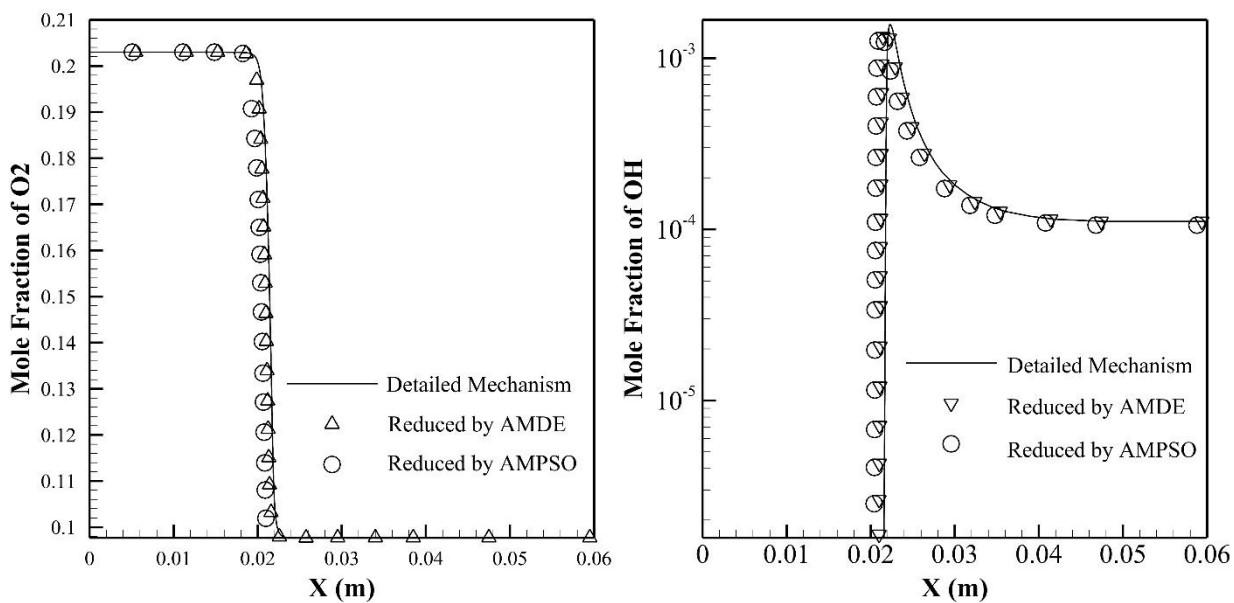
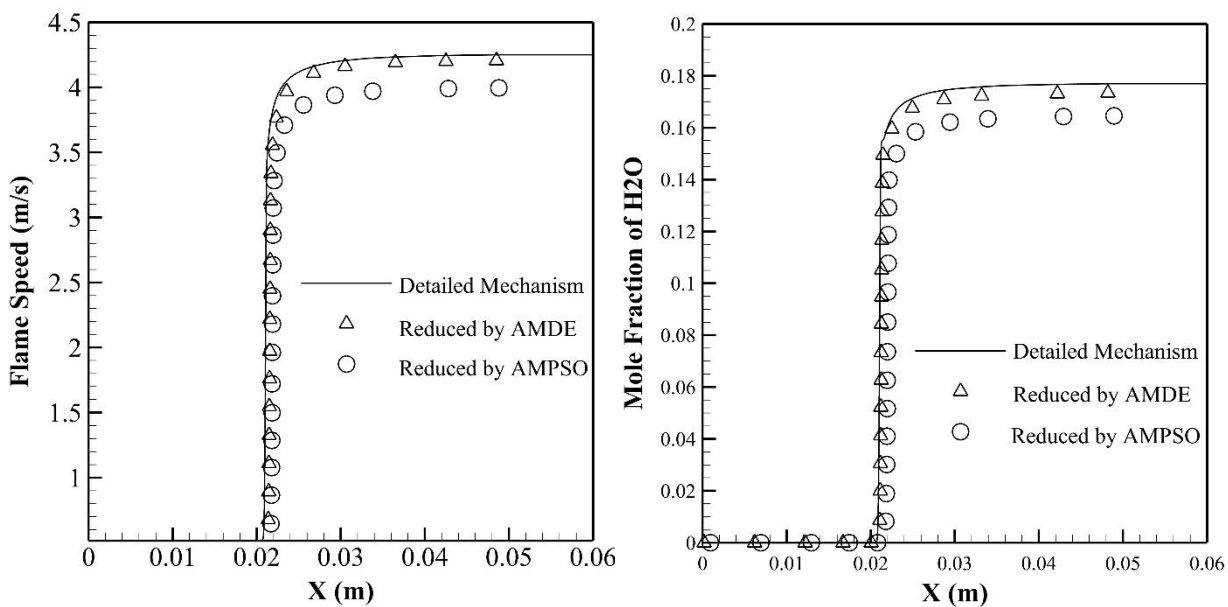


