

مدلسازی اندرکنش شعله پیش مخلوط با اغتشاشات میدان جریان براساس شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES) با به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی احتراق

پیام سینایی^۱، صادق تابع‌جماعت^۲ و ناصر سراج مهدیزاده^۳

۱- دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، نویسنده مخاطب (sinai@aut.ac.ir)

۲- دانشیار، دانشکده مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (sadegh@aut.ac.ir)

۳- دانشیار، دانشکده مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (seraj@aut.ac.ir)

(دریافت: ۱۳۹۲/۹/۷، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۳/۳/۵، پذیرش: ۹۳/۳/۱۷)

در این تحقیق، کارآیی شبکه‌های عصبی مصنوعی به‌عنوان عامل انتگرالگیر از دسته معادلات دیفرانسیلی غیرخطی حاکم بر سینتیک شیمیایی احتراق در مدلسازی LES شعله پیش مخلوط مغشوش نشان داده شده است. آموزش شبکه عصبی مصنوعی براساس الگوریتم آموزشی خطای پسانتشار صورت گرفته است که در آن ضرایب مدل آموزشی به‌طور دینامیکی و سازگار با توپولوژی تابع خطا معین می‌شوند. جدول بانک اطلاعاتی آموزش شبکه عصبی براساس مطالعات مستقل شعله با استفاده از مدل احتراقی زیرشبکه‌ای اختلاط خطی گردابه بنا شده است و شبکه عصبی آموزش‌دیده، به‌طور موفقیت آمیز در سینتیک شیمیایی مدلسازی LES اندرکنش اغتشاشات میدان جریان مغشوش با جبهه شعله در نسبت‌های هم‌ارزی و سطوح اغتشاشی مختلف استفاده شده است. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که زمانی که شبکه‌های عصبی مصنوعی به‌درستی آموزش داده شوند، قادرند که نرخ واکنش گونه‌های شیمیایی را با دقت بسیار بالا و با بازدهی بالاتری به‌لحاظ هزینه‌های محاسباتی حافظه و زمان نسبت به روش‌های رایج انتگرالگیری مستقیم و جداول جستجوی مقادیر پیش‌بینی کنند. نتایج حل عددی میدان جریان نیز تطابق کاملی با نتایج مطالعات گذشته نشان می‌دهند.

کلیدواژگان: شعله پیش مخلوط، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ، شبکه عصبی مصنوعی، سینتیک شیمیایی

مقدمه

به‌طور کلی احتراق مغشوش را می‌توان تغییر شکل پیوسته جبهه محلی شعله به‌وسیله گردابه‌هایی دانست که در دامنه‌های مختلفی از مقیاس‌های زمانی و مکانی توزیع شده‌اند [۱]. در چنین حالتی، پاسخ جبهه شعله به عواملی مانند میزان نفوذ ملکولی، پدیده انتقال در رژیم مغشوش و واکنش‌های شیمیایی صورت گرفته بستگی دارد که در آن‌ها تفکیک مشخص و دقیق مقیاس‌های زمانی و طولی امکان‌پذیر نیست. اندرکنش صورت‌گرفته مابین اغتشاش جریان و جبهه شعله در نهایت می‌تواند منجر به پدیده‌های پیچیده غیرپایای متفاوتی مانند خاموشی و بازاشتعالی شود.

در تحلیل عددی جریان‌های واکنشی مغشوش از دیدگاه ترموشیمیایی باید اطلاعات کافی در زمینه گونه‌های شیمیایی و به‌ویژه گونه‌های رادیکالی برای محاسبه دقیق اندرکنش توربولانس جریان و شعله در دسترس باشد. به‌طور عمومی، پیش‌بینی دقیق میدان‌های اسکالر و برداری در احتراق مغشوش بسیار چالش‌برانگیز بوده و نیازمند حل سه‌بعدی و غیرپایای میدان جریان واکنشی مغشوش است. شبیه‌سازی عددی مستقیم (DNS)^۱، علی‌رغم توسعه چشمگیر در توانایی‌های محاسبات عددی، بسیار چالش‌برانگیز است، که دلیل اصلی این مشکل نیازمندی شبیه‌سازی عددی مستقیم به شبکه‌بندی‌های بسیار ریز است که انجام کلیه محاسبات لازم برای چنین شبکه‌بندی‌هایی از حیثه قابلیت‌های رایانه‌ها خارج است [۲]. به این ترتیب پیشرفت‌های

چشمگیری در روش‌هایی مانند شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ (LES)^۱ حاصل شده است. هدف این رهیافت به‌دست آوردن فرآیندهای وابسته به زمان است که در آن فرآیندهای دارای مقیاس‌های کوچک شبیه‌سازی می‌شوند و فرآیندهایی که در مقیاس‌های بزرگ رخ می‌دهند به‌طور مستقیم حل می‌شوند.

یکی از بزرگ‌ترین مشکلاتی که برای هر دو روش ذکرشده بالا در حل جریان‌های واکنشی وجود دارد، ارائه یک بیان مشخص از سینتیک شیمیایی فرآیندهای حاکم بر واکنش است. جهت محاسبه تغییرات در ساختار گونه‌های شیمیایی در یک فرآیند واکنشی، یک سیستم معادلات دیفرانسیلی باید حل شود، به‌طوری که اندازه این سیستم معادلات به تعداد گونه‌های شیمیایی درگیر در مکانیزم شیمیایی واکنش بستگی دارد. به‌عنوان نمونه برای بیان فضای حالت ترموشیمیایی احتراق متان در حالت مکانیزم کامل، ۵۳ گونه شیمیایی و ۳۲۵ واکنش ابتدایی باید مورد نظر قرار گیرد [۳]. همچنین، از آنجایی که گونه‌های اصلی و رادیکالی دامنه‌های متفاوتی از مقیاس‌های زمانی دارند، فرآیند حل دسته معادلات دیفرانسیلی حاکم بر تغییرات گونه‌های شیمیایی نیازمند به‌کارگیری روش‌های مخصوص حل سیستم معادلات دیفرانسیلی سفت^۲ است که بار هزینه‌های محاسباتی را دوچندان می‌کند. بنابراین، برای یک مکانیزم شیمیایی کامل، محاسبات سینتیک شیمیایی بسیار زمان‌بر است و در کاربردهای مهندسی جنبه عملی خود را از دست می‌دهد [۳،۴].

با توجه به موانع و مشکلاتی که مکانیزم‌های شیمیایی کامل و کاهش‌یافته پیش روی مهندسان قرار می‌دهد، روش‌های جدیدتری مانند ILDM^۳ [۵] و ISAT^۴ [۶] که برپایه جدول‌بندی اطلاعات اند جهت محاسبه نرخ واکنش گونه‌های شیمیایی مورد استفاده قرار می‌گیرند. این روش‌ها عموماً در مقایسه با روش انتگرالگیری مستقیم از معادلات دیفرانسیلی حاکم بر تغییرات گونه‌های شیمیایی به‌لحاظ هزینه‌های زمانی بسیار مفیدترند. روش ILDM نیازمند تولید جداول جستجوی مقادیر چندبعدی است که این جداول باید قبل از شروع محاسبات میدان جریان استفاده شوند. تعداد حالت‌های حل شده نیز در این روش باید به حد کافی باشد تا کلیه حالت‌های ممکن را در حین شبیه‌سازی جریان واقعی پوشش دهد. ولی از آنجایی که گاهی اطلاعات از پیش مشخص نیستند، این روش به تولید جداول بسیار بزرگی نیازمند است که حافظه بسیار بزرگی را اشغال می‌کند [۵]. در مورد روش ISAT نیز می‌توان گفت که از آنجایی که در این روش جداول جستجوی مقادیر به‌همراه پیشروی فرآیند شبیه‌سازی میدان جریان تولید می‌شوند، این روش در مراحل ابتدایی شبیه‌سازی چیزی جز انتگرالگیری مستقیم از معادلات دیفرانسیلی حاکم نیست.

شبکه‌های عصبی مصنوعی^۵ [۷] یا به‌طور مختصر ANN، یک رهیافت نسبتاً جدید در زمینه سینتیک شیمیایی است که هنوز به‌طور کامل کاربردهای آن در زمینه جریان‌های واکنشی مغشوش بررسی نشده است. این شبکه‌ها به‌عنوان سیستم‌های پردازشگری که به‌صورت موازی عمل می‌کنند از واحدهایی تشکیل شده‌اند که به‌شدت با یکدیگر در ارتباطند و به‌صورت دینامیکی پاسخ‌های مطلوب را برای ورودی‌های مورد نظر ارائه می‌کنند [۸]. همچنین این شبکه‌ها برخلاف رهیافت‌های موجود رایانه‌ای که غالباً بر مبنای حل معادلات عمل می‌کنند، نمونه‌ها و الگوهای رایج فرآیند آموزش فرا می‌گیرند و پیش‌بینی‌هایی را در مورد حالت‌های جدید ارائه می‌دهند.

در سال‌های اخیر شبکه‌های عصبی مصنوعی برای محاسبات جریان‌های واکنشی توسط تعدادی از محققان به‌کار گرفته شده‌اند و مزایای آن‌ها در این تحقیق‌ها به‌لحاظ هزینه‌های محاسباتی در مقایسه با سایر روش‌های موجود گزارش شده است. بلاسکو و همکاران یکی از اولین محققانی بودند که شبکه‌های عصبی مصنوعی را در محاسبات سینتیک شیمیایی به‌کار گرفتند [۹]. در این تحقیق، گزارش شده است که به‌کارگیری شبکه‌های عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی افزایش سرعت

1. Large eddy simulation
2. Stiff ODE system
3. Intrinsic low Dimensional Manifolds
4. In-Situ Adaptive Tabulation
5. Artificial Neural Networks

تا ۲۷۰۰ برابر در مقایسه با روش انتگرالگیری مستقیم را به همراه دارد. چوی و چن یک شبکه عصبی مصنوعی را برای محاسبه زمان تأخیر اشتعال مورد آموزش قرار دادند و افزایش سرعت تا ۶۰۰ برابر را گزارش کردند [۱۰]. انتگرالگیری از روش ISAT توسط شبکه‌های عصبی مصنوعی تحقیق دیگری بود که توسط چن و همکاران انجام شد که در آن شبکه عصبی مصنوعی توسط جدول ISAT مورد آموزش قرار گرفت [۱۱]. یک رهیافت مشابه توسط کاپور و همکاران مطالعه شد و به یک میدان اسکالر غیرپایا در روش LES کوپل شد [۱۲]. مهدیزاده و سینایی از یک شبکه عصبی مصنوعی جهت تخمین پارامترهای ترمودینامیکی در میدان جریان یک محفظه احتراق استفاده کردند. در این شبکه عصبی مصنوعی ورودی‌ها شامل کسر مخلوط و واریانس کسر مخلوط و خروجی‌های شبکه عصبی نیز شامل کسر جرمی گونه‌ها و دما بود [۱۳].

