

فرایند کاهش مکانیزم خودکار به منظور مدل‌سازی احتراق در یک موتور HCCI با سوخت گاز طبیعی و هپتان نرمال

وحید محمدی^۱، رحیم خوشبختی‌سرای^۲، امیر کارگر امجد^۳ و کیوان بهلولی^۴

۱- کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز، vahid1380@gmail.com

۲- دانشیار مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز (نوسنده مخاطب)، khosbakhhti@sut.ac.ir

۳- کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز، a_amjad1388@yahoo.com

۴- دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک، دانشگاه مدیترانه شرقی، قبرس، ترکیه، keyvan.bahlouli@cc.emu.edu.tr

(دریافت: ۱۳۹۱/۶/۱۰، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۱/۸/۱۳، پذیرش: ۹۱/۸/۲۲)

موتورهای احتراقی HCCI، به دلیل مصرف سوخت و آلایندگی پایین، در سال‌های اخیر مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته‌اند. همزمان با پژوهش‌های آزمایشگاهی متعددی که در مورد این موتورها صورت گرفته است، مدل‌سازی ریاضی نیز همواره به‌عنوان ابزاری برای پیش‌بینی رفتار احتراقی، عملکردی و آلایندگی آن‌ها به‌کار رفته است. هرچند استفاده از سازوکارهای سینتیک شیمیایی مفصل در مدل‌های احتراقی به پیش‌بینی مناسبی از رفتارهای یادشده خواهد انجامید، اما از سوی دیگر این امر به افزایش قابل توجه زمان محاسبات خصوصاً در مدل‌های احتراقی دقیق‌تر نیز منجر خواهد شد. در این پژوهش حاضر، با هدف رفع این مشکل، فرایند کاهش مکانیزم در شرایط موتور احتراقی HCCI مدنظر قرار گرفت. در این راستا، از یک مدل تک‌منطقه‌ای بهینه‌سازی‌شده به‌عنوان ابزار لازم برای شبیه‌سازی احتراق استفاده شد. براساس مطالعات انجام‌شده در این پژوهش، روش گراف روابط جهت‌دار به‌همراه انتشار خطا (DRGEP)، به دلیل زمان محاسباتی پایین در عین دقت بالا، به‌عنوان روش مناسب برای فرایند کاهش مکانیزم انتخاب شد. علاوه بر این، به جای رویکرد سنتی کاهش تک‌مرحله‌ای، از یک رویکرد نوین مبتنی بر کاهش تدریجی مجهز به کنترل خطا بهره گرفته شد. با این رویکرد، فرایند کاهش مکانیزم به‌صورت کاملاً خودکار در بازه وسیعی از شرایط کارکردی موتور HCCI بر روی مکانیزم GRI-Mech3.0 برای شبیه‌سازی احتراق سوخت گاز طبیعی، و مکانیزم گالوویچف برای شبیه‌سازی احتراق هپتان نرمال اجرا شد. در انتهای این فرایند، اندازه این دو مکانیزم به‌ترتیب از ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش، و ۵۷ گونه و ۲۹۰ واکنش، به مقادیر ۲۴ گونه و ۹۵ واکنش، و ۴۲ گونه و ۱۴۶ واکنش کاهش یافت. با این وجود خطای کاهش در همه حالت‌ها کمتر از ۱ درصد باقی ماند.

کلیدواژگان: کاهش مکانیزم، DRGEP، HCCI، گاز طبیعی، هپتان نرمال

مقدمه

انتشار گازهای گلخانه‌ای و مصرف بالای سوخت از جمله چالش‌های اساسی در دنیای کنونی به‌شمار می‌روند. غلبه بر این دو چالش، در گرو توسعه راه‌کارهایی جهت دستیابی به احتراق پاک در موتورهای احتراق داخلی با بازده حرارتی بالاست. احتراق HCCI^۱، به دلیل دو مزیت عمده مصرف سوخت پایین و انتشار بسیار اندک آلاینده‌های NO_x و PM^۲، یکی از اصلی‌ترین راه‌کارهای پیشنهادی در این زمینه است [۱-۳]. ریشه این دو مزیت را می‌توان در ماهیت فقیر و پیش‌آمیخته این سبک احتراقی دانست که باعث وقوع یک فرایند احتراق سریع با آهنگ آزادسازی گرمای زیاد و تقریباً بدون پیشروی شعله

1. Homogeneous Charge Compression Ignition
2. Particulate Matters

می‌شود [۷-۴]. با وجود این، احتراق HCCI به‌عنوان یک راه‌کار عملی برای استفاده در موتورهای احتراق داخلی هنوز با چالش‌های متعددی از جمله گسترش محدوده کاری موتور به بارهای بالا [۶]، فقدان سیستم کنترلی مناسب برای زمان اشتعال [۹،۸]، و نشر زیاد آلاینده‌های مونوکسیدکربن و UHC^۱ [۷-۴] مواجه است.

با توجه به وابستگی شدید احتراق HCCI به سینتیک شیمیایی [۱۱،۱۰]، در هنگام مدلسازی این سبک احتراقی، باید سینتیک شیمیایی در نظر گرفته شود. اما اعمال سینتیک شیمیایی مفصل به یک مدل احتراقی، زمان محاسبات آن را به‌طرز چشمگیری افزایش می‌دهد، زیرا به‌ازای هر گونه موجود در مکانیزم سینتیک شیمیایی، یک معادله دیفرانسیل غیرخطی به معادلات حاکم مسئله اضافه می‌شود. از طرف دیگر، در صورت استفاده از مدل‌های احتراقی دقیق (مثلاً مدل‌های ترمودینامیکی چندمنطقه‌ای یا مدل‌های چندبعدی) نیز زمان محاسبات افزایش خواهد یافت. از این رو، واضح است که استفاده همزمان از یک مکانیزم سینتیک شیمیایی مفصل با اندازه بسیار بزرگ و یک مدل احتراقی دقیق زمان محاسبات را به‌گونه‌ای بالا می‌برد که شبیه‌سازی احتراق عملاً غیرممکن می‌شود [۱۲]. در این زمینه تاکنون مطالعات وسیعی انجام گرفته که غالب آن‌ها نشان داده‌اند که بخش عمده‌ای از این زمان محاسباتی بسیار طولانی، به مؤلفه سینتیک شیمیایی مدل‌ها مرتبط است [۱۳]. بنابراین ضرورت کاهش اندازه مکانیزم (به‌عبارت دیگر تعداد گونه‌ها و واکنش‌های موجود در مکانیزم) برای شبیه‌سازی دقیق‌تر احتراق HCCI به‌وضوح احساس می‌شود. در این پژوهش، به مجموعه عملیاتی که به این منظور انجام می‌گیرد، فرایند کاهش مکانیزم اطلاق خواهد شد.

کاهش مکانیزم می‌تواند در سطوح متفاوتی انجام شود که از آن جمله از کاهش اسکلتال^۲ و کاهش بیشتر یاد شده است [۱۴]. در هریک از این سطوح تاکنون از روش‌های مختلفی همچون دسته‌بندی شیمیایی [۱۶]، تحلیل حساسیت [۳۳،۱۹]، تحلیل آهنگ واکنش [۲۰]، کاهش مفصل [۲۱]، تحلیل مقیاس زمانی [۲۲-۲۴]، روش‌های مستقیم مبتنی بر حذف گونه‌ها [۱۴-۱۸، ۲۵-۳۱]، تحلیل جریان واکنش [۳۲]، و تحلیل بردار ویژه [۳۲] استفاده شده است. به‌طور کلی می‌توان گفت روش‌هایی مانند دسته‌بندی شیمیایی، تحلیل حساسیت (از جمله تحلیل جزء اصلی [۳۳]) و تحلیل آهنگ واکنش زمان‌بر بوده و بهتر است قبل از استفاده از آن‌ها، ابتدا مکانیزم مفصل را به یکی از روش‌های دیگر کاهش، تا سطح اسکلتال کاهش داد، و سپس این روش‌ها را به آن اعمال نمود [۱۴-۱۷]. از جمله روش‌های کاهش اسکلتال، روش‌های مستقیم مبتنی بر حذف گونه‌ها به‌جای واکنش‌ها هستند. در این دسته، روش‌های DRG^۳ و DRGEP^۴، با دارا بودن زمان محاسباتی پایین و خطی با تعداد واکنش‌ها [۱۵]، برای اعمال به مکانیزم‌های بزرگ بسیار مناسب‌اند [۱۴-۱۶].

روش DRG از کار لو و لاو نشئت می‌گیرد که در آن مؤلفان برای نخستین‌بار، در سال ۲۰۰۵، مکانیزم مفصل سوخت اتیلن را با استفاده از روش ابداعی خود با موفقیت کاهش دادند [۱۴]. در سال‌های بعد، این دو پژوهشگر تحقیقات خود را درباره قابلیت‌های روش DRG ادامه دادند [۱۵-۱۷]. پیپوت و پیچ در سال ۲۰۰۸ اصلاحیه‌ای بر روش DRG ارائه کرده و آن را DRGEP نامیدند [۲۶]. شی و همکارانش در سال ۲۰۱۰، با اعمال متوالی دو روش DRGEP و PCA^۵ به مکانیزم‌های مفصل سه سوخت هپتان نرمال، ایزواکتان، و متیل دکانویت، مکانیزم‌های کاهش‌یافته‌ای را بر اساس شرایط احتراق در موتور HCCI به‌دست آوردند [۳۱]. مشاهده می‌شود که کارهای انجام‌شده در راستای کاهش مکانیزم‌ها عمدتاً برای شرایط احتراقی موتورهای احتراق داخلی HCCI نیستند. از این رو، کار حاضر، با استفاده از یک مدل احتراقی کارآمدتر برای احتراق دو سوخت گاز طبیعی و هپتان نرمال، کاهش مکانیزم‌های سینتیک شیمیایی متناظر این سوخت‌ها را در شرایط حاکم بر موتور احتراقی HCCI دنبال خواهد کرد. در این راستا، شرایط عملکردی وسیعی از موتور بررسی خواهد شد.