Figure 3- Comparison of molar fractions calculated by detailed and reduced mechanisms in a one-dimensional laminar flame ($P = 1 \text{ atm}$, $T_{in} = 300 \text{ K}$ and equivalence ratio = 0.5)

شکل ۳- مقایسه کسرهای مولی حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته در شعله آرام یک بعدی (فشار ۱ اتمسفر، دمای ورودی ۳۰۰ کلوین و نسبت هم‌ارزی ۰/۵)



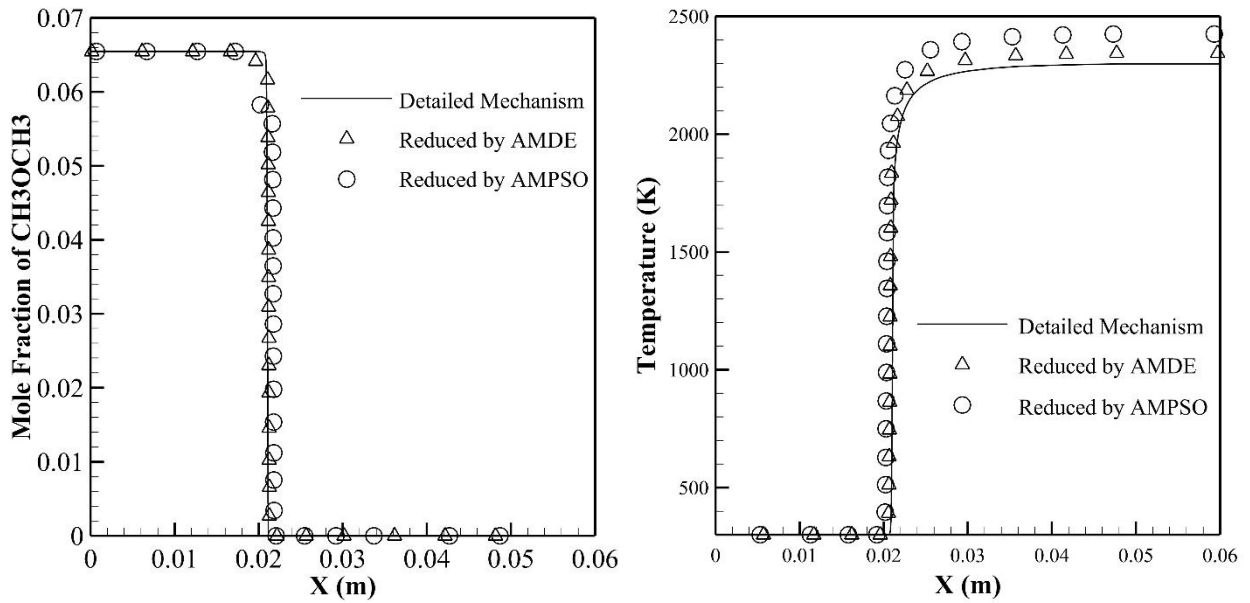
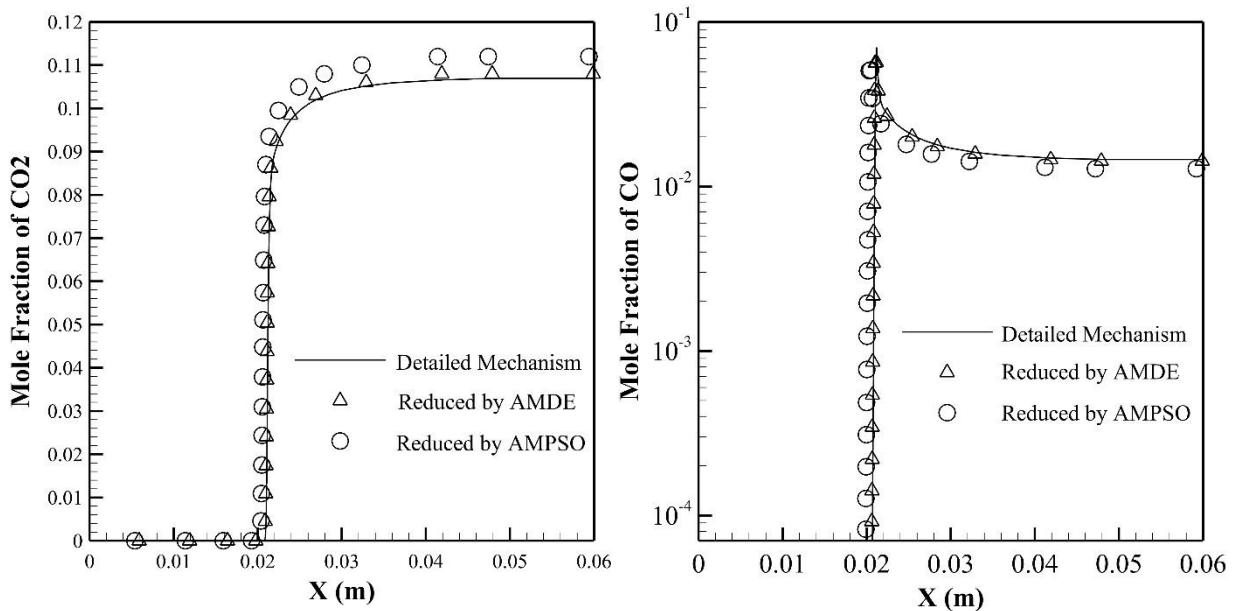