در این تحقیق، حل LES میدان جریان شعله پیش‌مخلوط مغشوش با به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی نرخ محدود با مکانیزم چندمرحله‌ای و چندگونه‌ای انجام گرفته است. چارچوب اصلی حل عددی در نرم‌افزار این فوم^۱ انجام گرفته است و شبکه عصبی پیش‌خور^۲ چندلایه‌ای نیز به‌طور مجزا توسط نویسندگان توسعه داده شده است. پس از آموزش دادن صحیح شبکه عصبی مصنوعی، ضرایب وزنی به‌دست آمده از فرآیند آموزش در خلال حل عددی توسط نرم‌افزار شبیه‌سازی مورد ارجاع قرار می‌گیرند تا نرخ واکنش‌های لحظه‌ای مورد نیاز را در فرآیند حل با سرعت بسیار بالاتری نسبت به روش رایج انتگرالگیری مستقیم به‌دست دهند. نهایتاً به‌دست آوردن اندرکنش‌های شعله و اغتشاشات جریان و نحوه توزیع میدان اسکالر در خلال فرآیند حل غیرپایا مورد نظر بوده است و در کنار آن به مزیت‌های استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی احتراق نسبت به روش‌های رایج اشاره شده است. هدف اصلی از انجام این مطالعه بررسی چگونگی به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی احتراق در چارچوب کدهای شبیه‌ساز میدان جریان و همچنین بررسی معایب و مزایای استفاده از تکنیک شبکه عصبی مصنوعی در قسمت سینتیک شیمیایی نسبت به سایر روش‌های رایج موجود است. در سال‌های اخیر، به‌دلیل توانایی‌های بالقوه شبکه‌های عصبی مصنوعی در تخمین توابع پیچیده، توجه محققان به استفاده از این روش در احتراق جلب شده است که نمونه‌هایی از آنها بیان شد، اما به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی در بخش سینتیک شیمیایی احتراق هنوز در مراحل ابتدایی خود قرار دارد که تحقیق حاضر به آن می‌پردازد.

فرمولاسیون و معادلات حاکم

معادلات حاکم بر میدان جریان واکنشی مغشوش در مدل‌سازی LES

در مدل‌سازی LES، متغیرهای میدان جریان به‌وسیله یک فرآیند فیلتراسیون مکانی به دو بخش مقیاس بزرگ^۳ و مقیاس زیرشبکه‌ای^۴ تجزیه می‌شوند، به طوری که متغیر f به صورت $f = \tilde{f} + f''$ تعریف می‌شود که در آن علامت (\sim) نشان‌دهنده مقیاس‌های بزرگ یا حل‌شده^۵ و علامت $(\prime\prime)$ نشان‌دهنده مقیاس‌های زیرشبکه‌ای حل‌نشده^۶ است. هر متغیر فیلترشده فاوره^۷ به صورت $\tilde{f} = \overline{\rho f} / \bar{\rho}$ مشخص می‌شود که $(\overline{\rho f})$ نشان‌دهنده فیلتراسیون مکانی براساس رابطه (۱) است.

$$\overline{\rho f(x_i, t)} = \int_D \rho f(z_i, t) G(x_i - z_i, \Delta) dz_i \quad (1)$$

در معادله (۱)، G تابع فیلتراسیون، D دامنه انتگرالگیری و Δ اندازه فیلتر مورد نظر است، به طوری که $\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$. پی از اعمال فرآیند فیلتراسیون، معادلات حاکم بر جریان سیال در شکل تراکم‌پذیر، غیرپایا و برای جریان واکنشی با حضور

1. OpenFOAM
2. Feed-forward neural network
3. Super-Grid Scale
4. Sub-Grid Scale
5. Resolved scale
6. Unresolved scale
7. Favre-filtered variable

گونه‌های شیمیایی مختلف برای بقای جرم، بقای تکانه، بقای انرژی و بقای گونه‌های شیمیایی شرکت‌کننده در واکنش به صورت زیر ارائه می‌شوند:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} &= 0 \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{p} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij} + \tau_{ij}^{sgs}] &= 0 \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [(\bar{\rho} \tilde{E} + \bar{p}) \tilde{u}_i + \bar{q}_i - \tilde{u}_j \bar{\tau}_{ji} + H_i^{sgs} + \sigma_{ij}^{sgs}] &= 0 \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_i - \bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{V}_{i,k} + Y_{i,k}^{sgs} + \theta_{i,k}^{sgs}] &= \bar{\omega}_k \end{aligned} \quad (2)$$

در معادلات (۲)، مقدار فشار فیلترشده با استفاده از معادله حالت گاز ایدئال و با صرف‌نظر کردن از مقادیر زیرشبکه‌ای دما به صورت $\bar{p} = \bar{\rho} R \tilde{T}$ محاسبه می‌شود که در آن R ثابت مخلوط گازی است. شار حرارتی \bar{q}_i به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود.

$$\bar{q}_i = -\bar{\kappa} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^{N_s} \tilde{h}_k \tilde{Y}_k \tilde{V}_{i,k} + \sum_{k=1}^{N_s} q_{i,k}^{sgs} \quad (3)$$

سرعت‌های نفوذی به وسیله قانون نفوذ فیک^۱ و به صورت $\tilde{V}_{i,k} = (-\bar{D}_k / \tilde{Y}_k) (\partial \tilde{Y}_k / \partial x_i)$ تخمین زده می‌شوند [۲]. مقدار انرژی کل از رابطه $\tilde{E} = \tilde{e} + \frac{1}{2} \tilde{u}_k \tilde{u}_k + k^{sgs}$ محاسبه می‌شود که در آن \tilde{e} انرژی داخلی فیلترشده و k^{sgs} انرژی جنبشی زیرشبکه‌ای است. همچنین، در دسته معادلات (۲)، جمله‌های زیرشبکه‌ای، که برای بسته‌شدن دسته معادلات نیازمند مدلسازی‌اند، به ترتیب عبارت‌اند از: تنش برشی زیرشبکه‌ای (τ_{ij}^{sgs})، شار آنتالپی زیرشبکه‌ای (H_i^{sgs})، کار لزج زیرشبکه‌ای (σ_{ij}^{sgs})، شار انتقالی گونه‌های شیمیایی ($Y_{i,k}^{sgs}$)، شار حرارتی زیرشبکه‌ای ($q_{i,k}^{sgs}$)، نرخ واکنش فیلترشده گونه‌های شیمیایی ($\tilde{\omega}_k$) و شار نفوذی زیرشبکه‌ای گونه‌های شیمیایی ($\theta_{i,k}^{sgs}$).

بستن معادلات تکانه و انرژی

در تحقیق حاضر، مدل زیرشبکه‌ای لزجت گردابه‌ای^۲ $\nu_t = C_\nu (k^{sgs})^{1/2} \bar{\Delta}$ جهت محاسبه تنش برشی زیرشبکه‌ای (τ_{ij}^{sgs}) و شار آنتالپی زیرشبکه‌ای (H_i^{sgs}) استفاده شده است که در آن، $\bar{\Delta}$ مقیاس قطع شبکه^۳ است. برای انرژی جنبشی زیرشبکه‌ای (k^{sgs})، معادله انتقالی زیر حل می‌شود:

$$\frac{\partial \bar{\rho} k^{sgs}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i k^{sgs}) = P^{sgs} - \epsilon^{sgs} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\bar{\rho} \nu_t}{Pr_t} \frac{\partial k^{sgs}}{\partial x_i} \right) \quad (4)$$

که در آن $P^{sgs} = -\tau_{ij}^{sgs} \partial \tilde{u}_i / \partial x_j$ و $\epsilon^{sgs} = C_\epsilon \bar{\rho} (k^{sgs})^{3/2} / \bar{\Delta}$ به ترتیب جمله‌های تولید^۴ و اضمحلال^۵ زیرشبکه‌ای اغتشاش‌اند. نهایتاً تنش برشی زیرشبکه‌ای (τ_{ij}^{sgs}) و شار آنتالپی زیرشبکه‌ای (H_i^{sgs}) به ترتیب به صورت $\tau_{ij}^{sgs} = -2\bar{\rho} \nu_t (\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij}) + \frac{2}{3} \bar{\rho} k^{sgs} \delta_{ij}$ و $H_i^{sgs} = -\bar{\rho} (\nu_t / Pr_t) (\partial \tilde{H} / \partial x_i)$ در روش جاری جهت بستن معادله تکانه، مقادیر ضرایب C_ν ، C_ϵ و Pr_t به ترتیب برابر ۰/۰۶۷، ۰/۹۱۶ و ۱/۰ اختیار می‌شوند [۲، ۱۴]. همچنین، مطالعات LES گذشته نشان می‌دهد که کار لزج زیرشبکه‌ای (σ_{ij}^{sgs}) در جریان‌های واکنشی می‌تواند بدون از دست دادن دقت چندانی مورد چشم‌پوشی قرار گیرد.

1. Fick's diffusion law
2. Eddy-viscosity
3. Grid cut-off scale
4. Production
5. Dissipation

مدلسازی زیرشبکه‌ای احتراق

مدل زیرشبکه‌ای احتراقی به کار گرفته شده در تحقیق حاضر براساس مدل اختلاط خطی گردابه [۱۵]. در این روش، نیازی به بستن صریح جمله‌های نرخ واکنش فیلترشده گونه‌های شیمیایی ($\bar{\omega}_k$) و شار نفوذی زیرشبکه‌ای گونه‌های شیمیایی ($\theta_{i,k}^{sgs}$) (همانند آنچه برای جمله‌های تنش برشی زیرشبکه‌ای (τ_{ij}^{sgs}) و شار آنتالیی زیرشبکه‌ای (H_i^{sgs}) انجام گرفت) نیست، بلکه این جمله‌ها به طور دقیق‌تر توسط مدل اختلاط خطی گردابه در مقیاس‌های زیرشبکه‌ای محاسبه می‌شوند. به طور کلی فرآیند احتراق و جنبش‌های مقیاس کوچک اغتشاشی همگی در مقیاس‌های بسیار کوچک میدان جریان رخ می‌دهند و روش مدلسازی اختلاط خطی گردابه این فرآیندها را در مقیاس‌های کوچک زیرشبکه‌ای به طور دقیق حل می‌کند. توانایی این مدل و موفقیت آن در مدلسازی زیرشبکه‌ای احتراقی در چارچوب شبیه‌سازی‌های LES و همچنین برتری‌های این مدل نسبت به سایر مدل‌های احتراقی رایج در کارهای گذشته تعدادی از محققان به طور مبسوط مورد توجه و بررسی قرار گرفته است [۱۴، ۱۶]. در این روش، معادله دقیق انتقال (بدون فرآیند فیلتراسیون LES) برای گونه شیمیایی k ام به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = -\rho u_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho Y_k V_{i,k}] + \dot{\omega}_k \quad (5)$$