1. Unburned HydroCarbons
2. Skeletal reduction
3. Directed Relation Graph
4. Directed Relation Graph with Error Propagation
5. Principal Component Analysis

توصیف کار

بررسی‌های انجام‌شده در کار حاضر نشان داد که زمان محاسباتی روش‌های کاهش مستقیم (مبتنی بر حذف گونه‌ها به‌جای واکنش‌ها) پایین بوده و با اندازه مکانیزم رابطه خطی دارد. بنابراین برخلاف سایر روش‌های کاهش، اعمال این روش‌ها به مکانیزم‌های مفصل بزرگ با موفقیت بسیار زیادی همراه است. از این رو، در کار حاضر، با هدف کاهش زمان محاسباتی، استفاده از روش گراف روابط جهت‌دار به‌همراه انتشار خطا، به‌عنوان یکی از کارآمدترین روش‌های کاهش مستقیم، مدنظر قرار گرفت. به‌منظور کسب درک صحیحی از کار حاضر، لازم است آشنایی مختصری با این روش کاهش به‌عمل آید.

آشنایی با روش گراف روابط جهت‌دار (DRG)

این روش نخستین‌بار در سال ۲۰۰۵ توسط لو و لاو [۱۴] پیشنهاد شد. اساس کار این روش را می‌توان به‌اختصار به این صورت بیان کرد که ابتدا تعدادی از گونه‌های مکانیزم مفصل که انتظار می‌رود در مکانیزم کاهش‌یافته نیز باقی بمانند، به‌عنوان گونه‌های هدف یا گونه‌های اصلی مشخص می‌شوند. سپس اهمیت و تأثیر تک‌تک گونه‌های حاضر در مکانیزم مفصل بر آن‌ها ارزیابی و سنجیده می‌شود. بر این اساس، گونه‌هایی که حذف آنها تأثیر قابل توجهی بر گونه‌های هدف ندارد، شناسایی شده و به‌عنوان گونه‌های زائد معرفی می‌شوند. درنهایت مکانیزم کاهش‌یافته از حذف این گونه‌های اخیر به‌دست می‌آید. همان‌طور که از توضیحات فوق مشخص است، اجرای روش DRG مستلزم یافتن تأثیر تک‌تک گونه‌های مکانیزم بر گونه‌های هدف است. لو و لاو برای ارزیابی تأثیر گونه B بر گونه A رابطه زیر را ارائه کردند [۱۴]:

$$r_{AB} = \frac{\sum_{i=1}^{N_r} \nu_{A,i} q_i \delta_{B,i}}{\sum_{i=1}^{N_r} \nu_{A,i} q_i} \quad (1)$$

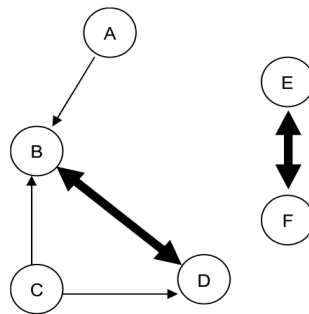
$$\delta_{B,i} = \begin{cases} 1 & \text{واکنش } i \text{ شامل گونه } B \text{ باشد} \\ 0 & \text{نباشد} \end{cases} \quad (2)$$

که در آن $\nu_{A,i}$ ضریب استوکیومتریکی گونه A در واکنش i ام و q_i نرخ پیشرفت این واکنش است. $\delta_{B,i}$ نشان‌دهنده حضور یا عدم حضور گونه B در واکنش مزبور بوده و N_r تعداد کل واکنش‌های مکانیزم را نشان می‌دهد. روشن است که مخرج کسر، آهنگ تولید خالص گونه A را نشان می‌دهد. از طرف دیگر صورت کسر عبارت است از آهنگ تولید خالص گونه A ناشی از واکنش‌هایی که گونه B هم مستقیماً در آن‌ها حضور دارد. بنابراین، r_{AB} درواقع معیاری از تأثیر مستقیم گونه B بر آهنگ تولید خالص گونه A است و روشن است که مقدار آن بین صفر و یک خواهد بود.

اساس روش DRG بر رسم یک گراف استوار است. نحوه رسم این گراف بدین صورت است که ابتدا برای هر گونه حاضر در مکانیزم یک رأس ترسیم می‌شود. سپس با استفاده از روابط (۱) و (۲)، مقدار r_{sp_1,sp_2} میان هر دو گونه حاضر در مکانیزم سنجیده می‌شود. در صورتی که این مقدار از یک حد خطای دلخواه که توسط کاربر مشخص می‌شود (مثلاً ϵ) بزرگ‌تر باشد (رابطه ۳)، این دو گونه نسبت به هم وابسته تلقی می‌شوند. وجود این وابستگی روی گراف با یک پیکان، از گونه وابسته به دیگری، و درجه شدت آن با ضخامت این پیکان نشان داده می‌شود. به‌عنوان مثال، شکل ۱ یک مکانیزم فرضی دارای شش گونه A تا F را نشان می‌دهد [۱۴]. همان‌طور که مشاهده می‌شود، به هر گونه در مکانیزم یک رأس از گراف تعلق گرفته است. گونه A به B وابسته است. B نیز به نوبه خود شدیداً به D وابسته است و برعکس، اما B وابستگی معناداری به A ندارد. از طرف دیگر گونه C به جفت B و D وابسته است. گونه‌های E و F نیز وابستگی شدید متقابل دارند، اما با سایر گونه‌ها در ارتباط مستقیم نیستند. اکنون به‌عنوان مثال فرض کنید گونه A یکی از گونه‌های هدف باشد. در این صورت، به‌دلیل وابستگی آن به B، این گونه هم باید در مکانیزم کاهش‌یافته باقی بماند. از سوی دیگر، B و D شدیداً به یکدیگر وابسته‌اند، لذا D هم باید نگه‌داشته شود. سایر گونه‌ها را می‌توان حذف کرد بدون اینکه خطای قابل توجهی در گونه هدف (A) به وجود آید. لذا این فرایند کاهش مکانیزم فرضی ساده، مکانیزم مفصل {A,B,C,D,E,F} را به مکانیزم کاهش‌یافته {A,B,D} خواهد رساند.

$$r_{AB} \geq \varepsilon \quad (3)$$

هریک از گونه‌های هدف، یا به صورت مستقیم و یا به صورت غیرمستقیم، به تعدادی از گونه‌ها وابسته‌اند. مجموعه کلیه این گونه‌ها به علاوه خود گونه هدف را مجموعه وابسته آن گونه هدف نامیده و با S نشان می‌دهند. مثلاً در شکل ۱ گونه هدف A مسقیماً به B و به صورت غیرمستقیم به D وابسته است؛ لذا مجموعه وابسته آن عبارت است از $S_A = \{A, B, D\}$. در اینجا چون تنها یک گونه هدف انتخاب شده است، همین مجموعه، گونه‌های مهم مکانیزم را تشکیل می‌دهد. اما در صورتی که تعداد گونه‌های هدف بیش از یک اختیار شود، گونه‌های مهم از اجتماع همه مجموعه‌های وابسته متناظر با تک تک گونه‌های هدف تشکیل می‌شود. سایر گونه‌های حاضر در مکانیزم زائد تلقی می‌شوند.



شکل ۱- یک گراف روابط جهت‌دار که روابط فرضی بین گونه‌ها را نشان می‌دهد [۱۴]

تاکنون گونه‌های مهم مکانیزم شناسایی شده‌اند. مرحله بعدی، شناسایی واکنش‌های مهم مکانیزم است. به این منظور، جستجویی در میان کلیه واکنش‌های موجود در مکانیزم مفصل صورت می‌پذیرد. اگر حداقل یکی از گونه‌های حاضر در یک واکنش زائد باشد، آن واکنش زائد شناخته شده و حذف می‌شود، در غیر این صورت، در مکانیزم باقی خواهد ماند. به این ترتیب، کلیه گونه‌ها و واکنش‌های مهم موجود در مکانیزم مفصل شناسایی شده‌اند. به عبارت دیگر مکانیزم کاهش یافته تشکیل شده است.

آشنایی با روش گراف روابط جهت‌دار همراه با انتشار خطا (DRGEP)

پیپوت و پیچ در سال ۲۰۰۶ با دقت در روش DRG متوجه وجود نقایصی در آن شده و درصد رفع آنها برآمدند [۲۶]. در واقع، اساس این روش همانند DRG است با این تفاوت که در آن، در وابستگی غیرمستقیم گونه‌های هدف به گونه‌هایی که از طریق یک زنجیره پیکان قابل دسترسی هستند، تجدیدنظر شده است.