Figure 4- Comparison of flame speed, temperature and molar fractions calculated by detailed and reduced mechanisms in a one-dimensional laminar flame ($P = 1 \text{ atm}$, $T_{in} = 300 \text{ K}$ and equivalence ratio = 1)

شکل ۴- مقایسه سرعت، دما و کسرهای مولی حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته در شعله آرام یک بعدی (فشار ۱ اتمسفر، دمای ورودی ۳۰۰ کلوین و نسبت هم‌ارزی ۱)



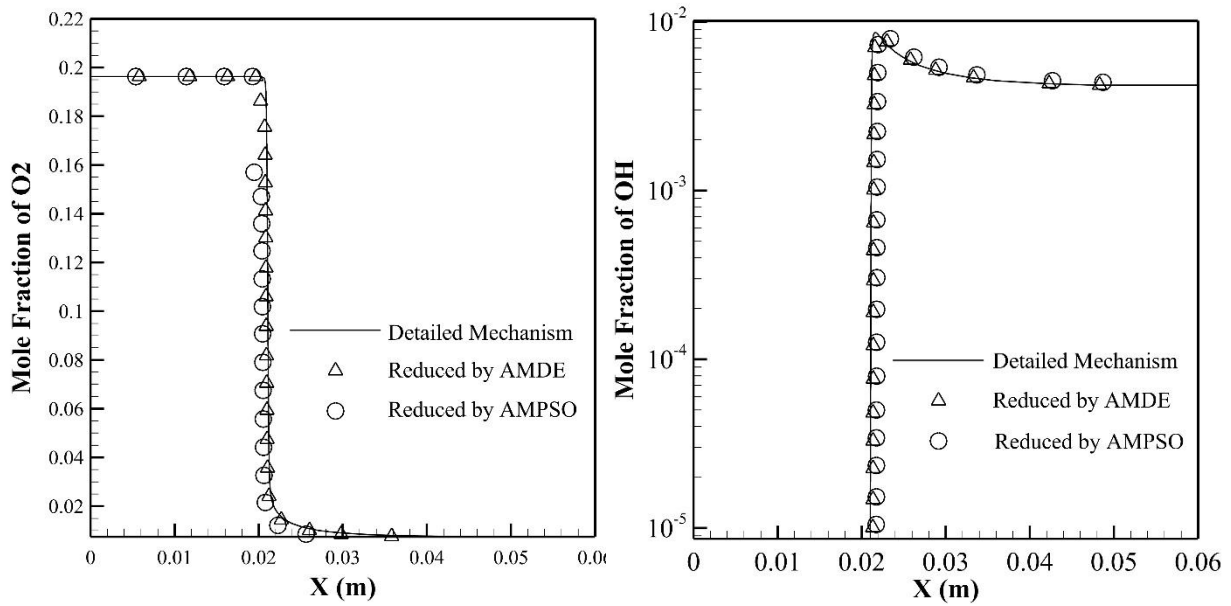
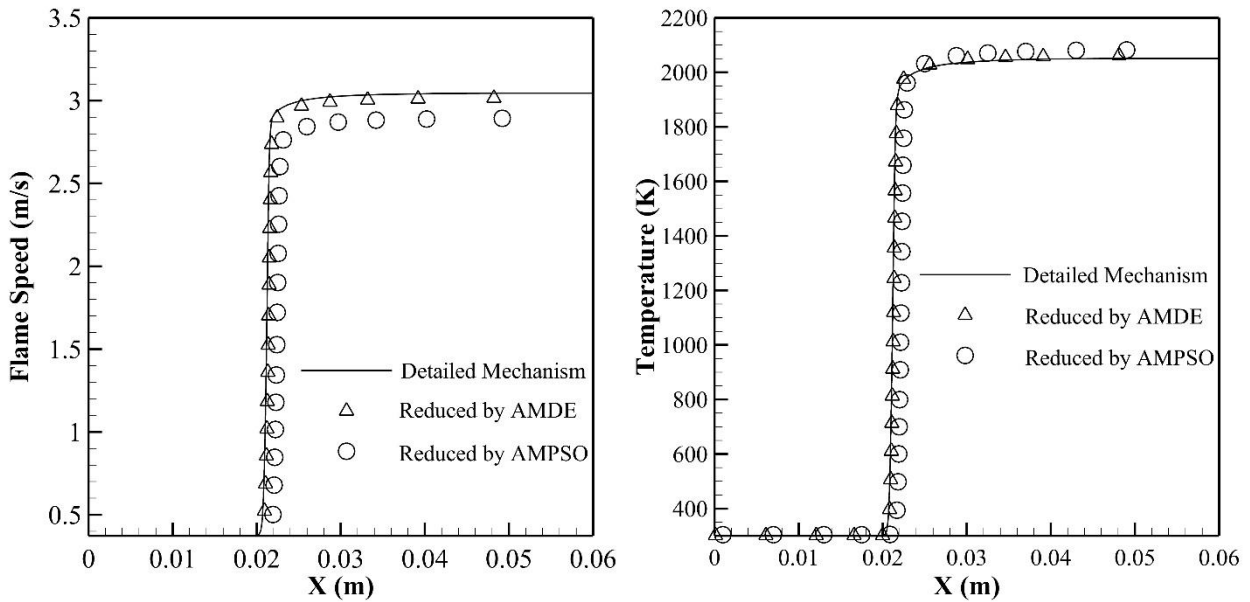