که در آن $V_{i,k}$ سرعت نفوذی گونه شیمیایی k ام و $\dot{\omega}_k$ نرخ واکنش شیمیایی این گونه است. در چارچوب مدل اختلاط خطی گردابه، این معادله به دو معادله زیر تفکیک می‌شود:

$$\frac{Y_k^* - Y_k}{\Delta t_{LES}} = -[(\tilde{u}_i + u_i')^R] \frac{\partial Y_k^n}{\partial x_i} \quad (6)$$

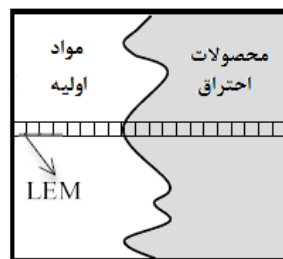
$$Y_k^{n+1} - Y_k^* = \int_t^{t+\Delta t_{LES}} -\frac{1}{\rho} [\rho(u_i')^s] \frac{\partial Y_k^n}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k V_{i,k})^n - \dot{\omega}_k^n dt' \quad (7)$$

معادله (۶) فرآیندهای مقیاس بزرگ و معادله (۷) فرآیندهای مقیاس کوچک را مدلسازی می‌کنند. در معادله (۶)، $(\tilde{u}_i)^R$ و $(u_i')^R$ به ترتیب میدان سرعت حل شده LES و نوسانات زیرشبکه‌ای میدان سرعت حل شده (که از k^{sgs} به دست می‌آید) هستند. جهت حل معادله (۵)، معادلات واکنش-نفوذ زیر در چارچوب میدان یک‌بعدی مدل اختلاط خطی گردابه برای کسر جرمی گونه‌ها و دما مورد حل قرار می‌گیرند:

$$\rho \frac{\partial Y_k^n}{\partial t^s} = F_{k, stir}^n - \frac{\partial}{\partial s} (\rho Y_k^n V_{k,s}^n) + \dot{\omega}_k^n$$

$$\rho C_p \frac{\partial T^n}{\partial t^s} = F_{T, stir}^n - \rho \left(\sum_{k=1}^{N_s} C_{p,k} Y_k^n V_{k,s}^n \right) \frac{\partial T^n}{\partial s} - \frac{\partial}{\partial s} \left(\kappa \frac{\partial T^n}{\partial s} \right) + \dot{\omega}_t^n \quad (8)$$

در شکل (۱) شمای کلی میدان جریان واکنشی پیش‌مخلوط و دامنه زیرشبکه‌های مدل اختلاط خطی گردابه نمایش داده شده است که در آن میدان یک‌بعدی زیرشبکه‌ای در راستای مواد اولیه، محصولات احتراق و جبهه شعله عبور می‌کند.



شکل ۱- شمای کلی از شعله پیش‌مخلوط و دامنه یک‌بعدی مدل اختلاط خطی گردابه (LEM) برای محاسبات زیرشبکه‌ای

در مدل اختلاط خطی گردابه، تکان‌های مقیاس کوچک اغتشاشی به‌وسیله یک روش توزیع مجدد آماری تحت عنوان نگاشت سه‌گانه^۱ حل می‌شوند [۱۵]. پایه این روش بر این اساس است که اثرات گردابه‌های اغتشاشی بر روی میدان اسکالر یا کسر جرمی گونه‌های شیمیایی به‌صورت توزیع مجدد آن‌ها بدون تغییر دادن اندازه آن‌هاست. در نگاشت سه‌گانه سه پارامتر اساسی مورد نظر است: فرکانس تکان‌های اغتشاشی (λ)، تابع احتمال دانسیته^۲ که با $f(l)$ نمایش داده می‌شود و l اندازه گردابه‌های اغتشاشی است که میدان اسکالر را متاثر می‌کند، و نهایتاً مکان گردابه اثرگذار که از توزیع یکنواخت خطی معین می‌شود. فرکانس λ از رابطه (۹) محاسبه می‌شود و تابع احتمال دانسیته از رابطه $f(l) = 5l^{-8/3} / [3(\eta^{5/3} - \Delta^{5/3})]$ به‌دست می‌آید:

$$\lambda = \frac{54 \nu \text{Re}^s (\Delta/\eta)^{5/3} - 1}{5 C_\lambda \Delta^3 1 - (\eta/\Delta)^{4/3}} \quad (9)$$

در این روابط $\text{Re}^s = u'\Delta/\nu$ ، $\eta = N_\eta \Delta \text{Re}^{s-3/4}$ ، $C_\lambda = 0.067$ و مقدار $u' = (2k^s/3)^{1/2}$ نیز به‌صورت $u' = (2k^s/3)^{1/2}$ از انرژی جنبشی زیرشبکه‌ای استخراج می‌شود. در انتهای فرآیندهای زیرشبکه‌ای مدل اختلاط خطی گردابه، کسر جرمی فیلترشده گونه‌های شیمیایی از رابطه زیر استخراج می‌شود.

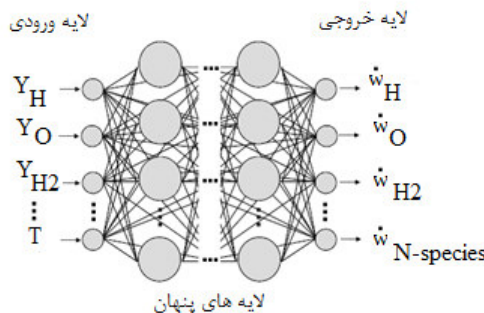
$$\tilde{Y}_k = \frac{\sum_{m=1}^{N_{LEM}} (\rho Y_k)^m}{\sum_{m=1}^{N_{LEM}} \rho^m} \quad (10)$$

شبکه عصبی مصنوعی و الگوریتم آموزشی

شبکه‌های عصبی مصنوعی به‌عنوان سیستم‌های پردازشگر قدرتمند دینامیکی توانایی خود را در تخمین توابع به‌شدت غیرخطی به‌اثبات رسانیده‌اند و این توانایی شبکه‌های عصبی، باعث جذابیت استفاده از آن‌ها در سینتیک شیمیایی شبیه‌سازی‌های احتراقی می‌شود. این شبکه‌ها متشکل از تعدادی عوامل پردازشگر (نرون) هستند که به‌شدت با یکدیگر درگیرند. در شبکه‌های عصبی پیش‌خور چندلایه‌ای، ورودی در کل شبکه منتشر می‌شود و خروجی هر نرون از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$y_i^n = f\left(\sum_{j=1}^{K_{n-1}} w_{ij}^n y_j^{n-1} + \theta_i^n\right)_{i=1, \dots, K_n \text{ \& } n=1, \dots, N} \quad (11)$$

که در آن y_i^n خروجی نرون i ام از لایه n ام، w_{ij}^n ضریب وزنی بین نرون j ام از لایه $n-1$ ام و نرون i ام از لایه n ام است. θ_i^n مقدار بایاس^۳ برای نرون i ام از لایه n ام است و $f()$ تابع فعالسازی است. شکل ۲ شمای شبکه عصبی مورد استفاده در سینتیک شیمیایی احتراق تحقیق جاری را نمایش می‌دهد. ورودی‌های این شبکه کسر جرمی گونه‌های شیمیایی به‌همراه دما و خروجی‌های آن نرخ واکنش‌های فیلترنشده گونه‌های شیمیایی است.



شکل ۲- ساختار شبکه عصبی پیش‌خور چندلایه‌ای مورد استفاده در سینتیک شیمیایی احتراق

1. Triplet map
2. Probability density function
3. Bias

شبکه‌های عصبی مصنوعی جهت ارائه جواب دقیق از خروجی‌های مورد نظر باید به‌دقت مورد آموزش قرار گیرند. در فرایند آموزش، ضرایب وزنی طوری تنظیم می‌شوند که برای داده‌های دیگری که شبکه با آنها آموزش ندیده است پاسخ مطلوبی ارائه دهند. الگوریتم آموزشی مورد استفاده در این تحقیق، الگوریتم خطای پس‌انتشار^۱ است [۱۷]. این الگوریتم مشهورترین و کاربردی‌ترین روش آموزشی برای شبکه‌های عصبی است. این روش یک کاهش گرادینانی است که بر مبنای یافتن نقطه کمینه برای یک تابع هدف، که در اینجا تابع خطا نامیده می‌شود [۱۸]، بنا شده است. حرکت به سمت نقطه کمینه در خلال روند آموزش دیدن شبکه با اصلاح ضرایب وزنی انجام می‌گیرد. تابع خطا، E ، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E = \sum_m^q \sum_i^p (y_{i,m} - \hat{y}_{i,m})^2 \quad (12)$$

q و p به ترتیب تعداد الگوها و خروجی‌هایند و توابع محرک کلیه لایه‌ها از نوع تانژانت هیپربولیک‌اند. y و \hat{y} به ترتیب نشان‌دهنده خروجی مطلوب و خروجی شبکه عصبی‌اند. الگوریتم خطای پس‌انتشار ضرایب وزنی را مطابق رابطه زیر اصلاح می‌کند:

$$w_{ij}^n(t+1) = w_{ij}^n(t) + \eta \delta_j \hat{y}_i + \alpha [w_{ij}^n(t) - w_{ij}^n(t-1)] \quad (13)$$

به طوری که t شماره تکرار است و η و α به ترتیب نرخ آموزش و ضریب تکانه نامیده می‌شود. انتخاب صحیح این دو مقدار نقش مهمی در همگرایی و همچنین سرعت همگرایی شبکه دارد. به طوری که انتخاب صحیح این دو مقدار می‌تواند از قرار گرفتن شبکه در یک نقطه کمینه موضعی غیرواقعی جلوگیری کند. تابع δ_j تغییرات تابع خطا را در نرون j ام برحسب ورودی‌های اعمال شده به صورت $\delta_j = -\partial E / \partial \sum_i w_{ij}^n \hat{y}_i$ نشان می‌دهد. شکل صریح تابع δ_j به نوع تابع محرک انتخاب شده وابسته است و بسته به اینکه نرون j ام یک نرون خروجی باشد یا داخلی، دو شکل مختلف می‌تواند به خود بگیرد:

$$\delta_j = \begin{cases} f_j'(y_j - \hat{y}_j) & \text{اگر } j \text{ یک واحد پردازشگر خروجی باشد} \\ f_j' \sum_i \delta_i w_{ij} & \text{اگر } j \text{ یک واحد پردازشگر پنهان داخلی باشد} \end{cases} \quad (14)$$

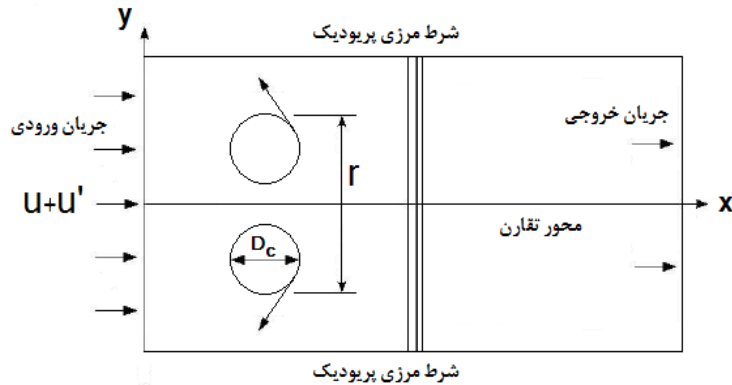
که در آن f_j' مشتق تابع محرک در نرون j ام برحسب مجموع ورودی‌هاست، به طوری که $f_j' = \partial \hat{y}_i / \partial \sum_j w_{ij} \hat{y}_j$.