برای درک بهتر این تفاوت، شکل ۲ را در نظر بگیرید [۲۶]. همان‌طور که قبلاً گفته شد، پیکان از یک رأس به رأس دیگر در DRG تنها هنگامی رسم می‌شود که وابستگی میان آن دو از حد خطای دلخواه ε بزرگ‌تر باشد. در این شکل، این موضوع بدین معناست که $r_{AB} = r_{BC} = r_{BD} = \alpha \geq \varepsilon$. بنابراین، اگر فرض کنیم گونه A یکی از گونه‌های هدف باشد، مجموعه وابسته آن، طبق آنچه از روش DRG به یاد داریم، عبارت است از $S_A = \{A, B, C, D\}$ ؛ به عبارت دیگر نمی‌توان هیچ گونه‌ای را از مکانیزم حذف کرد. اینجاست که پیپوت و پیچ دچار تردید شده و چنین استدلال می‌کنند که درست است که C و D تأثیر مستقیم α را روی گونه B دارند، اما آیا تأثیر آن‌ها روی گونه A (که به توضوح تأثیری غیرمستقیم است) با تأثیر مستقیم گونه B روی A برابر است؟ با علم به منفی بودن پاسخ این سوال، آن‌ها می‌افزایند که هر یک از گونه‌های C و D تأثیری برابر α روی آهنگ تولید خالص گونه B دارند و B نیز به همین ترتیب روی A. بنابراین منطقی به نظر می‌رسد که تأثیر غیرمستقیم C و D روی A به اندازه α نباشد، بلکه حاصل ضرب دو α متوالی، یعنی α^2 باشد. روشن است که چون $0 \leq \alpha \leq 1$ است، α^2 نیز بین صفر و یک

بوده و همواره $\alpha \leq \alpha^2$ خواهد بود. بنابراین بسته به اینکه α^2 بزرگتر یا مساوی، و یا کوچکتر از ε باشد، گونه‌های مهم مکانیزم متفاوت خواهند بود. در نمودار سمت راست شکل ۲ سه حالت احتمالی به تصویر کشیده شده‌اند:

ا. $\alpha < \varepsilon$ (ناحیه سمت راست محور ε): در این حالت، تأثیر هیچ یک از گونه‌ها روی گونه هدف A قابل توجه نبوده و طبق هردو روش، تنها گونه مهم مکانیزم خود A خواهد بود.

ب. $\alpha, \alpha^2 \geq \varepsilon$ (ناحیه سمت چپ محور ε): در این حالت نیز هر دو روش به نتیجه واحدی می‌رسند و همه چهار گونه را مهم شناسایی می‌کنند.

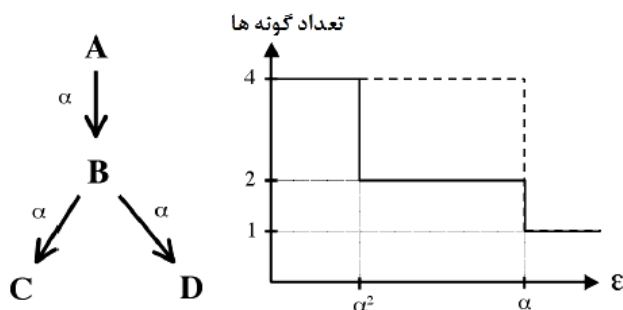
ت. $\alpha \geq \varepsilon$ و $\alpha^2 < \varepsilon$ (ناحیه وسط محور ε): در این حالت است که نتایج دو روش متفاوت خواهند بود. در حالی که روش DRG همه چهار گونه را مهم تشخیص می‌دهد، روش DRGEP گونه‌های C و D را زائد شناسایی کرده و حذف می‌کند. بنابراین، همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، بسته به انتخاب هریک از این دو روش، چهار یا دو گونه در مکانیزم باقی می‌مانند.

در نتیجه، پیپوت و پیچ معادله (۲) را به صورت زیر اصلاح کردند [۲۶]:

$$R_{AB} \geq \varepsilon \quad (4)$$

$$R_{AB} \equiv \max(\prod_A^B r_{sp_1, sp_2})$$

یعنی وابستگی گونه A به B باید از تمامی مسیرهای ممکن از A به B بررسی شود. مقدار R_{AB} برابر با بیشینه مقدار حاصل ضرب r_{sp_1, sp_2} های متوالی در هریک از مسیرهای مستقیم یا غیرمستقیم از A به B خواهد بود. دو پژوهشگر با استفاده از این رابطه نشان دادند که خطای DRGEP به مراتب کمتر از DRG است، ضمن اینکه منحنی کاهش آن در هنگام کاهش‌های ناگهانی هموارتر است [۲۶]. از این رو، از آن با موفقیت در کاهش مکانیزم هپتان نرمال و تعدادی از سوخت‌های مرجع اصلی استفاده کردند [۲۶].



شکل ۲- نمونه‌ای از انتخاب گونه‌ها با استفاده از روش‌های DRG (خط چین) و DRGEP (خط پر) [۲۷]

از طرف دیگر مبتکرین روش DRG، لو و لائو، با ذکر چند مثال نمونه، چنین استدلال کردند که استفاده همزمان از معادلات (۱) و (۳) برای ارزیابی وابستگی بین گونه‌هایی که تنها از طریق یک سری واکنش‌های زنجیره‌بلند حاوی گونه‌های میانی QSS به هم متصل شده‌اند، ممکن است به خطای قابل توجهی منجر شود [۱۷]. پیپوت و پیچ، با تأیید این ادعا، رابطه جایگزین زیر را برای سنجش r_{AB} پیشنهاد کردند [۲۷]:

$$r_{AB} = \frac{\sum_{i=1}^{N_r} \nu_{A,i} q_i \delta_{B,i}}{\max(P_A, C_A)}$$

$$\delta_{B,i} = \begin{cases} 1 & \text{واکنش } i \text{ شامل گونه } B \text{ باشد} \\ 0 & \text{نباشد} \end{cases}$$

$$P_A = \sum_{i=1}^{N_r} \max(0, v_{A,i} q_i)$$

$$C_A = \sum_{i=1}^{N_r} \min(0, -v_{A,i} q_i) \quad (5)$$

پس از اعمال این اصلاحات، پیپوت و پیچ توانستند مکانیزم مفصل ایزواکتان را بدون نگرانی از مسئله یادشده با موفقیت کاهش دهند [۲۷]. در ادامه، لیانگ و همکارانش [۲۹، ۲۸] و شی و همکارانش [۳۱، ۳۰] نیز با تأیید کار پیپوت و پیچ، جهت کاهش مکانیزم‌های سینتیک شیمیایی از روش اصلاح‌شده (DRGEP) استفاده کردند. از این رو، در کار حاضر نیز، این روش مبنای کار قرار گرفت.

شرح پژوهش حاضر

اگر به رابطه ۵ بازگردیم، درمی‌یابیم که کمیت‌های $v_{A,i}$ و $\delta_{B,i}$ تنها به مکانیزم سینتیک شیمیایی مرتبط بوده و به سهولت قابل محاسبه هستند. کمیت q_i برای واکنش i ام به صورت زیر تعریف می‌شود [۳۴]:

$$q_i = k_{f,i} \prod_{j=1}^{N_s} [X_j]^{v'_{j,i}} - k_{r,i} \prod_{j=1}^{N_s} [X_j]^{v''_{j,i}} \quad (6)$$

که در آن $k_{f,i}$ و $k_{r,i}$ به ترتیب ضرایب آهنگ واکنش i ام رفت و برگشت، N_s تعداد گونه‌ها، $[X_j]$ غلظت هریک از گونه‌ها، و $v'_{j,i}$ و $v''_{j,i}$ ضرایب استوکیومتریکی گونه Z ام در واکنش i ام و به ترتیب در سمت واکنش‌دهنده‌ها و سمت محصولات‌اند. ضرایب آهنگ واکنش تابعی از دما، فشار و ترکیب مخلوط درون سیلندر بوده و چون تمامی سه مورد مذکور در هر گام زمانی از شبیه‌سازی موتور تغییر می‌کنند، نهایتاً q_i نیز تابع غیرمستقیمی از زمان (یا زاویه میل‌لنگ) خواهد بود.

در کدی که از قبل برای مدل‌سازی تک‌منطقه‌ای موتور HCCI توسعه یافته [۶] و مبنای این کار نیز قرار گرفته است، q_i نیز مانند سایر کمیت‌های فوق در هر گام زمانی قابل محاسبه است. بنابراین، در هر گام زمانی می‌توان R_{AB} و r_{AB} را برای هر دو گونه A و B دلخواه با دقت بسیار بالا محاسبه کرد.

اینکه R_{AB} مربوط به کدام گام زمانی در رابطه ۴ قرار گیرد، بستگی به نحوه نمونه‌برداری از یک سیکل کاری موتور دارد. شی و همکارانش گام‌های زمانی متناظر با دماهای ۶۰۰، ۸۰۰، ۱۰۰۰، ۱۲۰۰، ۱۵۰۰ و ۲۰۰۰ کلوین را به‌عنوان نقاط نمونه‌برداری انتخاب کردند [۳۱]. در کار حاضر نیز همین روند تکرار شد، با این تفاوت که برای شرایط احتمالی که موتور دمای ۲۰۰۰ کلوین را تجربه نمی‌کرد، از دمای بیشینه سیکل استفاده شد. در هریک از نقاط نمونه‌برداری فوق، مشابه لیانگ و همکارانش [۲۸] و شی و همکارانش [۳۱]، گونه‌های سوخت، CO و رادیکال HO_2 به‌عنوان گونه‌های هدف انتخاب شدند. علاوه بر این، مطالعات کار حاضر نشان داد که برای سوخت متان، انتخاب گونه‌های اکسیژن، اتان و رادیکال H_2O_2 نیز تأثیر قابل توجهی بر بهبود فرایند کاهش خواهد گذاشت. بنابراین، آنها نیز به گونه‌های هدف اضافه شدند. در هریک از نقاط نمونه‌برداری، گونه‌های مهم عبارت‌اند از اجتماع شش مجموعه وابسته متناظر با شش گونه هدف، و در کل در یک شرایط عملکردی دلخواه، کل گونه‌های مهم عبارت‌اند از اجتماع تک‌تک گونه‌های مهم حاصل از تمامی نقاط نمونه‌برداری.