Figure 5- Comparison of molar fractions calculated by detailed and reduced mechanisms in a one-dimensional laminar flame ($P = 1 \text{ atm}$, $T_{in} = 300 \text{ K}$ and equivalence ratio = 1)

شکل ۵- مقایسه کسرهای مولی حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته در شعله آرام یک بعدی (فشار ۱ اتمسفر، دمای ورودی ۳۰۰ کلوین و نسبت هم‌ارزی ۱)



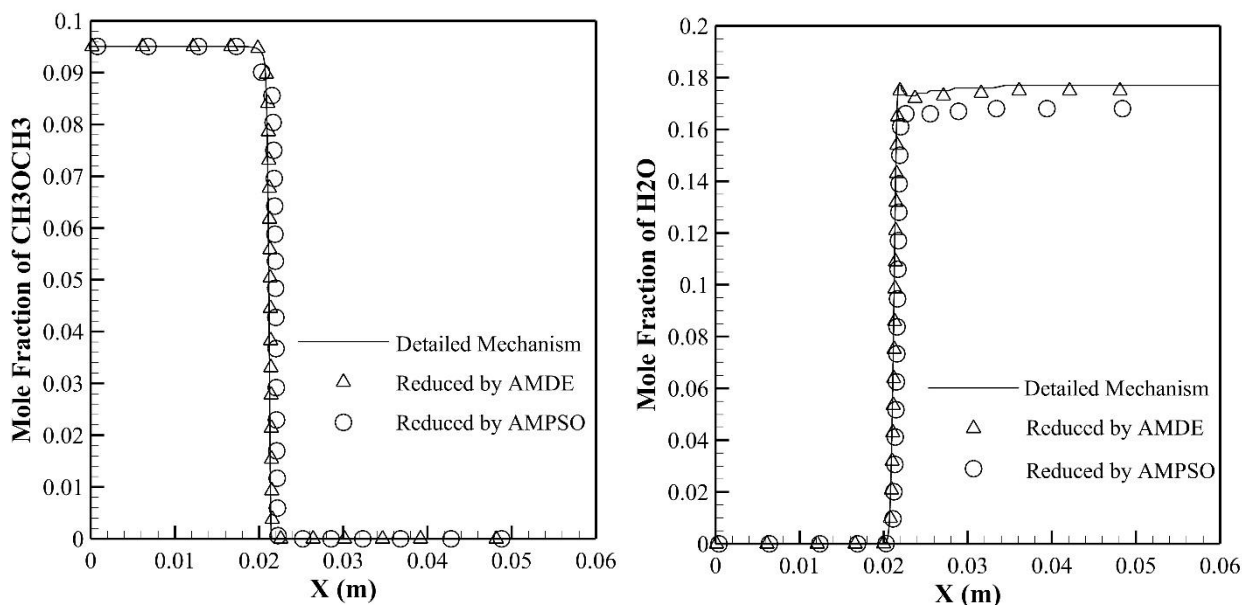
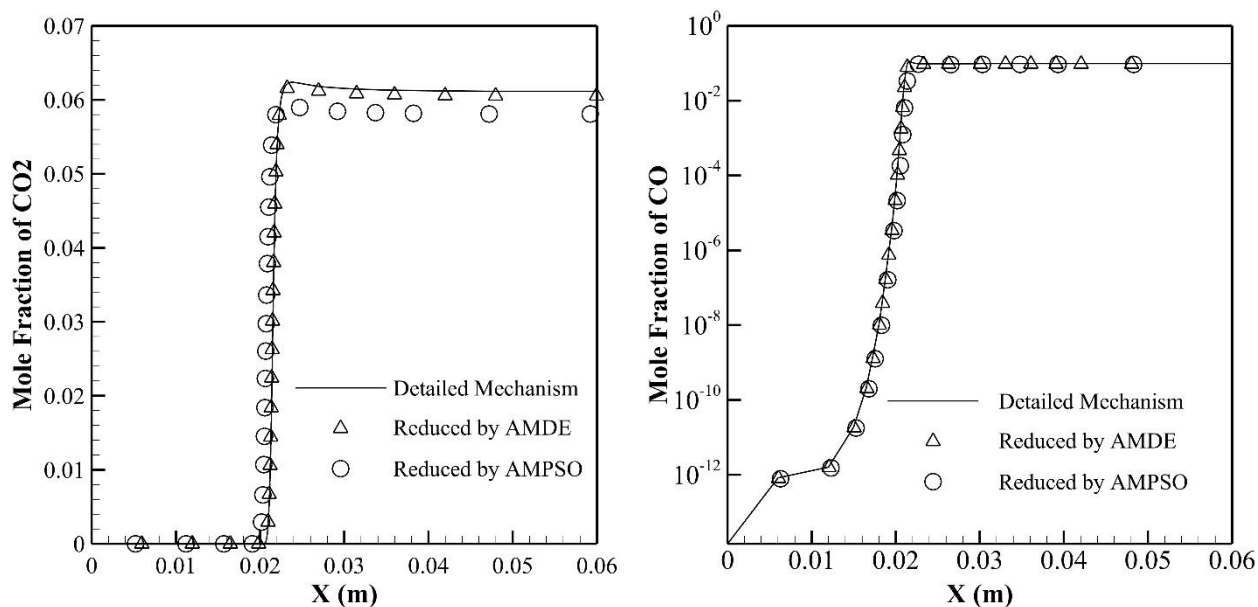