شرایط شبیه‌سازی

در سینتیک شیمیایی نرخ محدود^۲ شبیه‌سازی جاری، از یک مکانیزم اسکلتی ۱۰ واکنشی با ۱۴ گونه شیمیایی [۱۹] برای احتراق سوخت گاز سنتزی PSI^۳ استفاده شده است که در آن CO_2 و H_2O به‌عنوان رقیق‌کننده^۴ در مخلوط CO-H_2 ، به‌عنوان سوخت، با اکسیدکننده هوا محترق می‌شود. از آنجا که برای احتراق سوخت گاز سنتزی PSI اجزای مختلف تشکیل‌دهنده سوخت شرایط متفاوت واکنشی را ایجاد می‌کنند، شبیه‌سازی احتراق برای این نوع سوخت به اعمال مکانیزم‌های گسترده شیمیایی (مکانیزم کامل یا مکانیزم اسکلتی) جهت دستیابی به فیزیک صحیح نیازمند است.

شکل ۳ شمای کلی میدان جریان را نمایش می‌دهد. در این شمای کلی، اندرکنش یک میدان ایزوتروپیک مغشوش با جبهه شعله پیش‌مخلوط، شعله را دستخوش نوسانات و چین و چروک‌هایی می‌کند که در بررسی اندرکنش شعله و نوسانات میدان سرعت اغتشاشی به آن تکانه‌های اغتشاشی مقیاس کوچک^۵ اطلاق می‌شود. همچنین، برای بررسی اندرکنش چین و چروک‌های شعله با تغییرات مقیاس بزرگ^۶ دو ورتکس^۷ در شرایط اولیه به میدان محاسباتی تحمیل شده است. در موارد شبیه‌سازی، $u_{c,max}$ بیشینه سرعت القائی توسط ورتکس‌ها، D_c قطر ورتکس‌ها، L_F ضخامت شعله و S_L سرعت شعله است.

1. Back propagation
2. Finite rate
3. Paul Scherrer Institut Syngas
4. Diluent
5. Small-scale turbulent stirring
6. Large-scale wrinkling
7. Vortex



شکل ۳- شمای کلی میدان محاسباتی جریان

مطالعات شبیه‌سازی مطابق داده‌های جدول ۱ براساس شبیه‌سازی‌های DNS صورت گرفته در مطالعات قبلی [۲۰] برای سه حالت آزمایشی مختلف در دو نسبت هم‌ارزی احتراقی ۰/۶ و ۰/۸ برای شدت‌های اغتشاشی u'/S_L مختلف ۵، ۱۰ و ۳۰ انجام گرفته است. در سه حالت مورد مطالعه نسبت قطر ورتکس‌ها به طول شعله D_c / L_F ثابت و برابر ۵ و همچنین نسبت بیشینه سرعت القائی ورتکس‌ها به سرعت شعله $u_{c,max} / S_L$ ثابت و برابر ۵۰ در نظر گرفته شده است.

جدول ۱- حالات مختلف پارامترهای شبیه‌سازی در بررسی اندرکنش شعله و اغتشاش جریان

ابعاد دامنه محاسباتی (L_x, L_y, L_z)	u' / S_L	$u_{c,max} / S_L$	D_c / L_F	Φ	
۳ cm × ۳ cm × ۳ cm	۵	۵۰	۵	۰/۶	تست شماره (۱)
۳ cm × ۳ cm × ۳ cm	۱۰	۵۰	۵	۰/۸	تست شماره (۲)
۳ cm × ۳ cm × ۳ cm	۳۰	۵۰	۵	۰/۶	تست شماره (۳)

تعداد ۶۴ نقطه محاسباتی در هر راستای x، y و z برای شبکه‌بندی اختیار شده است و برای زیرشبکه‌ها تعداد ۱۲ نقطه محاسباتی در هر سلول LES در نظر گرفته شده است ($N_{sub-grid} = 12$). در مقایسه با گزارش‌های DNS برای مقیاس طولی کولموگوروف (η)، چنین شبکه‌ای برای سلول‌های LES دارای اندازه ۳/۳ برابر مقیاس طولی کولموگوروف و در زیرشبکه‌ها تا ۴ برابر کوچک‌تر از مقیاس طولی کولموگوروف است. بنابراین، دقت اندازه شبکه‌بندی برای دستیابی به کوچک‌ترین مقیاس‌های اغتشاشی در میدان جریان کافی است.

پارامترهای شعله شامل ترکیب سوخت، سرعت شعله و ضخامت آن برای نسبت‌های هم‌ارزی در نظر گرفته شده در آزمایش‌ها در جدول ۲ بیان شده است.

جدول ۲- پارامترهای مورد استفاده برای شعله برای بررسی اندرکنش شعله و اغتشاش جریان

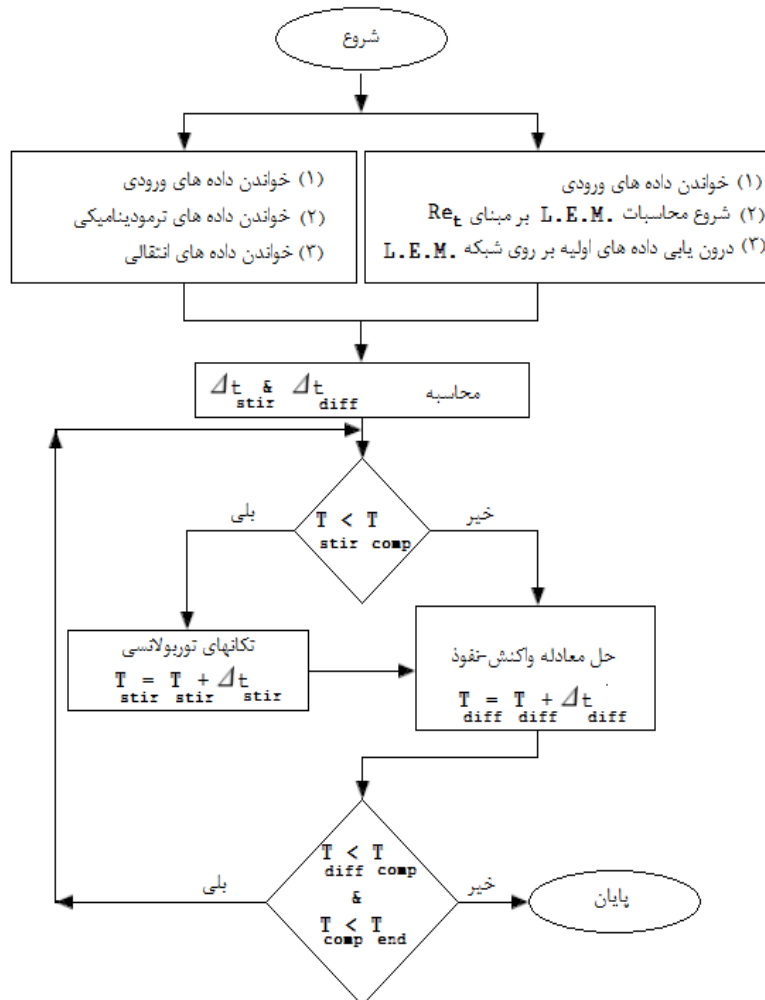
Φ	S_L [m/s]	L_F [m]	ترکیب سوخت $N_2:O_2:H_2O:CO_2:CO:H_2$
۰/۶	۰/۲۱۰۵	۰/۰۰۰۸۷۵۵	۰/۵۷۸۱ : ۰/۱۵۰۷ : ۰/۰۶۵۰ : ۰/۰۲۵۴ : ۰/۱۱۱۳ : ۰/۰۶۷۸
۰/۸	۰/۳۹۲۰	۰/۰۰۰۵۶۱۱	۰/۵۷۸۱ : ۰/۱۵۰۷ : ۰/۰۶۵۰ : ۰/۰۲۵۴ : ۰/۱۱۱۳ : ۰/۰۶۷۸

تولید الگوهای ورودی-خروجی برای آموزش شبکه عصبی

در سینتیک شیمیایی احتراق، یک دسته معادلات دیفرانسیلی به شدت غیرخطی با مقیاس‌های زمانی بسیار متفاوتی برای گونه‌های رادیکالی و گونه‌های اصلی حل می‌شود. نرخ واکنش گونه‌های شیمیایی شرکت‌کننده در مکانیزم شیمیایی به صورت رابطه (۱۲) تابعی از دما، فشار و کسر جرمی گونه‌هاست:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \dot{\omega}_k = f(T, P, Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_{species}}) \quad (15)$$

بنابراین، از منظر شبکه عصبی می‌توان یک نگاهت مابین کسر جرمی گونه‌ها و دما با نرخ واکنش‌های گونه‌ها برقرار کرد که چنین ساختاری در شمای کلی شبکه عصبی در نظر گرفته شده در این تحقیق در شکل ۲ نمایش داده شده است. از آنجا که مدل اختلاط خطی گردابه تغییرات میدان اسکالر (کسر جرمی گونه‌های شیمیایی) را در زیرشبکه‌ها به‌طور دقیق به‌دست می‌دهد، این تغییرات براساس الگوریتم ارائه‌شده در شکل ۴ جهت دربرگرفتن کلیه حالات ممکن در فضای ترموشیمیایی با حل معادله واکنش-نفوذ استخراج شده و جهت آموزش شبکه عصبی استفاده شده است. از میان بانک اطلاعاتی فضای حالت ترموشیمیایی استخراج شده از الگوریتم مورد استفاده، ۷۵ درصد از داده‌ها برای آموزش شبکه عصبی و بقیه آن برای آزمایش عملکرد شبکه در خلال فرایند آموزش استفاده شده است.