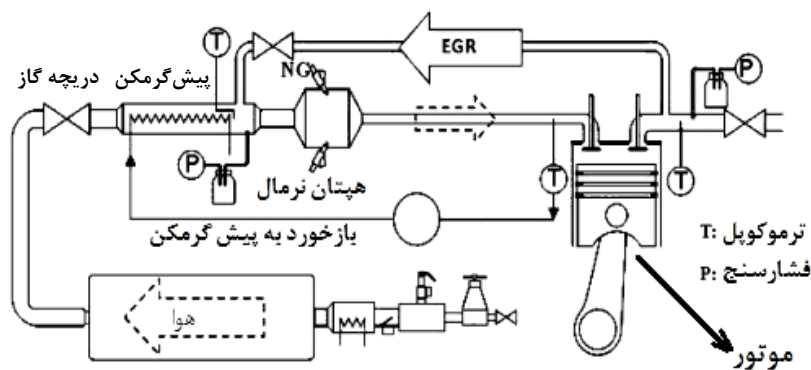
برای فرایند کاهش اتوماتیک، کدی در زبان فرترن نگاشته شد. برای هریک از شرایط عملکردی، کاهش درون یک حلقه محدود صورت می‌پذیرد، بدین صورت که ابتدا کد کاهش، زیربرنامه شبیه‌سازی موتور را فراخوانی کرده و با خواندن اطلاعات لازم از آن (کمیت‌های موجود در معادله ۴)، به‌ازای یک ε اولیه کوچک، گونه‌های مهم در آن شرایط عملکردی را شناسایی کرده، و سپس واکنش‌های زائد را با توجه به این گونه‌های مهم، شناسایی و حذف می‌کند. نتیجه این کار، تشکیل یک مکانیزم کاهش‌یافته موقتی برای این مقدار ε است. اکنون این مکانیزم جدید به زیربرنامه شبیه‌سازی موتور HCCI بازگردانده می‌شود تا شبیه‌سازی‌ها براساس آن صورت گرفته و تطابق یا عدم تطابق نتایج آن با نتایج مکانیزم مفصل مشخص شود. وظیفه

تشخیص این تطابق را معیارهای تشخیصی خطا بر دوش دارند. در کار حاضر، نیز همانند کار شی و همکارانش، سه پارامتر فشار بیشینه، زاویه میل‌لنگی که در آن ۵۰ درصد آزادسازی گرما اتفاق افتاده است (CA50) و بیشینه گرمای آزاد شده تجمعی به‌عنوان معیارهای تشخیصی خطا انتخاب شدند. روش کار به این ترتیب است که چنانچه اختلاف نتایج فشار بیشینه، CA50 و بیشینه گرمای آزاد شده به‌ترتیب کمتر از ۳ درصد، ۱/۵ درجه میل‌لنگ و ۳ درصد باشند، مکانیزم کاهش‌یافته موقتی حاصل از این مرحله، معتبر قلمداد می‌شود. سپس مقدار ε اندکی افزایش یافته و مکانیزم جدید با استفاده از این حد خطای جدید به‌دست می‌آید. این روند آنقدر ادامه می‌یابد تا معیارهای تشخیصی خطا، نقض میزان مجاز را گزارش کنند، در این صورت حلقه کاهش به‌زای چند مرحله محدود دیگر (۳ تا ۵ مرحله) ادامه یافته و در صورت ادامه نقض مقادیر خطای مجاز، برنامه دستور خروج از حلقه کاهش را صادر کرده و آخرین مکانیزم کاهش‌یافته موقتی معتبر را در خروجی به‌عنوان مکانیزم کاهش‌یافته نهایی در آن شرایط عملکردی ارائه می‌کند.

کار شی و همکارانش کار ارزشمندی است که مبنای کاهش مکانیزم آن، شرایط احتراق در موتور HCCI است. لذا کار حاضر نیز در واقع ادامه همان کار با مکانیزم‌های دیگر است. با این وجود، کار حاضر تفاوت‌های اساسی با کار قبلی دارد که باعث شده است شبیه‌سازی موتور HCCI نزدیک‌تر به واقعیت صورت پذیرد. از جمله این تفاوت‌ها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد: استفاده از مدل احتراقی نزدیک‌تر به واقعیت، در نظر گرفتن انتقال حرارت، در نظر گرفتن اثر پدیده اختلاط میان گازهای باقی‌مانده از سیکل قبلی (داغ) با مخلوط ورودی جدید به سیلندر (سرد) و لذا تنظیم صحیح دمای اولیه با اقتباس از اصلاحیه کانگسریپارپ و چکل بر رابطه انتقال حرارت موتور [۳۵]، و در نهایت اعتبارسنجی نتایج مدل با مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته.

نتایج و بحث

شکل ۳ طرحواره آزمایشگاهی موجود در دانشگاه آلبرتا را نشان می‌دهد که داده‌های مورد نیاز برای مدل‌سازی موتور HCCI از آن به‌دست آمده‌اند. موتور مورد استفاده یک موتور تحقیقاتی CFR^۱ با نسبت تراکم متغیر است، که مشخصات آن در جدول ۱ نشان داده شده است. در این پژوهش نسبت تراکم موتور برای سوخت‌های گاز طبیعی و هپتان نرمال به‌ترتیب برابر با ۱۷/۲۵ و ۱۱/۵ تنظیم شده است.



شکل ۳- طرحواره تجهیزات آزمایشگاهی موتور HCCI در دانشگاه آلبرتا [۷]

شایان ذکر است که داده‌های این پژوهش یک بار براساس گاز طبیعی خالص و بار دیگر بر اساس هپتان نرمال خالص به‌دست آمده‌اند. جدول ۲ ترکیب سوخت گاز طبیعی مورد استفاده را نشان می‌دهد. از این جدول پیداست که بخش عمده

ترکیب سوخت گاز طبیعی را متان تشکیل می‌دهد. بنابراین، در شبیه‌سازی احتراق در موتور HCCI با استفاده از مدل تک‌منطقه‌ای، گاز طبیعی مورد استفاده با متان خالص تقریب زده شد. همان‌طور که قبلاً نیز بیان شد، از مکانیزم‌های GRI-Mech 3.0 [۳۶] و گالوویچف [۳۷] به‌ترتیب برای مدلسازی احتراق متان و هپتان نرمال استفاده شد. شرایط آزمایشگاهی مورد استفاده در جدول ۳ نشان داده شده‌اند. در این جدول هشت آزمون مختلف آورده شده‌اند. چهار آزمون اول مربوط به سوخت گاز طبیعی بوده و مابقی مربوط به هپتان نرمال هستند. ذکر این نکته ضروری است که سرعت دورانی موتور در همه آزمون‌ها برابر ۸۰۰ rpm بود.

جدول ۱- مشخصات موتور CFR

مشخصات	پارامتر
Waukesha CFR	مدل موتور
۱	تعداد سیلندر
آب	سیال خنک‌کاری
سرسیلندر دیسکی، پیستون سرفاف	محفظه احتراق
کاملاً باز	دریچه گاز
۸۲٫۶ mm	قطر سیلندر
۱۱۴٫۳ mm	طول کورس
۶۱۲ cc	حجم جابه‌جایی
۱۷٫۲۵ برای گاز طبیعی و ۱۱٫۵ برای هپتان نرمال	نسبت تراکم
۱۴۶ CAD BTDC	زمان IVC (Inlet Valve Closing)
۱۴۰ CAD ATDC	زمان EVO (Exhaust Valve Opening)

جدول ۲- ترکیب سوخت گاز طبیعی مورد استفاده

مقدار	پارامتر
٪ ۹۵٫۳۹	کسر مولی خشک نرمال شده متان
٪ ۱٫۹۰	کسر مولی خشک نرمال شده اتان
٪ ۱٫۹۳	کسر مولی خشک نرمال شده نیتروژن
٪ ۰٫۷۸	کسر مولی خشک نرمال شده دی‌اکسیدکربن
۱۶٫۷۶ g/mole	جرم مولی
۰٫۷۴۸ kg/m ³	چگالی در شرایط استاندارد
۳٫۹۲	نسبت هیدروژن به کربن
۴۴۸۱۸kJ/kg	ارزش حرارتی پایین

پس از مشخص شدن شرایط آزمایشگاهی، امکان شبیه‌سازی احتراق HCCI با استفاده از کد مدل تک‌منطقه‌ای فراهم شد. سپس فرایند کاهش مکانیزم خودکار، به شرحی که پیش از این گفته شد، روی کد مدل تک‌منطقه‌ای اعمال شد. انتظار می‌رفت، در هریک از شرایط عملکردی، یک مکانیزم کاهش‌یافته مجزا به‌دست آید. با این حال، در عمل دیده شد که برخی از شرایط عملکردی (آزمون‌های هشت‌گانه جدول ۳) به مکانیزم‌های کاهش‌یافته مشابهی منجر می‌شوند. برای مکانیزم مفصل GRI، سه مکانیزم کاهش‌یافته به‌دست آمدند که بدین شرح‌اند: یک مکانیزم شامل ۲۹ گونه و ۱۱۷ واکنش (حاصل از آزمون‌های ۱ و ۲)، یک مکانیزم شامل ۲۵ گونه و ۱۰۱ واکنش (حاصل از آزمون ۳)، و یک مکانیزم شامل ۲۴ گونه و ۹۵ واکنش (حاصل از آزمون ۴). همان‌طور که مشاهده می‌کنید، شرایط عملکردی (۱ و ۲) به مکانیزم‌های یکسانی منجر شده‌اند. از کاهش مکانیزم گالوویچف نیز چهار مکانیزم کاهش‌یافته با اندازه‌های متفاوت حاصل شدند.