Figure 6- Comparison of flame speed, temperature and molar fractions calculated by detailed and reduced mechanisms in a one-dimensional laminar flame ($P = 1$ atm, $T_{in} = 300$ K and equivalence ratio = 1.5)

شکل ۶- مقایسه سرعت، دما و کسرهای مولی حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته در شعله آرام یک بعدی (فشار ۱ اتمسفر، دمای ورودی ۳۰۰ کلوین و نسبت هم‌ارزی ۱/۵)



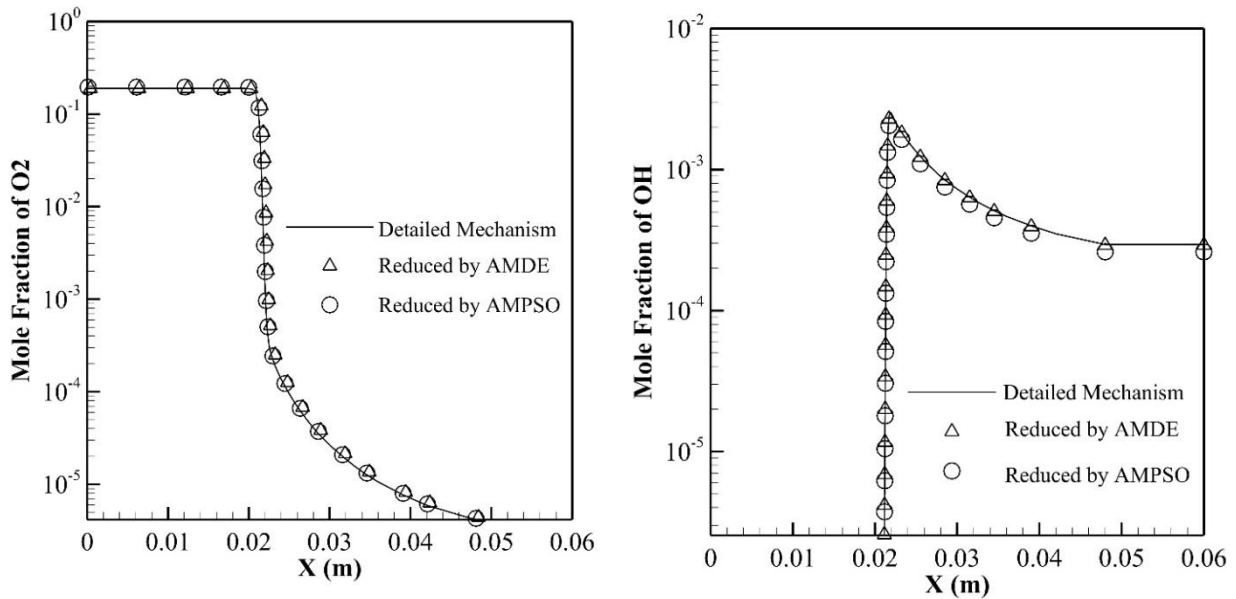


Figure 7- Comparison of molar fractions calculated by detailed and reduced mechanisms in a one-dimensional laminar flame ($P = 1$ atm, $T_{in} = 300$ K and equivalence ratio = 1.5)

شکل ۷- مقایسه کسرهای مولی حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش یافته در شعله آرام یک بعدی (فشار ۱ اتمسفر، دمای ورودی ۳۰۰ کلوین و نسبت هم‌ارزی ۱/۵)

شکل (۸) سرعت همگرایی الگوریتم‌های AMDE و AMPSO را نشان می‌دهد. مطابق این شکل، سرعت اولیه همگرایی الگوریتم AMPSO بیشتر از AMDE است. با وجودی که نتایج به دست آمده، تطابق خوبی را در زمان‌های مختلف بین مکانیزم مفصل و مکانیزم کاهش یافته حاصل از این الگوریتم‌ها نشان می‌دهد، ولی با توجه به مقایسه نتایج مکانیزم‌های کاهش یافته و مفصل، خطای حاصل از مکانیزم به دست آمده از AMPSO تا اندازه‌ای بیشتر است، زیرا علی‌رغم سرعت اولیه بیشتر این الگوریتم در همگرایی، به دلیل جستجوی کمتر، قادر به بهبود بیشتر نتایج نمی‌باشد. ولی در مقابل، الگوریتم AMDE علی‌رغم سرعت کمتر، به نتایج دقیق‌تری می‌رسد.

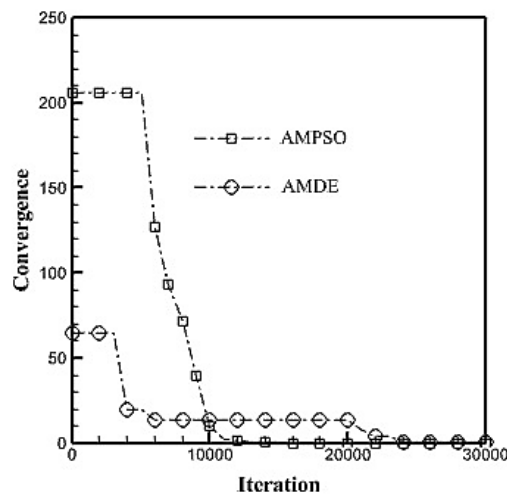