شکل ۴- الگوریتم زیرشبکه‌ای اختلاط خطی گردابه LEM برای استخراج الگوهای ورودی-خروجی آموزش شبکه عصبی با در نظر گرفتن کلیه حالات ممکن در فضای حالت ترموشیمیایی

برای تولید الگوهای آموزشی برای فرآیند آموزش شبکه عصبی مصنوعی، دامنه دما در فضای حالت ترموشیمیایی سیستم به تعداد ۱۰ بازه تقسیم‌بندی شده است. نحوه تقسیم‌بندی بدین صورت است که در نزدیکی دمای شعله بی‌دررو (که متناظر با کسر مخلوط استوکیومتریکی است) تعداد سلول‌های بیشتری قرار داده شده است که بتواند حساسیت بیشتر و شدت بیشتر غیرخطی بودن نرخ واکنش گونه را در حول و حوش کسر مخلوط استوکیومتریکی به‌طور صحیح در فرآیند آموزش شبکه عصبی مصنوعی بگنجانند. در هر یک از بازه‌های دما، حداقل تعداد ۱۰۰ هزار داده اطلاعاتی از فضای حالت ترموشیمیایی قرار داده شده است. درنهایت در حدود ۴ میلیون داده آموزشی حاصل از حل معادله واکنش-نفوذ زیرشبکه‌ای (شکل ۴) در جدول بانک اطلاعاتی آموزشی شبکه عصبی مصنوعی با حجم ۳/۰۸ گیگابایت قرار می‌گیرد.

نتایج

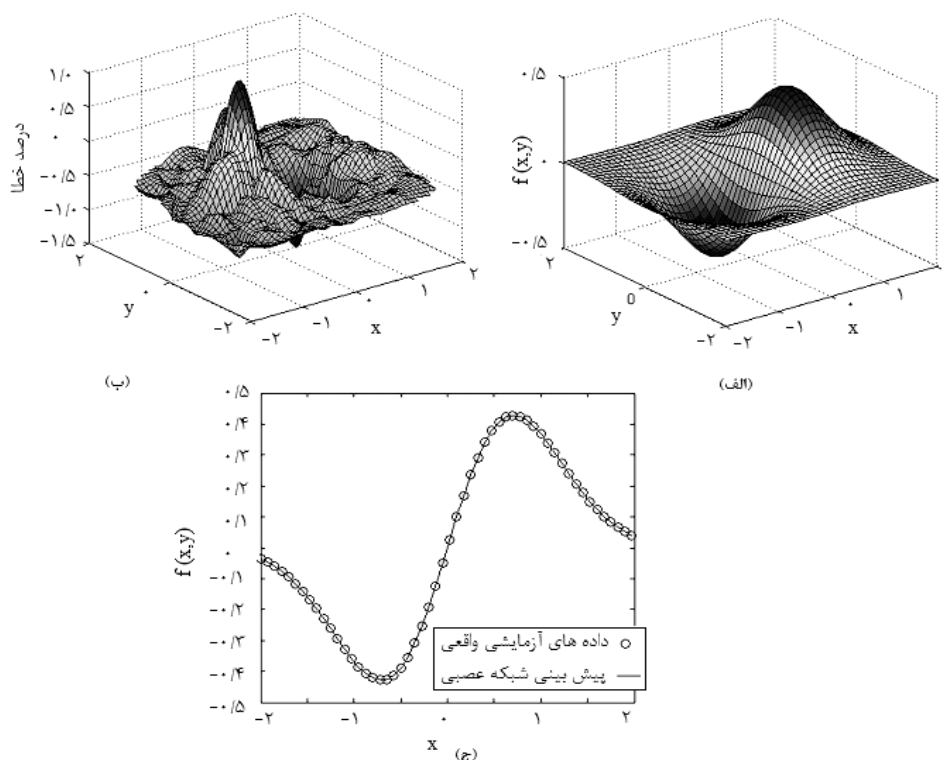
شبکه عصبی مصنوعی بهینه و سینتیک شیمیایی

از آنجا که اعتبار عملکرد شبکه عصبی مصنوعی مهم‌ترین گام در به‌کارگیری این رهیافت در تخمین توابع غیرخطی است [۲۲]، پیش از به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی به‌عنوان عامل انتگرالگیر در سینتیک شیمیایی احتراق، نتایج اعتبارسنجی عملکرد کد شبکه عصبی مصنوعی ارائه شده است. این اعتبارسنجی برای یک تابع دو متغیره دلخواه $f(x, y) = x \cdot \exp(-x^2 - y^2)$ انجام شده است. نحوه استخراج الگوهای آموزشی شبکه عصبی به دو صورت انجام گرفته است. در حالت اول بازه [۲، -۲] برای متغیرهای x و y با ۱۲ نقطه در راستای x و ۱۲ نقطه در راستای y و مجموعاً ۱۴۴ نقطه برای آموزش شبکه تقسیم‌بندی شده است. در حالت دوم مجموعاً ۳۶۰۰ نقطه در هر راستا با ۶۰ نقطه در هر یک از راستاهای x ، y انتخاب شده است. براساس بهترین عملکرد و بیشینه خطای خروجی، شبکه‌های عصبی با ساختارهای مختلف و تعداد لایه‌های پنهان متفاوت جهت تخمین این تابع مورد استفاده قرار گرفتند و درنهایت شبکه عصبی با ۳ لایه پنهان، که به ترتیب در هر یک از این لایه‌ها ۱۶، ۹ و ۵ المان پردازشگر (نرون) قرار دارد (شبکه عصبی ۱۶/۹/۵)، انتخاب شد. این شبکه زمانی که با حالت اول الگوهای آموزشی (۱۴۴ نقطه) مورد آموزش قرار می‌گیرد به‌علت تعداد کم نقاط آموزشی و پیچیدگی تابع مورد نظر در پیش‌بینی تابع دچار خطای نسبتاً محسوس می‌شود، اما نتایج نشان می‌دهد که زمانی که تعداد نقاط آموزشی به ۳۶۰۰ نقطه افزایش می‌یابد، شبکه عصبی با دقت تابع مورد نظر را پیش‌بینی می‌کند. شکل ۵-الف پیش‌بینی شبکه عصبی مورد انتخاب (که با تعداد ۳۶۰۰ نقطه آموزشی مورد آموزش قرار گرفته است) را نمایش می‌دهد. کاملاً مشخص است که این شبکه عصبی تابع مورد نظر را به شکل دقیق پیش‌بینی کرده است. در شکل ۵-ب رویه خطای آموزشی این شبکه عصبی نمایش داده شده است. بیشینه خطای موجود برابر ۰/۵۳ درصد است که مقدار بسیار قابل قبولی برای یک شبکه عصبی آموزش دیده است. در شکل ۵-ج مقایسه بین پیش‌بینی شبکه عصبی با داده‌های واقعی از تابع مورد نظر برای x های مختلف و یک مقطع ثابت y نمایش داده شده است. واضح است که شبکه عصبی به‌طور دقیق قادر به پیش‌بینی این تابع دو متغیره پیچیده غیرخطی است، لذا کد شبکه عصبی از اعتبار لازم برای به‌کارگیری در سینتیک شیمیایی به‌عنوان عامل انتگرالگیر از دسته معادلات سینتیک شیمیایی برخوردار است.

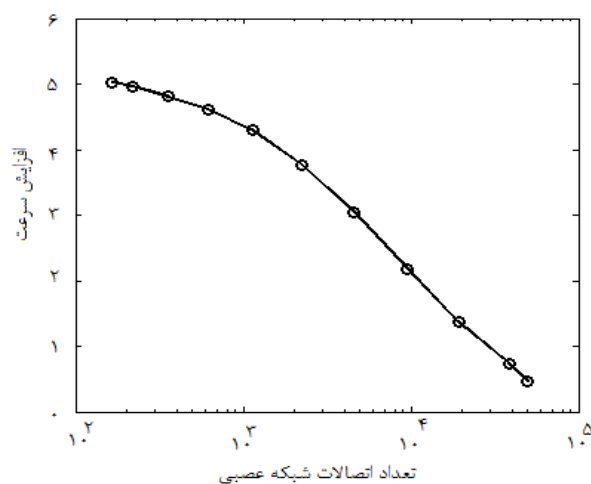
ساختار شبکه عصبی بهینه مورد استفاده در این تحقیق با به‌کارگیری شبکه‌های عصبی مختلف با ساختارهای متفاوت در تعداد لایه‌های پنهان و تعداد نرون‌های موجود در این لایه‌ها براساس انجام مصالحه^۱ مهندسی بین خطای بیشینه خروجی شبکه عصبی و همچنین میزان افزایش سرعت شبکه عصبی نسبت به حل سینتیک شیمیایی با روش انتگرالگیری مستقیم انجام گرفته است. با افزایش تعداد نرون‌های شبکه عصبی، سرعت شبکه عصبی کاهش می‌یابد و از طرفی با افزایش تعداد نرون‌های شبکه، دقت شبکه عصبی بالاتر می‌رود و خطای خروجی آن کمتر می‌شود. بنابراین، باید نقطه بهینه‌ای برای انتخاب شبکه عصبی با لحاظ کردن پارامترهای افزایش سرعت (نسبت به انتگرالگیری مستقیم) و کاهش خطا وجود داشته باشد. شکل ۶ افزایش سرعت شبکه عصبی مصنوعی نسبت به انتگرالگیری مستقیم از دسته معادلات حاکم بر سینتیک شیمیایی به‌صورت

1. Compromise

تابعی از تعداد اتصالات موجود در شبکه را نمایش می‌دهد. بهترین افزایش سرعت (کمی بیشتر از ۵ برابر) برای شبکه عصبی با تعداد حدوداً ۲۰۰ اتصال به دست می‌آید. از طرفی تعداد ۲۰۰ اتصال برای ارائه پاسخ‌های خوب با خطای کم برای چنین مکانیزم پیچیده‌ای کافی به نظر نمی‌رسد. بنابراین، از این شکل می‌توان نتیجه‌گیری کرد که با در نظر گرفتن افزایش سرعتی که حدود ۵ درصد از افزایش سرعت ایدئال این مکانیزم (کمی بیش از ۵ برابر) کمتر باشد، یک شبکه عصبی با تعداد کمتر از ۴۰۰ اتصال می‌تواند افزایش سرعت مطلوب را تامین کند.