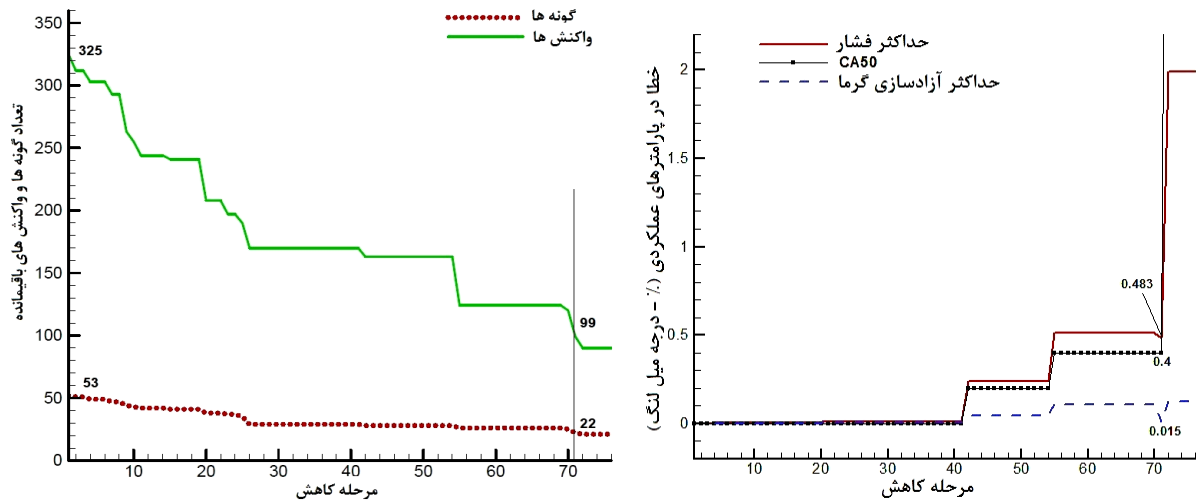
جدول ۳- شرایط آزمایشگاهی در نظر گرفته شده

آزمون	سوخت	دمای ورودی (°C)	نسبت هم‌ارزی	فشار اولیه (IVC) (بار)	فشار موثر متوسط اندیکاتوری (IMEP) (بار)	EGR (درصد)
۱	گاز طبیعی	۱۴۰	۰٫۶۹	۱٫۵۷	۳٫۸۴	۴۱٫۲
۲	گاز طبیعی	۱۴۰	۰٫۵۳	۱٫۵۵	۳٫۳۵	۳۰٫۵
۳	گاز طبیعی	۱۴۰	۰٫۴۵	۱٫۵۸	۳٫۱۸	۲۰٫۷
۴	گاز طبیعی	۱۴۰	۰٫۳۰	۱٫۵۶	۳٫۶۳	۰
۵	هپتان نرمال	۱۱۰	۰٫۶۸	۱٫۵۴	۳٫۳۳	۵۱٫۰
۶	هپتان نرمال	۱۱۰	۰٫۴۱	۱٫۵۵	۳٫۴۳	۴۰٫۷
۷	هپتان نرمال	۱۱۰	۰٫۳۸	۱٫۵۴	۳٫۶۴	۱۹٫۸
۸	هپتان نرمال	۱۱۰	۰٫۲۶	۱٫۵۷	۳٫۳۹	۰

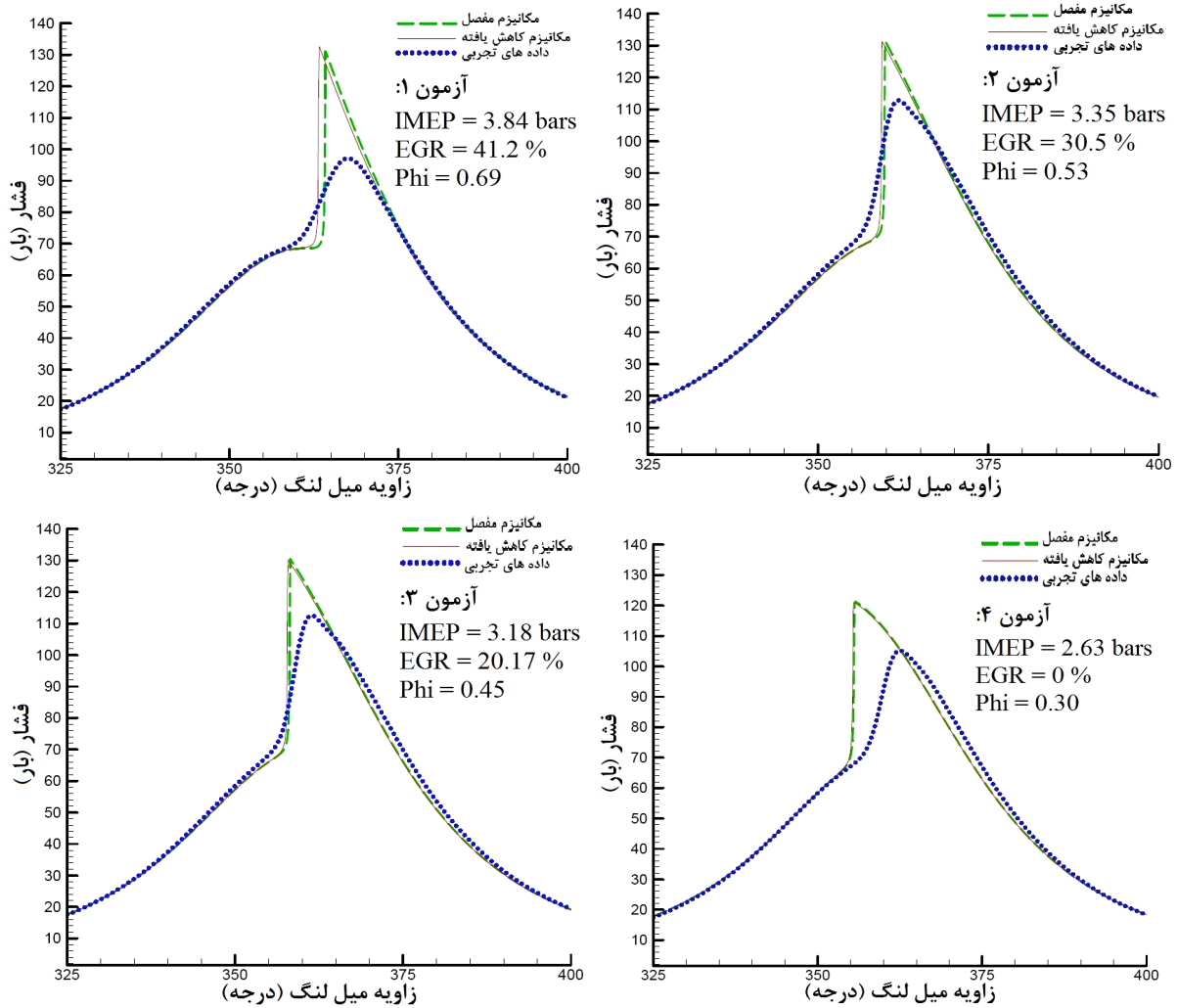
بحث بعدی این بود که از میان سه مکانیزم کاهش یافته حاصل از GRI و چهار مکانیزم کاهش یافته حاصل از گالوویچف، کدام مکانیزم‌ها به‌عنوان مکانیزم‌های کاهش یافته نهایی معرفی شوند. یک تصور اولیه این بود که مکانیزم‌های بزرگ‌تر، همواره جامع‌تر بوده و شرایط کارکردی گسترده‌تری را هم پوشش می‌دهند، اما همان‌طور که شی و همکارانش نیز اشاره می‌کنند، این موضوع لزوماً صحیح نیست [۳۱]. در واقع چون گونه‌ها و واکنش‌های به‌دست آمده از هر آزمون در حالت کلی متفاوت‌اند، ممکن است گونه‌ها و واکنش‌های مهمی در مکانیزم‌های کوچک‌تر وجود داشته باشند که در مکانیزم‌های بزرگ‌تر حذف شده باشند. بنابراین، تصمیم گرفته شد که برای هر یک از این سه مکانیزم کاهش یافته متان و چهار مکانیزم کاهش یافته هپتان، شبیه‌سازی موتور HCCI در همه چهار شرایط عملکردی متناظر انجام شده و سپس در مورد نتایج عملکرد و زمان محاسباتی آن‌ها ارزیابی به‌عمل آید. پس از انجام این شبیه‌سازی‌ها برای متان، مشخص شد که عملکرد هر سه مکانیزم کاهش یافته بسیار نزدیک به یکدیگر است، به‌طوری که می‌توان از تفاوت بسیار ناچیز آن‌ها با یکدیگر صرف‌نظر کرد. بنابراین مکانیزم به‌دست آمده از شرایط آزمایشگاهی ۴، به‌دلیل اندازه کوچک‌تر (۲۴ گونه و ۹۵ واکنش) و لذا زمان محاسباتی کمترش (تنها ۱۴ ثانیه به‌ازای یک سیکل کاری موتور)، به‌عنوان مکانیزم کاهش یافته نهایی پذیرفته شد. انجام روند مشابهی برای هپتان، به انتخاب مکانیزم کاهش یافته حاصل از آزمون ۸ (شامل ۴۲ گونه و ۲۴۶ واکنش) انجامید؛ هرچند که این مکانیزم کوچک‌ترین نبود. بنابراین به‌طور خلاصه می‌توان گفت فرایند کاهش مکانیزم خودکار توانست اندازه مکانیزم GRI را از ۵۳ گونه و ۳۲۵ واکنش به ۲۴ گونه و ۹۵ واکنش، و اندازه مکانیزم گالوویچف را از ۵۷ گونه و ۲۹۰ واکنش به ۴۲ گونه و ۱۴۶ واکنش تقلیل دهد. بدیهی است مکانیزم گالوویچف، به‌دلیل اینکه خود ذاتاً کاهش یافته قلمداد می‌شود، قابلیت کاهش کمتری داشته است.