Figure 8- The convergence of AMDE and AMPSO algorithms

شکل ۸- مقایسه همگرایی الگوریتم‌های AMPSO و AMDE

نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک روش خودکار جهت کاهش مکانیزم‌های احتراقی کوچک/متوسط با استفاده از الگوریتم‌های فراابتکاری ارائه شد. برای استفاده از الگوریتم‌های فراابتکاری ابتدا باید تا چند برابر تعداد واکنش‌های ابتدایی مکانیزم شیمیایی مفصل، یک جمعیت اولیه از رشته‌های دودویی تولید شده و سپس با اعمال الگوریتم مورد نظر روی این جمعیت اولیه، جواب بهینه را به دست آورد. بنابراین به دلیل تعداد زیاد متغیرها و نیز جمعیت اولیه ایجاد شده، حجم محاسبات به شدت افزایش می‌یابد. همچنین در صورت استفاده از الگوریتم‌های فراابتکاری پیوسته، به دلیل دودویی بودن متغیرها، باید از نسخه‌های دودویی این الگوریتم‌ها استفاده شود. به همین دلیل، الگوریتم‌های بهینه‌سازی فضای پیوسته را نمی‌توان به‌طور مستقیم و بدون منطبق کردن آنها، در فضای دودویی به کار گرفت. برای حل این مشکل، در این تحقیق از الگوریتم مدولاسیون زاویه‌ای اصلاح شده، برای کاهش ابعاد مسئله و در نتیجه کاهش حجم محاسبات استفاده شد. به این منظور، مکانیزم احتراقی دی‌متیل‌تر در راکتورهای فشار ثابت و شعله آرام پیش آمیخته کاهش داده شد. پس از اجرای الگوریتم در بازه وسیعی از شرایط عملکردی راکتورها، مشاهده شد که تعداد واکنش‌های ابتدایی و نیز تعداد گونه‌ها نسبت به مکانیزم مفصل، کاهش چشمگیری یافتند (بیشتر از شش برابر) و همچنین مکانیزم کاهش‌یافته به‌دست آمده قادر است با دقت بسیار خوبی (کمتر از ۱ درصد)، نتایج مکانیزم مفصل را پیش‌بینی کند.