شکل ۵- (الف) پیش‌بینی شبکه عصبی از رویه مورد نظر، (ب) درصد خطای شبکه عصبی در فرایند آموزش با بیشینه خطای ۰/۵۳ درصد، (ج) پیش‌بینی شبکه عصبی و داده‌های واقعی از تابع دومتغیره برای x های مختلف در یک مقطع y ثابت



شکل ۶- افزایش سرعت شبکه عصبی مصنوعی نسبت به انتگرالگیری مستقیم از دسته معادلات حاکم بر سینتیک شیمیایی به صورت تابعی از تعداد اتصالات موجود در شبکه

برای محاسبه سرعت روش حل انتگرالگیری مستقیم، دسته معادلات دیفرانسیلی حاکم بر سینتیک شیمیایی احتراق، با شرایط اولیه معینی که از نرم‌افزار کمکین استخراج می‌شود، محاسبه شده است. سپس زمان پاسخ‌دهی شبکه عصبی مصنوعی (با تعداد نرون‌های معین) به یک ورودی مشابه با روش انتگرالگیری مستقیم محاسبه می‌شود و نسبت این زمان در مقایسه با روش انتگرالگیری مستقیم محاسبه شده است. با تغییر معماری شبکه عصبی (تغییر تعداد نرون‌های آن) این نسبت زمانی برای شبکه‌های عصبی مختلف با معماری‌های مختلف محاسبه می‌شود.

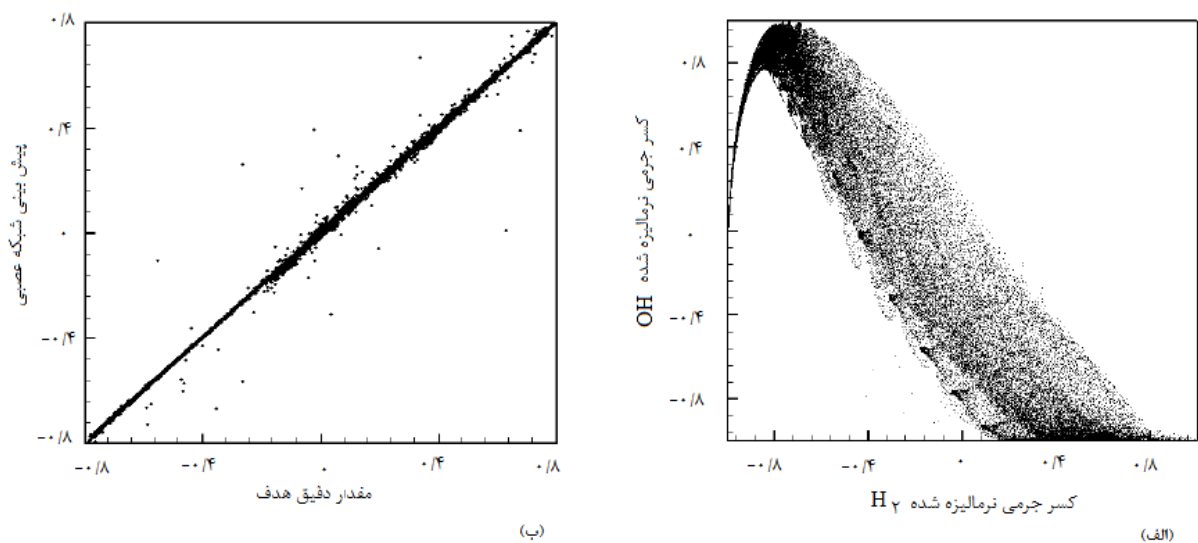
نتایج شبکه‌های عصبی مختلف با تعداد اتصالات مختلف در جدول ۳ نشان داده شده است. با توجه به جدول ۳ مشخص می‌شود که با افزایش تعداد اتصالات شبکه‌های عصبی، درصد خطای خروجی کاهش می‌یابد. از طرفی فقط سه شبکه عصبی ردیف اول، دوم و سوم شرط به‌دست آمده از تحلیل افزایش سرعت، که تعداد اتصالات کمتر از ۴۰۰ است، را ارضا می‌کند. بنابراین، از میان این سه شبکه عصبی، شبکه ردیف سوم، یعنی شبکه عصبی با سه لایه پنهان که به ترتیب در هر یک از آن‌ها ۹، ۷ و ۵ نرون دارد، به‌عنوان شبکه عصبی بهینه انتخاب و جهت محاسبات سینتیک شیمیایی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

جدول ۳- شبکه‌های عصبی با ساختارهای مختلف و پارامترهای مربوط به هر یک

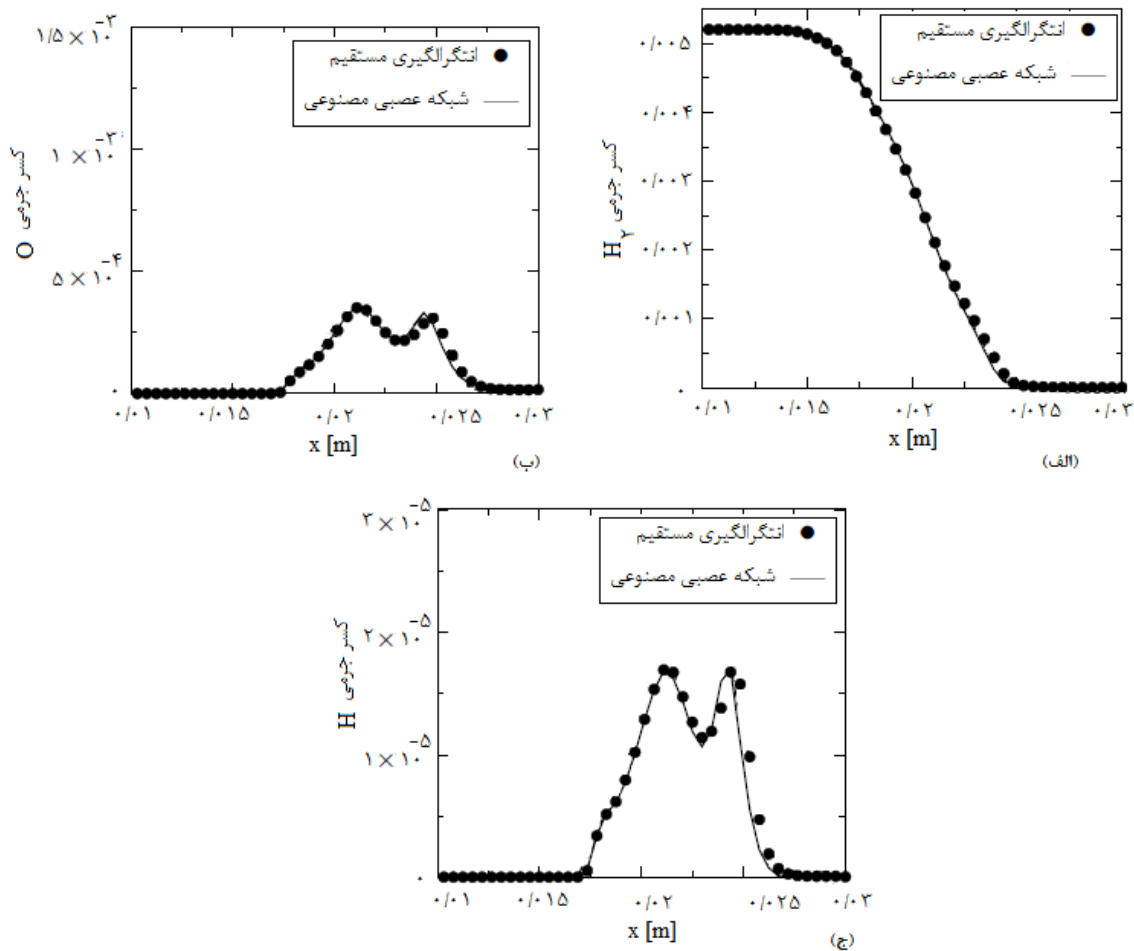
تعداد لایه‌های پنهان شبکه عصبی	تعداد اتصالات وزنی شبکه	درصد خطای خروجی	زمان مصرفی برای هر گردش برای هر داده آموزشی [ثانیه]
۹	۲۶۱	۰/۰۳۵۵	۰/۰۰۰۰۲۷
۹/۷	۲۹۶	۰/۰۳۴۴	۰/۰۰۰۰۳۱
۹/۷/۵	۳۰۳	۰/۰۳۱۱	۰/۰۰۰۰۳۲
۱۸	۵۲۲	۰/۰۲۲۰	۰/۰۰۰۰۳۴
۱۹/۹	۵۸۲	۰/۰۲۱۲	۰/۰۰۰۰۳۵
۲۷/۱۹/۹	۱۲۱۵	۰/۰۰۹۸	۰/۰۰۰۰۴۶

در شکل ۷-الف، یک نمونه از جدول اطلاعاتی استخراج‌شده از مدل اختلاط خطی گردابه، که فضای ترموشیمیایی سیستم را جهت آموزش شبکه عصبی به‌دست می‌دهد، ارائه شده است. از آنجا که در فضای حالت ترموشیمیایی سیستم، گونه‌های شیمیایی نمی‌توانند به‌طور دلخواه مقادیر تصادفی را انتخاب کنند و در حقیقت گونه‌های شیمیایی به‌نوعی از یکدیگر تابعیت پیدا می‌کنند، نمونه‌ای از تابعیت دو گونه شیمیایی مهم شرکت‌کننده در واکنش (H_2 و OH) به‌صورت تابعی از یکدیگر در فضای حالت ترموشیمیایی سیستم در شکل ۷-الف نشان داده شده است. بدیهی که تعداد بسیار زیادی از چنین نمونه‌هایی برای سایر گونه‌های شیمیایی واکنش از حل معادلات واکنش-نفوذ مدل زیرشبکه‌ای اختلاط خطی گردابه به‌دست می‌آید و این دو گونه شیمیایی صرفاً جهت نمایش یک شمای کلی از فضای حالت ترموشیمیایی سیستم نشان داده شده است. در اینجا، برای افزایش دقت در پیش‌بینی شبکه عصبی و نزدیک کردن بیشتر داده‌ها به یکدیگر، کلیه داده‌ها بین بازه $[0, 0.8]$ نرمالیزه شده‌اند. در شکل ۷-ب، مقادیر پیش‌بینی شبکه عصبی برای گونه شیمیایی OH برحسب مقدار دقیق هدف نمایش داده شده است. براساس این شکل، مشخص است که پیش‌بینی شبکه عصبی در حین فرآیند آموزش بسیار دقیق و حول‌وحوش مقدار هدف بوده است.

در شکل ۸ مقادیر متوسط‌گیری شده کسر جرمی سه گونه شیمیایی پراهمیت H_2 ، O و H برای حالت آزمایشی شماره ۱ نمایش داده شده است. توزیع مقادیر متوسط‌گیری شده کسر جرمی این گونه‌ها برای حل تحقیق جاری، روش LES با به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی احتراق در مقایسه با مطالعات قبلی [DNS]۲۰، که در آن سینتیک شیمیایی به روش انتگرالگیری مستقیم محاسبه شده است، نشان می‌دهد که حل انجام‌شده در تحقیق جاری کاملاً معتبر بوده و تطابق کاملی با نتایج DNS وجود دارد.