شکل ۴، به‌عنوان نمونه، فرایند کاهش انجام‌شده در شرایط آزمون ۴، برای رسیدن به مکانیزم کاهش یافته ۹۵ واکنشی متان را نشان می‌دهد. در نمودار سمت چپ، تعداد گونه‌ها و واکنش‌های باقی‌مانده در هر مرحله از فرایند کاهش و در نمودار سمت راست، مقادیر متناظر خطای گزارش‌شده توسط معیارهای تشخیص خطا نشان داده شده‌اند. همان‌طور که در شکل مشخص است، با پیشروی فرایند، از تعداد گونه‌ها و واکنش‌های باقی‌مانده کاسته می‌شود. در مرحله ۷۱ از فرایند کاهش اتوماتیک، اندازه مکانیزم به ۲۲ گونه و ۹۹ واکنش رسیده است، ضمن اینکه مقادیر خطا در حدی بسیار نازل (در بیشترین حالت حدود ۰/۵ درصد برای فشار ماکزیموم) قرار دارند. از این مرحله به بعد، به‌ازای یک کاهش جزئی بیشتر، خطا در محاسبه CA50 به‌طرز چشمگیری افزایش می‌یابد (تا حدود ۶ درجه میل‌لنگ) و لذا مکانیزم به‌دست آمده معتبر نخواهد بود. با بازگشت به مکانیزم مرحله ۷۱، و حذف چهار واکنش زائد دیگر و اضافه‌کردن گونه‌های لازم N₂ و Ar به آن، اندازه نهایی ۲۴ گونه و ۹۵ واکنش حاصل گشت.

شکل ۵ روند تغییرات فشار درون سیلندر پیش‌بینی شده برحسب زاویه میل‌لنگ حاصل از مکانیزم کاهش یافته متان (۹۵ واکنشی) را در مقایسه با مکانیزم مفصل متناظر (GRI-Mech3.0) نشان می‌دهد.



شکل ۴- اندازه مکانیزم و مقادیر خطای متناظر در هر مرحله از کاهش (آزمون ۴)

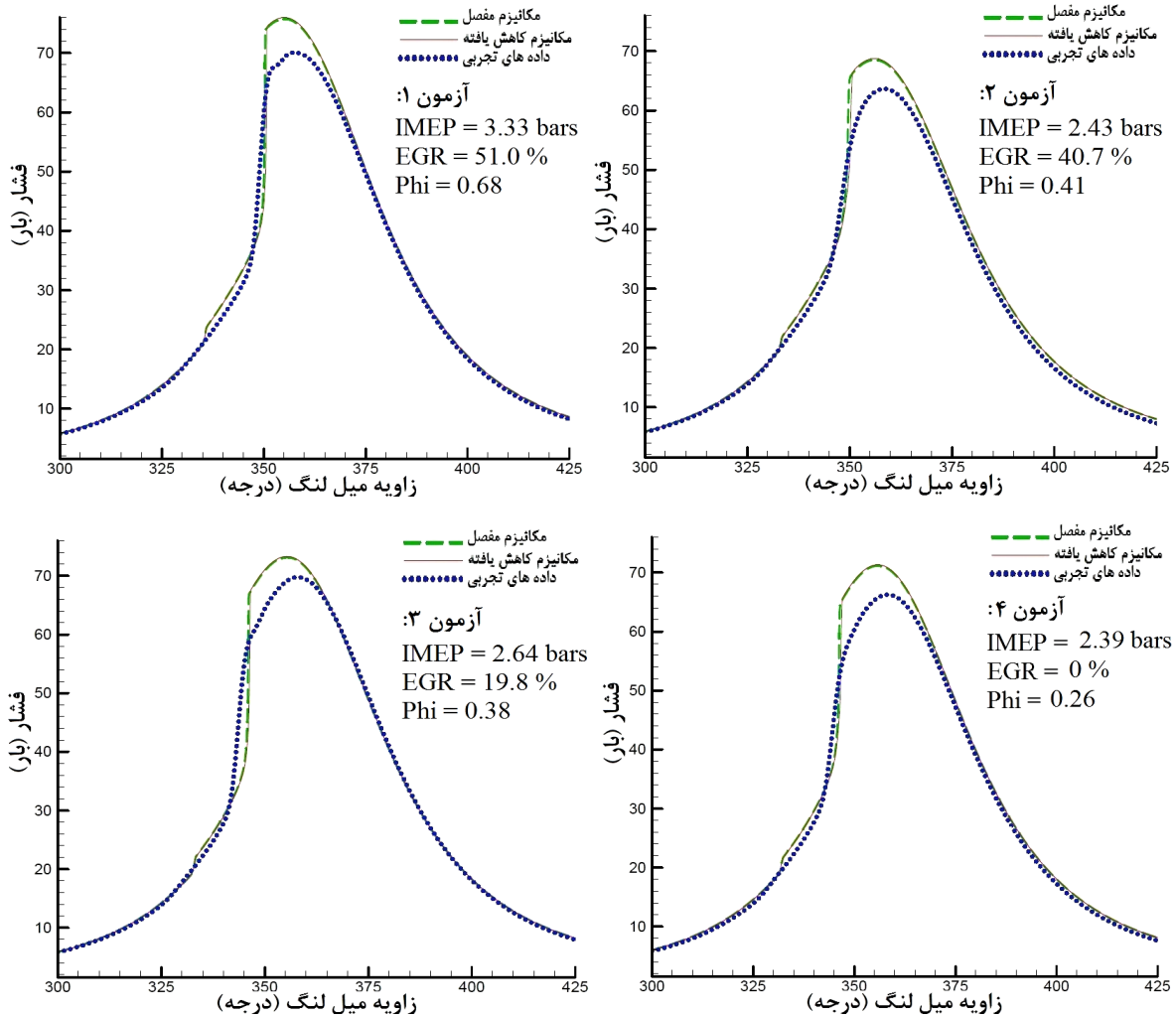


شکل ۵- مقایسه تغییرات فشار درون سیلندر حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش یافته با نتایج تجربی متناظر (متان)

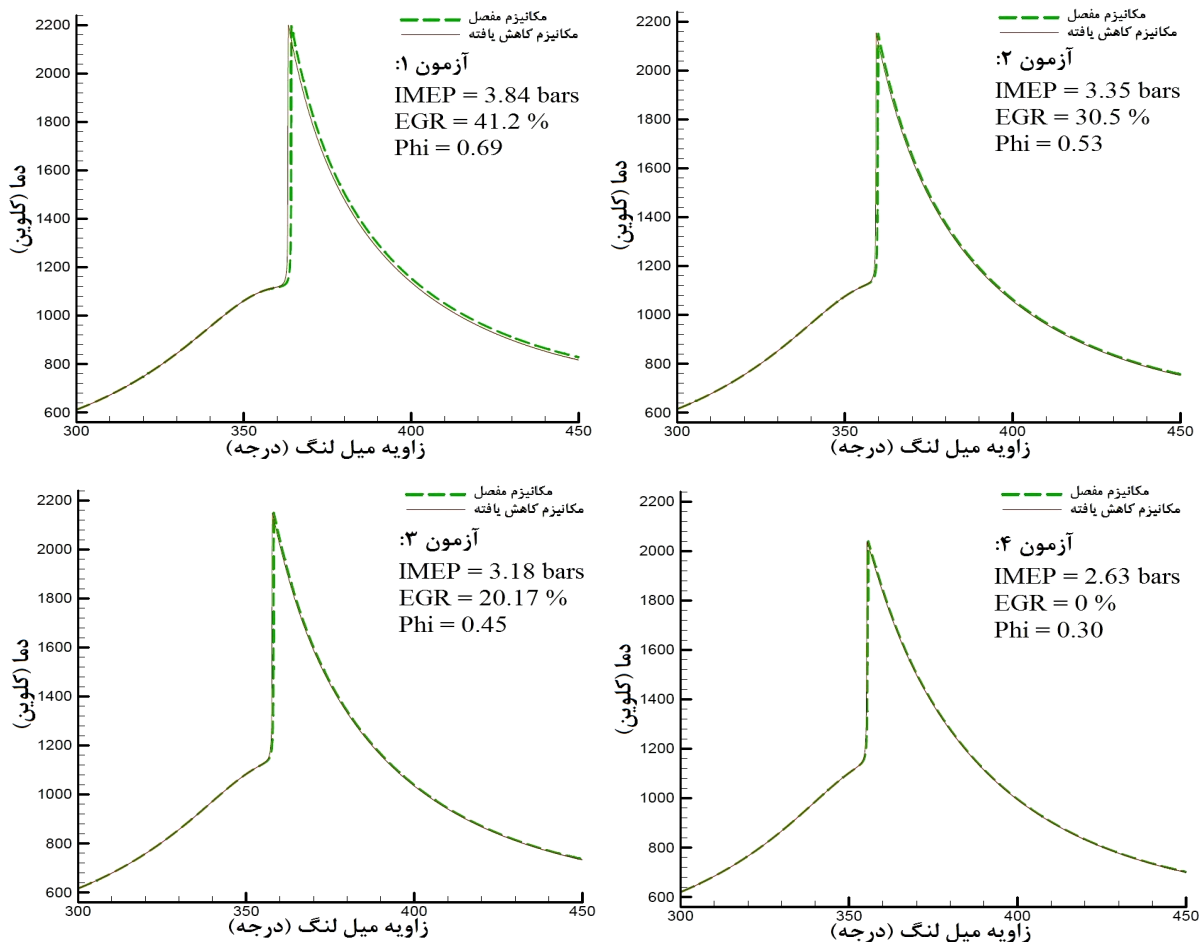
چهار شرایط عملکردی اول (جدول ۳) پوشش داده شده و در هر آزمون، نتایج تجربی نیز جهت صحت‌گذاری نتایج مدل تک‌منطقه‌ای نشان داده شده‌اند. از شکل مشخص است که دقت مکانیزم کاهش‌یافته در پیش‌بینی تغییرات فشار بسیار بالاست. علاوه بر این، در تمامی شرایط، پیش‌بینی‌های مدل تک‌منطقه‌ای، چه با مکانیزم مفصل و چه با مکانیزم کاهش‌یافته، تطابق بالایی با داده‌های تجربی دارند.