منابع

1. Y. Tong, B. Zhong, Y. Pei and T. Lu, *A Hybrid Mechanism for n-Dodecane Combustion with Optimized Low-Temperature Chemistry*, 9th U.S. National Combustion Meeting, Cincinnati, Ohio, 2015.
2. Z. Lu, S. Som, S.M. Sarathy, M. Plomer, W.J. Pitz, D.E. Longman and T.F. Lu, "Development and validation of an n-dodecane skeletal mechanism for Diesel spray-combustion applications", *Combustion Theory and Modelling*, Vol. 18, 2014, pp. 187–203.
3. A. Saltelli, M. Ratto, S. Tarantola and F. Campolongo, "Sensitivity analysis for chemical models", *Chemical Reviews*, Vol. 105, 2005, pp. 2811-2828.
4. Z.Y. Luo, T.F. Lu, M.J. Maciaszek, S. Som, and D.E. Longman, "A reduced mechanism for high temperature oxidation of biodiesel surrogates", *Energy and Fuels*, Vol. 24, 2010, pp. 6283-6293.
5. Z. Luo, S. Som, S.M. Sarathy, M. Plomer, W.J. Pitz, D.E. Longman and T.F. Lu, "Development and validation of an n-dodecane skeletal mechanism for Diesel spray-combustion applications", *Combustion Theory and Modelling*, Vol. 18, 2014, pp. 187–200.
6. L. Tosatto, B.A.V. Bennett and M.D. Smooke, "Comparison of different DRG-based methods for the skeletal reduction of JP-8 surrogate mechanisms". *Combustion and Flame*, Vol. 160, 2013, pp. 1572–1582.
7. M. Zandie, H. Kiat Ng, S. Gan, M.F.M said, X. Cheng, "Review of the advances in integrated chemical kinetics-computational fluid dynamics combustion modelling studies of gasoline-biodiesel mixtures", *Transportation Engineering*, Vol. 7, 2022, pp. 34-52.
8. M. Zandie, H. Kiat Ng, S. Gan, M.F.M said, X. Cheng, "Development of a reduced multi-component chemical kinetic mechanism for the combustion modelling of diesel-biodiesel-gasoline mixtures", *Transportation Engineering*, Vol. 7, 2022, pp. 13-33.
9. T. Turanyi and A.S. Tomlin, *Analysis of Kinetic Reaction Mechanisms*, Springer, 2014.
10. J. Warnatz, U. Maas and R.W. Dibble, *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*, Springer, 2006.
11. S.H. Lam, *Singular perturbation for stiff equations using numerical methods*, Recent Advances in the Aerospace Sciences: In Honor of Luigi Crocco on His Seventy-fifth Birthday, 1985, pp. 3-19.
12. S.H. Lam, "Using CSP to understand complex chemical kinetics", *Combustion Science and Technology*, Vol. 89, 1993, pp. 375-404.
13. U. Maas and S. Pope, "Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space", *Combustion and Flame*, Vol. 88, 1992, pp. 239-264.
14. A.N. Ghorban, "Model reduction in chemical dynamics: slow invariant manifolds, singular perturbations, thermodynamic estimates, and analysis of reaction graph", *Current Opinion in Chemical Engineering*, Vol. 21, 2018, pp. 48-59.
15. C. Sagesse, A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli and E. Ranzi, "A lumped approach to the kinetic modeling of pyrolysis and combustion of biodiesel fuels". *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 34, 2013, pp. 427-434.