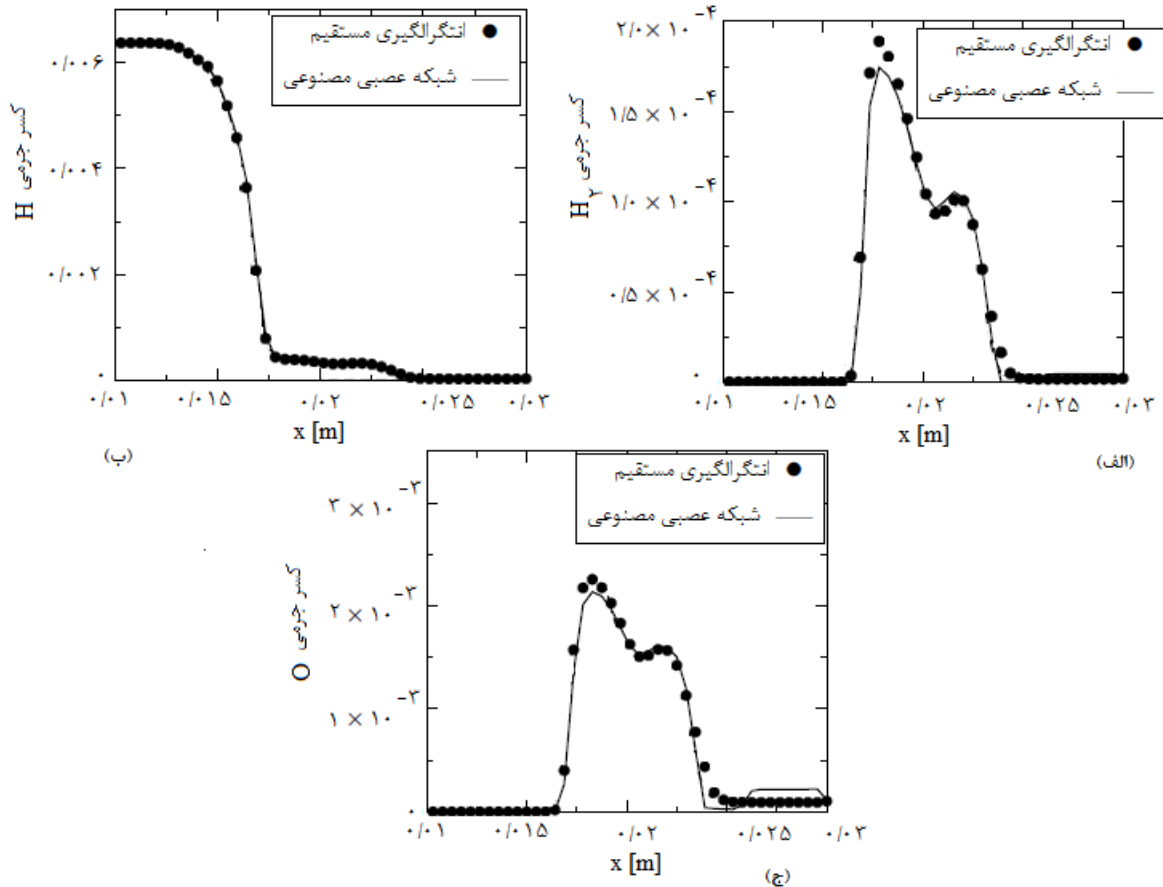


شکل ۷- (الف) کسر جرمی گونه OH به صورت تابعی از کسر جرمی گونه H₂ در بانک اطلاعاتی فضای حالت ترموشیمیایی احتراق گاز سنتزی، (ب) مقدار دقیق هدف برای کسر جرمی گونه OH و مقادیر پیش‌بینی شده شبکه عصبی در اطراف آن



شکل ۸- مقادیر متوسط‌گیری شده زمانی برای کسر جرمی (الف) H₂ (ب) O (ج) H، برای حالت تست شماره ۱ برای حل LES با به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی احتراق و مقادیر حاصل از انتگرالگیری مستقیم در حل DNS

در شکل ۹ مقادیر لحظه‌ای کسر جرمی سه گونه شیمیایی H_2 ، O و H برای حالت آزمایشی شماره ۳ در زمان 0.7 میلی‌ثانیه نمایش داده شده است. مقایسه بین نتایج انتگرالگیری مستقیم در حل DNS و شبکه عصبی مصنوعی در چارچوب LES مجدداً دقت حل را تایید می‌کند [۲۱]. با توجه به این نمودارها، در نمودار شکل ۹-الف تنها در پیش‌بینی بیشینه کسر جرمی گونه شیمیایی H_2 ، شبکه عصبی مصنوعی مقدار کمتری را به دست می‌دهد، اما پیش‌بینی شبکه عصبی برای گونه شیمیایی H در شکل ۹-ب کاملاً دقیق است. برای گونه شیمیایی O نیز مطابق شکل ۹-ج انطباق برقرار است و در قسمت بیشینه و همچنین در انتهای میدان محاسباتی تفاوت مشاهده می‌شود.



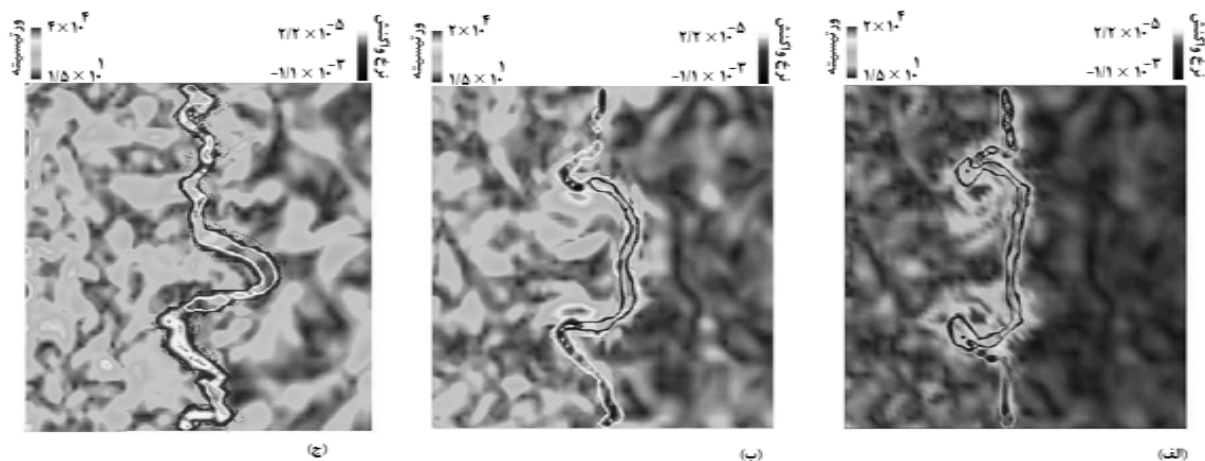
شکل ۹- مقادیر لحظه‌ای برای کسر جرمی H_2 (الف)، H (ب) و O (ج) برای حالت تست شماره ۳ برای حل LES با به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی احتراق و مقادیر حاصل از انتگرالگیری مستقیم در حل DNS در زمان 0.7 میلی‌ثانیه

میدان جریان

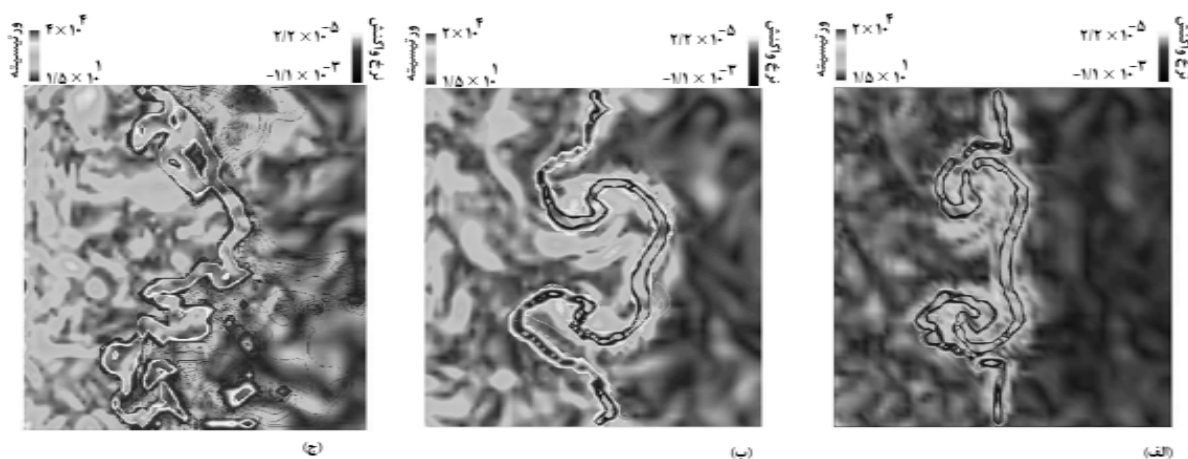
تغییرات سطح شعله در میدان جریان با شاخص نرخ واکنش گونه شیمیایی H_2 و چرخش^۱ در جهت محور z در دو شرایط زمانی مختلف در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نمایش داده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، جبهه شعله توسط زوج ورتکس‌ها در میدان کشیده شده و دچار انحنای شده است. گردابه‌های مقیاس کوچک اغتشاشی در امتداد شعله میرا شده و در سمت ناحیه سوخته‌شده ساختارهای مقیاس بزرگ مشاهده می‌شوند و ورتکس‌ها در سطح شعله چین‌وچروک‌های مقیاس بزرگ ایجاد می‌کنند. همچنین، با افزایش نسبت u'/S_L چین‌وچروک‌های سطح شعله نیز افزایش می‌یابد، به‌طوری که برای تست

1. Vorticity

شماره ۳، که بالاترین مقدار u'/S_L را داراست، سطح شعله در مقایسه با دو حالت تست شماره ۱ و ۲ دچار اغتشاشات و شکستگی‌های شدیدتری شده است. دلیل آن نفوذ شدیدتر ساختارهای اغتشاشی درون شعله و افزایش آثار چین‌وچروک‌های شعله است.