شکل ۶ تغییرات فشار درون سیلندر پیش‌بینی شده برحسب زاویه میل‌لنگ حاصل از مکانیزم کاهش‌یافته هپتان نرمال (۱۴۶ واکنشی) را در مقایسه با مکانیزم مفصل متناظر (گالوویچف) نشان می‌دهد. چهار شرایط عملکردی دوم (جدول ۳) پوشش داده شده و در هر آزمون، نتایج تجربی نیز جهت صحت‌گذاری نتایج مدل تک‌منطقه‌ای نشان داده شده‌اند. از شکل مشخص است که دقت مکانیزم کاهش‌یافته در پیش‌بینی تغییرات فشار بسیار بالاست. علاوه بر این در تمامی شرایط، پیش‌بینی‌های مدل تک‌منطقه‌ای، چه با مکانیزم مفصل و چه با مکانیزم کاهش‌یافته، تطابق بالایی با داده‌های تجربی دارند.

شکل ۷ روند تغییرات دمای درون سیلندر برحسب زاویه میل‌لنگ، حاصل از مکانیزم کاهش‌یافته متان در مقایسه با نتایج مکانیزم مفصل متناظر را در شرایط عملکردی مختلف نشان می‌دهد. مشخص است که مکانیزم کاهش‌یافته در تمامی شرایط روند دما را با دقت بالایی پیش‌بینی می‌کند.



شکل ۶- مقایسه تغییرات فشار درون سیلندر حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته با نتایج تجربی متناظر (هپتان نرمال)



شکل ۷- مقایسه تغییرات دمای درون سیلندر حاصل از مکانیزمهای مفصل و کاهش یافته (متان)

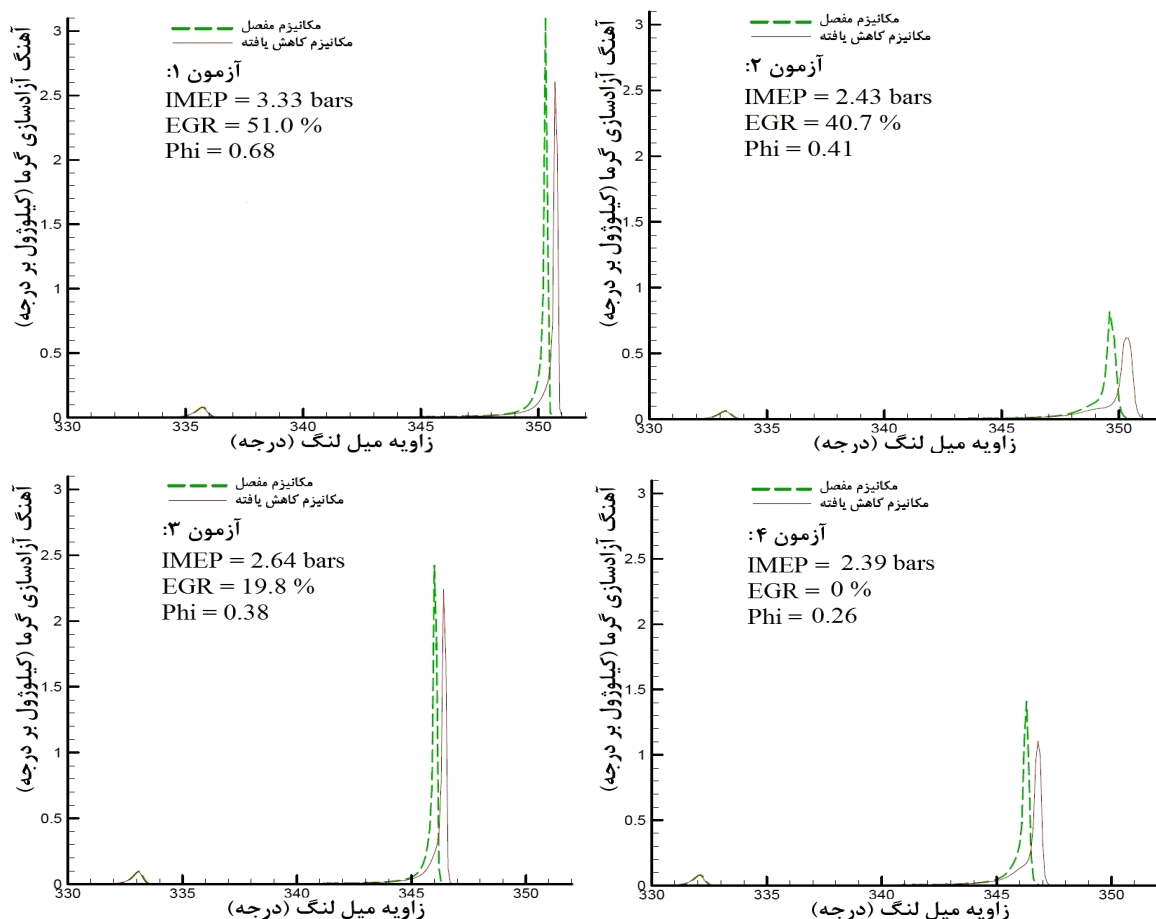
مقایسه تغییرات آهنگ آزادسازی گرمای حاصل از مکانیزم کاهش یافته هپتان نرمال با مکانیزم مفصل متناظر در شکل ۸ به تصویر کشیده شده است. علاوه بر مشاهده تطابق بسیار بالا بین منحنی‌ها، از این نمودارها می‌توان فهمید که در تمامی شرایط فرایند آزادسازی گرما بسیار سریع است. علاوه بر این، فرایند آزادسازی گرمای مرحله اول، که در احتراق آلکان‌های نرمال نسبتاً سنگینی مثل هپتان نرمال اتفاق می‌افتد، نیز کاملاً در شکل مشهود است. بنابراین، می‌توان گفت توانایی مدل تک‌منطقه‌ای از پیش توسعه یافته، که در این پژوهش نیز به‌عنوان پایه کاهش مکانیزم مورد استفاده قرار گرفت، در پیش‌بینی ویژگی‌های احتراق HCCI بالاست.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، رویکرد خودکاری جهت کاهش مکانیزم‌های سینتیک شیمیایی متان و هپتان نرمال برای شبیه‌سازی احتراق در موتور HCCI ارائه شد. به این منظور، از یک مدل تک‌منطقه‌ای جهت شبیه‌سازی احتراق موتور و روش DRGEP جهت تشخیص گونه‌های زائد استفاده شد. رویکرد حاضر به‌جای کاهش تک‌مرحله‌ای از کاهش تدریجی به‌همراه کنترل خطای کاهش در هر مرحله استفاده کرد. پس از اجرای فرایند کاهش در بازه وسیعی از شرایط کارکردی موتور، نتایج زیر به‌دست آمدند:

- ۱- تعداد گونه‌ها و واکنش‌ها در هر دو مکانیزم سینتیک شیمیایی کاهش چشمگیری یافتند. برای مکانیزم مفصل متان، به‌دلیل جامع بودن مکانیزم، این کاهش بسیار چشمگیرتر (بیش از سه برابر) بود.

- ۲- مکانیزم‌های کاهش‌یافته حاصل قادرند پیش‌بینی‌های مکانیزم‌های مفصل متناظر را با دقت بسیار بالایی تکرار کنند. نشان داده شد که خطاهای کاهش گزارش‌شده از معیارهای تشخیص خطا کمتر از ۱ درصدند.
- ۳- هدف اصلی این پژوهش، کاهش زمان محاسباتی، نیز محقق شد. زمان محاسباتی مدل تک‌منطقه‌ای حاضر حدود چهار برابر کاهش یافت، به طوری که از مقادیر متوسط به ترتیب ۵۲ ثانیه و ۵۸ ثانیه برای متان و هپتان، به مقادیر به ترتیب ۱۴ ثانیه و ۳۱ ثانیه رسید.