16. L. Zhou and H. Wei, "An investigation of in situ adaptive tabulation for premixed and nonpremixed combustion engine simulations with primary reference fuel mechanism", *Applied Thermal Engineering*, Vol. 111, 2017, pp. 526-536.
17. P. Kourdis and J. Bellan, "Highly Reduced Species Mechanisms for iso-Cetane Using the Local Self-Similarity Tabulation Method", *Chemical Kinetics*, Vol. 11, 2016, pp. 739-752.
18. K. Edwards, T.F. Edgar and V.I. Manousiouthakis, "Kinetic model reduction using genetic algorithms", *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 22, 1998, pp. 239-246.
19. L. Elliott, D.B. Ingham, A.G. Kyne, N.S. Mera, M. Pourkashanian and C.W. Wilson, "Genetic algorithms for optimisation of chemical kinetics reaction mechanisms", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 30, 2004, pp. 297-328.
20. L. Elliott, D.B. Ingham, A.G. Kyne, N.S. Mera, M. Pourkashanian and C.W. Wilson, "Reaction mechanism reduction and optimization using genetic algorithms", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 44, 2005, pp. 658-667.
21. L. Elliott, D.B. Ingham, A.G. Kyne, N.S. Mera, M. Pourkashanian and S. Whittaker, "Reaction mechanism reduction and optimisation for modelling aviation fuel oxidation using standard and hybrid genetic algorithms", *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 30, 2006, pp. 889-900.
22. M.R. Maurya, S. Katare, P.R. Patkar, A.E. Rundell and V. Venkatasubramanian, "A systematic framework for the design of reduced-order models for signal transduction pathways from a control theoretic perspective", *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 30, 2006, pp. 437-452.
23. M.R. Maurya, S.J. Bornheimer, V. Venkatasubramanian and S. Subramaniam, "Mixed-integer nonlinear optimisation approach to coarse-graining biochemical networks", *IET Systems Biology*, Vol. 3, 2009, pp. 24-39.
24. C.J. Montgomery, C. Yang, A.R. Parkinson and J.Y. Chen, "Selecting the optimum quasi-steadystate species for reduced chemical kinetic mechanisms using a genetic algorithm", *Combustion and Flame*, Vol. 144, 2006, pp. 37-52.
25. J.J. Hernandez, R. Ballesteros and J. Sanzargent, "Reduction of kinetic mechanisms for fuel oxidation through genetic algorithms", *Mathematical and Computer Modelling*, Vol. 52, 2010, pp. 1185-1193.
26. N. Sikalo, O. Hasemann, C. Schulz, A. Kempf and I. Wlokas, "A genetic algorithm-based method for the automatic reduction of reaction mechanisms", *Chemical Kinetics*, Vol. 46, 2014, pp. 41-59.
27. www.llnl.gov
28. R. Storn and K. Price, "Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces", *Global Optimization*, Vol. 11, 1997, pp. 359-431.
29. A.P. Engelbrecht, *Computational Intelligence*, John Wiley & Sons Ltd, 2007.
30. J. Kennedy and R.C. Eberhart, *Particle Swarm Optimization*, International Conference on Neural Networks, Perth, Australia, 1995.
31. G. Pampara, A.P. Engelbrecht and N. Franken, *Binary Differential Evolution*, IEEE International Conference on Evolutionary Computation, Vancouver, Canada, 2006.
32. J. Dong, Z. Wang and J. Mo, "A Phase Angle-Modulated Bat Algorithm with Application to Antenna Topology Optimization", *Applied Sciences*, 2021, Vol. 11, pp. 2243-2262.
33. L. Wang, R. Shi and J. Dong, "A Hybridization of Dragonfly Algorithm Optimization and Angle Modulation Mechanism for 0-1 Knapsack Problems", *Entropy*, Vol. 23, 2021, pp. 598-622
34. J.L. Barend and A.P. Engelbrecht, *Angle Modulated Particle Swarm Variants*, 9th International Conference on Swarm Intelligence, Brussels, Belgium, 2014.

English Abstract

Automatic reduction of detailed combustion mechanisms using particle swarm optimization, differential evolution and angular modulation algorithms: application to Dimethyl Ether/air combustion

Mohsen Mousavi¹, Javad Khadem^{2*}, Ali Safavinezhad³

1- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran, mohsen_mousavi@birjand.ac.ir

2- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran, jkhadem@birjand.ac.ir

3- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran, asafavi@birjand.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2022/04/03, Received in revised form: 2022/06/19, Accepted: 2022/06/29)

Mathematical modeling is used as a tool to predict the combustion behavior of fuels. The use of detailed chemical kinetics mechanisms in combustion models increases computational time. Metaheuristic optimization algorithms are one of the methods used to reduce the detailed mechanisms. The purpose of this paper is to investigate the possibility of using continuous metaheuristic algorithms in binary space to reduce the combustion mechanism of dimethyl ether fuel. For this purpose, particle swarm optimization and differential evolution algorithms have been used in a combination with angular modulation to map the continuous space to binary one and reduce the dimensions of problem from 351 to 6. Finally, a detailed mechanism with 79 species and 351 reactions is reduced to 17 species and 43 reactions. It has been showed that the reduced mechanism predicts the results of detailed mechanism in constant pressure and laminar premixed flame reactors very well with maximum error less than % 0.95.

Keywords: Chemical kinetics, Reduced mechanism, Metaheuristic optimization algorithms, Angular modulation.