شکل ۸- مقایسه پروفایل آهنگ آزادسازی گرما حاصل از مکانیزم‌های مفصل و کاهش‌یافته (هپتان نرمال)

منابع

1. S. Onishi, S. H. Jo, K. Shoda, P. D. Jo and S. Kato, "Active Thermo-Atmosphere Combustion (ATAC): A New Combustion Process for Internal Combustion Engines," *SAE*, Paper No. 790501, 1979.
2. P. M. Najt and D. E. Foster, "Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion," *SAE*, Paper No. 830264, 1983.
3. R. H. Thring, "Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines," *SAE*, Paper No. 892068, 1989.
4. M. Fathi, R. Khoshbakhti Saray and M. D. Checkel, "Detailed Approach for Apparent Heat Release Analysis in HCCI Engines," *Fuel*, 89, 2005, pp. 2323-2330.
5. A. Yousefzadi Nobakht, R. Khoshbakhti Saray and A. Rahimi, "A Parametric Study on Natural Gas Fueled HCCI Combustion Engine using a Multi-Zone Combustion Model," *Fuel*, 90, 2011, pp. 1508-1514.
6. A. Rahimi, E. Fatehifar and R. Khoshbakhti Saray, "Development of an Optimized Chemical Kinetic Mechanism for Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion of a Fuel Blend of N-Heptane and Natural Gas using a Genetic Algorithm," *Proceedings of Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, 224, 2010, pp. 1141-1159.

7. V. Hosseini and M. D. Checkel, "Using Reformer Gas to Enhance HCCI Combustion of CNG in a CFR Engine," *SAE*, Paper No. 2006-01-3247, 2006.
8. S. Yamaoka, H. Kakuya, S. Nakagawa and T. Nogi, "A Study of Controlling the Auto-Ignition and Combustion in a Gasoline HCCI Engine," *SAE*, Paper No. 2004-01-0942, 2004.
9. S. Tanaka, F. Ayala, and J. C. Keck, "A Reduced Chemical Kinetic Model for HCCI Combustion of Primary Reference Fuels in a Rapid Compression Machine," *Combustion and Flame*, 133, 2003, pp. 467-481.
10. J. E. Dec, "A Computational Study of the Effects of Low Fuel Loading and EGR on Heat Release Rates and Combustion Limits in HCCI Engines," *SAE*, Paper No. 2002-01-1309, 2002.
11. P. Kongsereparp, M. D. Checkel and B. Kashani, "A Stand-alone Multi-Zone Model for Combustion in HCCI Engines," *ASME Internal Combustion Engine Division 2005 Fall Technical Conference, ICEF*, Ottawa, Canada, 2005.
12. H. Huang and W. Su, "A New Reduced Chemical Kinetic Model for Autoignition and Oxidation of Lean n-heptane/Air Mixtures in HCCI Engines," *SAE*, Paper 2005-01-0118, 2005.
13. O. O. Oluwole, B. Bhattacharjee, J. E. Tolsma, P. I. Barton and W. H. Green, "Rigorous Valid Ranges for Optimally Reduced Kinetic Models," *Combustion and Flame*, 146, 2006, pp. 348-365.
14. T. Lu and C. Law, "A Directed Relation Graph Method for Mechanism Reduction," *Proceedings of the Combustion Institute*, 30, 2005, pp. 1333-1341.
15. T. Lu and C. Law, "Linear Time Reduction of Large Kinetic Mechanism with Directed Relation Graph: N-Heptane and Iso-Octane," *Combustion and Flame*, 144, 2006, pp. 24-36.
16. T. Lu and C. Law, "Strategies for Mechanism Reduction for Large Hydrocarbons: N-Heptane," *Combustion and Flame*, 154, 2008, pp. 153-163.
17. T. Lu and C. Law, "On the Applicability of Directed Relation Graphs to the Reduction of Reaction Mechanisms," *Combustion and Flame*, 146, 2006, pp. 472-483.
18. Y. Xin, Z. Song, Y. Z. Tan and D. Wang, "The Directed Relation Graph Method for Mechanism Reduction in the Oxidative Coupling of Methane," *Catalysis Today*, 131, 2008, pp. 483-488.
19. T. Turanyi, "Sensitivity Analysis of Complex Kinetic Systems, Tools and Applications," *Journal of Mathematical Chemistry*, 5, 1990, pp. 203-248.
20. T. Turanyi, T. Berces and S. Vajda, "Reaction Rate Analysis of Complex Kinetic Systems," *International Journal of Chemical Kinetics*, 21, 1989, pp. 83-99.
21. H. Wang and M. Frenklach, "Detailed Reduction of Reaction Mechanisms for Flame Modeling," *Combustion and Flame*, 87, 1991, pp. 365-370.
22. M. Valorani, F. Creta, D. A. Goussis, J. C. Lee and H. N. Najm, "An Automatic Procedure for the Simplification of Chemical Kinetic Mechanisms Based on CSP," *Combustion and Flame*, 146, 2006, pp. 29-51.
23. T. Lu and C. Law, "A Criterion Based on Computational Singular Perturbation for the Identification of quasi Steady State Species: A Reduced Mechanism for Methane Oxidation with NO Chemistry," *Combustion and Flame*, 154, 2008, pp. 761-774.
24. C. Correa, H. Niemann, B. Schramm and J. Warnatz, "Reaction Mechanism Reduction for Higher Hydrocarbons by the ILDM Method," *Proceedings of the Combustion Institute*, 28, 2000, pp. 1607-1614.
25. T. Turanyi, "Reduction of Large Reaction Mechanisms," *New Journal of Chemistry*, 14, 1990, pp. 795-803.
26. P. Pepiot-Desjardins and H. Pitsch, "Systematic Reduction of Large Chemical Mechanisms," *4th Joint Meeting of the U.S. Sections of the Combustion Institute*, Philadelphia, PA, 2005.
27. P. Pepiot-Desjardins and H. Pitsch, "An Efficient Error-Propagation-Based Reduction Method for Large Chemical Kinetic Mechanisms," *Combustion and Flame*, 154, 2008, pp. 67-81.
28. L. Liang, J. G. Stevens and J. T. Farrell, "A Dynamic Adaptive Chemistry Scheme for Reactive Flow Computations," *Proceedings of the Combustion Institute*, 32, 2009, pp. 527-534.
29. L. Liang, J. G. Stevens, S. Raman and J. T. Farrell, "The Use of Dynamic Adaptive Chemistry in combustion Simulation of Gasoline Surrogate Fuels," *Combustion and Flame*, 156, 2009, pp. 1493-1502.
30. Y. Shi, L. Liang, H. W. Ge, and R. D. Reitz, "Acceleration of the Chemistry Solver for Modeling DI Engine Combustion using Dynamic Adaptive Chemistry (DAC) Schemes," *Combustion Theory and Modelling*, 14, 2010, pp. 69-89.
31. Y. Shi, H. W. Ge, J. L. Brakora and R. D. Reitz, "Automatic Chemistry Mechanism Reduction of Hydrocarbon Fuels for HCCI Engines Based on DRGEP and PCA Methods with Error Control," *Energy and Fuels*, 24, 2010, pp. 1646-1654.
32. J. Warnatz, U. Maas and R. W. Dibble, *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals; Modeling and Simulation; Experiments; Pollutant Formation*, Forth Edition, Berlin, Germany, Springer, 2006.
33. S. Vajda, P. Valko and T. Turanyi, "Principal Component Analysis of Kinetic Models," *International Journal of Chemical Kinetics*, 17, 1985, pp. 55-81.
34. S. R. Turns and S. J. Mantel, *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*, Second Edition, Singapore, McGraw-Hill, 2000.
35. P. Kongsereparp and M. D. Checkel, "Novel Method of Setting Initial Conditions for Multi-Zone HCCI Combustion Modeling," *SAE*, Paper 2007-01-0674, 2007.
36. G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner, V. V. Lissianski, and Z. Qin, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
37. V. I. Golovitchev, *Mechanisms (Combustion Chemistry)*, 2006, Available from <http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/MECH.html>

English Abstract

An Automatic Mechanism Reduction Process in Order to Model the Combustion in an HCCI Engine Fueled with Natural Gas and N-heptane

V. Mohammadi¹, R. Khoshbakhti Saray², A. Karegar Amjad³ and K. Bahlouli⁴

1- MSc., Mech. Eng., Sahand University of Technology, Sahand New City, Tabriz, Iran

2- Assoc. Prof., Mech. Eng., Sahand University of Technology, Sahand New City, Iran (Correspondent author)

3- MSc., Mech. Eng., Sahand University of Technology, Sahand New City, Tabriz, Iran

4- PhD Student, Mech. Eng., Eastern Mediterranean University, Famagusta, N. Cyprus, Turkey

(Received: 2012.9.1, Received in revised form: 2012.11.4, Accepted: 2012.11.13)

HCCI combustion engines due to their low fuel consumption and pollution have been studied by many researchers in recent years. Along with several experimental researches performed on these engines, mathematical modeling has also been utilized as a tool for prediction of their combustion, performance and pollution behaviours. Although use of detailed chemical kinetic mechanisms in the combustion models will result in a proper prediction of the above-mentioned behaviours, a significant increase in the computational time particularly for the more accurate combustion models will also occur. In order to overcome this challenge, mechanism reduction process in HCCI combustion engine conditions has been considered in the current study. In this direction, an optimized single-zone combustion model has been used as a necessary tool for simulation of combustion. Based on the studies performed in the current work, the Directed Relation Graph with Error Propagation (DRGEP) method, thanks to its low computational time while having high accuracy, has been selected as a proper method for the mechanism reduction process. Additionally, instead of the traditional single-stage reduction approach, a novel approach based on gradual reduction with error propagation has been used. Therefore, the mechanism reduction process has been executed fully automatically in a wide interval of operating conditions of HCCI engine on GRI-Mech3.0 mechanism for simulation of combustion of natural gas, and on the Golovichev's mechanism for simulation of combustion of n-heptane. At the end of this process, the sizes of these two mechanisms were reduced from 53 species and 325 reactions, and 57 species and 290 reactions to 24 species and 95 reactions, and 42 species and 146 reactions, respectively. The errors caused by reduction, however, were remained less than 1 percent at all conditions.

Keywords: Mechanism reduction, DRGEP, HCCI, Natural gas, N-heptane.