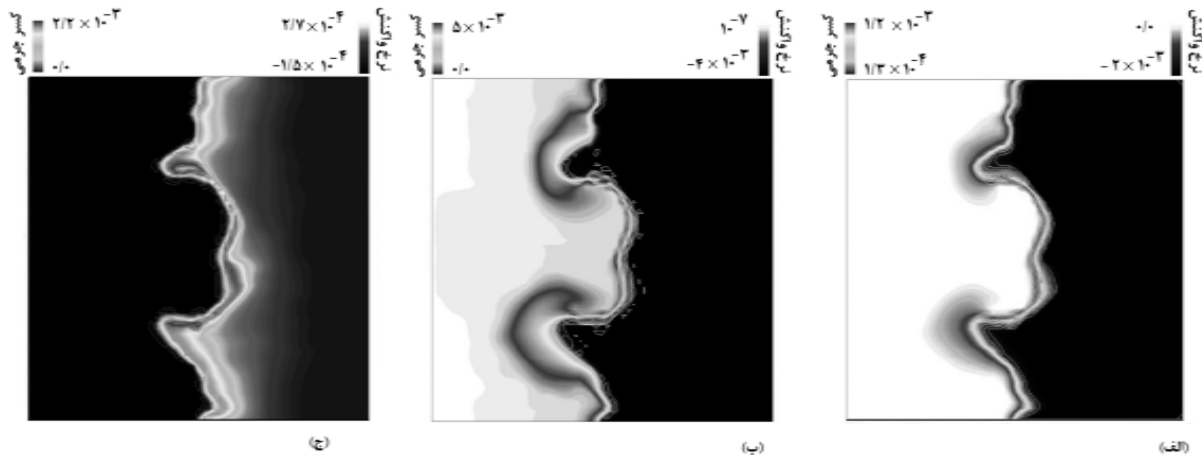
شکل ۱۰- تغییرات نرخ واکنش گونه شیمیایی H_2 و چرخش در راستای محور Z برای زمان $t = 0.3$ میلی ثانیه، (الف) تست شماره ۱ (ب) تست شماره ۲ (ج) تست شماره ۳



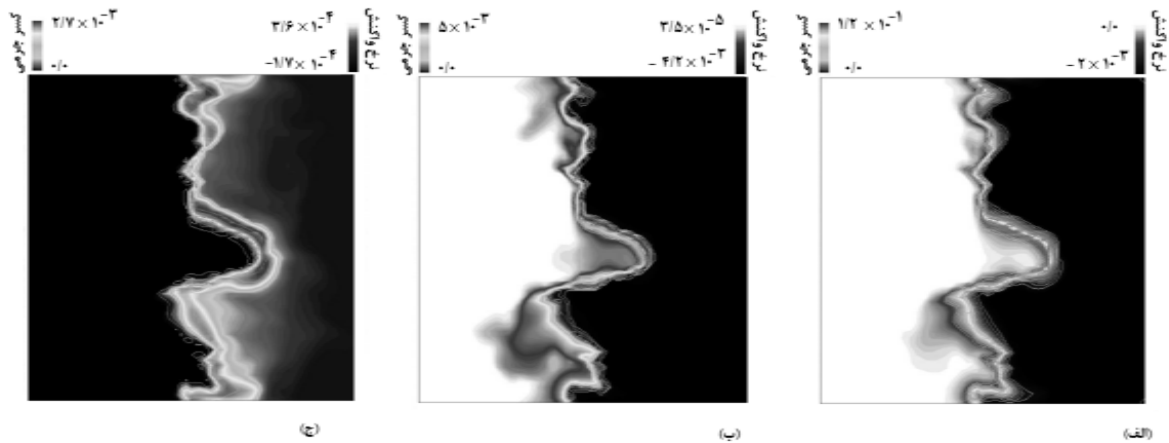
شکل ۱۱- تغییرات نرخ واکنش گونه شیمیایی H_2 و چرخش در راستای محور Z برای زمان $t = 0.7$ میلی ثانیه، (الف) تست شماره ۱ (ب) تست شماره ۲ (ج) تست شماره ۳

برای نمایش بهتر تأثیرات اغتشاش بر روی میدان اسکالر، کسر جرمی و نرخ واکنش سه گونه شیمیایی CO ، H_2 و OH در شکل‌های ۱۲ و ۱۳ در زمان 0.3 میلی‌ثانیه نمایش داده شده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، مصرف CO در مقایسه با H_2 در ناحیه وسیع‌تری صورت می‌گیرد و مقدار بیشینه نرخ واکنش در ناحیه نازک‌تری از سطح شعله واقع می‌شود. همچنین، نرخ واکنش CO حتی در نواحی کشیده‌شده سطح شعله مقدار کوچک‌تری در مقایسه با دو گونه دیگر را نشان می‌دهد و نرخ واکنش گونه CO ، در نواحی که شعله دستخوش کشیدگی شده است، انجام واکنش‌های محدودی را نمایش می‌دهد. همچنین، هر دو گونه شیمیایی CO و H_2 در بخش‌هایی که سطح شعله دارای انحنا منفی است، نسبت به مرکز شعله گرادیان کمتری دارند که شرایط برای H_2 کمی بدتر است و این گرادیان‌های کوچک تمایل به کشیده‌شدن به سمت بالا و پایین میدان

محاسباتی در جهت y دارند. همچنین، نرخ واکنش H_2 در این نواحی کاهش می‌یابد و ناپیوسته است. برای CO این نرخ واکنش ناپیوسته نیست، اما بازهم نسبت به نواحی مرکزی شعله ضعیف‌تر است. به دلیل افزایش نرخ مصرف سوخت در نواحی مرکزی شعله، کسر جرمی در این نواحی به مقدار بیشینه خود می‌رسد. به طور کلی می‌توان گفت که نرخ واکنش H_2 نسبت به CO در نواحی نازک‌تری صورت می‌پذیرد و در نواحی که سطح شعله انحنای مثبت دارد این مقدار افزایش می‌یابد و منطقی است که بیشترین مقدار کسر جرمی OH نیز در این ناحیه مشاهده شود.



شکل ۱۲- تغییرات کسر جرمی و نرخ واکنش گونه‌های شیمیایی (CO (الف) و H_2 (ب) و OH (ج) در زمان $t = 0.3$ میلی ثانیه برای حالت تست شماره ۲



شکل ۱۳- تغییرات کسر جرمی و نرخ واکنش گونه‌های شیمیایی (CO (الف) و H_2 (ب) و OH (ج) در زمان $t = 0.3$ میلی ثانیه برای حالت تست شماره ۳

مقایسه هزینه‌های محاسباتی

از آنجا که حل عددی مطلوب روشی است که پایین‌ترین هزینه‌های محاسباتی (بالاترین سرعت و کمترین میزان اختصاص فضای حافظه رایانه) را داراست، در این قسمت از نتایج، به طور مختصر مقایسه‌ای میان روش شبکه عصبی مصنوعی و سایر

روش‌های رایج در سینتیک شیمیایی احتراق (مانند روش انتگرالگیری مستقیم و روش جداول جستجوی مقادیر^۱ (LUT)) ارائه شده است. مقایسه میان روش شبکه عصبی مصنوعی با انتگرالگیری مستقیم براساس سرعت حل انجام گرفته است و مقایسه میان روش شبکه عصبی با روش جداول جستجوی مقادیر براساس جمله‌های حافظه صورت پذیرفته است.

به‌طور کلی، نقیصه اصلی کلیه روش‌های حل سینتیک شیمیایی که براساس جداول جستجوی مقادیر (LUT) [۲۳،۲۲] هستند، تخصیص حجم بسیار زیادی از فضای حافظه رایانه به ساخته‌شدن جداول بسیار بزرگی است که این روش‌ها برای حل سینتیک شیمیایی احتراق به آن نیازمندند. نیاز به ساخته‌شدن چنین جداول بانک اطلاعاتی بزرگی عملاً کاربرد روش‌های برپایه LUT را به مکانیزم‌های کاهش‌یافته با ۳ الی ۵ گونه شیمیایی محدود کرده است، زیرا حجم این جداول با افزایش تعداد گونه‌های شیمیایی شرکت‌کننده در واکنش به‌طور نمایی افزایش می‌یابد. در تحقیق جاری از یک مکانیزم شیمیایی نرخ محدود برای احتراق سوخت گاز سنتزی PSI با شرکت ۱۴ گونه شیمیایی استفاده شده است. لذا می‌توان حجم حافظه عظیم مورد نیاز برای حل یک مکانیزم شیمیایی با شرکت ۱۴ گونه شیمیایی به روش LUT را به این صورت تخمین زد: با در نظر گرفتن تعداد فقط ۱۰۰ سلول در هر جهت برای گسسته‌سازی فضای حالت ترموشیمیایی که دارای ۱۴ اسکالر است، تعداد نقاط شاخص در هر جهت در روش LUT برابر $N_{LUT} = 100^{14} = 10^{28}$ می‌شود. در نهایت تعداد 14×10^{28} عدد شناور برای ذخیره‌سازی اطلاعات سینتیک شیمیایی این احتراق در این روش مورد نیاز است. با در نظر گرفتن ۸ بیت از حافظه رایانه برای هر عدد شناور^۲ [۹] حافظه نهایی مورد نیاز برای ذخیره‌سازی اطلاعات سینتیک شیمیایی مکانیزم جاری برابر 1.3×10^{20} گیگابایت می‌شود و واضح است که ذخیره‌سازی چنین حجم عظیمی از اطلاعات از عهده رایانه‌های امروزی خارج است.

شبکه عصبی مصنوعی، پس از اینکه به‌طور صحیح مورد آموزش قرار گرفت، اطلاعات سینتیک شیمیایی را در حجم بسیار کوچکی ذخیره‌سازی می‌کند و گرچه چنان که اشاره شد، از یک بانک اطلاعاتی با حجم ۳/۰۸ گیگابایت برای آموزش شبکه عصبی استفاده می‌شود، اما پس از تکمیل فرآیند آموزش، شبکه عصبی کلیه این اطلاعات را در ضرایب وزنی خود و فاکتورهایی که داده‌های ورودی و خروجی را نرمالیزه می‌کنند قرار می‌دهد. لذا در مجموع برای شبکه عصبی جاری با سه لایه پنهان ۹، ۷ و ۵ نرونی تعداد $(15+14) \times 2 \times 14 + 5 \times 14 + 5 \times 7 + 7 \times 9 + 9 \times 7 + 15 \times 9$ عدد شناور جهت ذخیره‌سازی اطلاعات وجود خواهد داشت که با تبدیل آن به جمله حافظه، مقدار بسیار کوچک ۲/۸ کیلوبایت برای ذخیره‌سازی کل اطلاعات سینتیک شیمیایی در شبکه عصبی مصنوعی به‌دست خواهد آمد. واضح است که در زمینه هزینه محاسباتی از دیدگاه حافظه مصرفی شبکه عصبی مصنوعی بسیار کارایی بهتر و راندمان بالاتری را در قیاس با روش کلاسیک جداول جستجوی مقادیر از خود نشان می‌دهد.

جدول ۴ زمان مورد نیاز برای هر تکرار در هر سلول را برای یک پردازنده INTEL (3.2 GHz Xeon) با دو روش حل LES با به‌کارگیری شبکه عصبی در سینتیک شیمیایی احتراق^۳ (ANN-LES) و حل LES با به‌کارگیری روش کلاسیک انتگرالگیری مستقیم از معادلات حاکم بر سینتیک شیمیایی احتراق^۴ (DI-LES) نشان می‌دهد.

جدول ۴- مقایسه زمان مورد نیاز در فرآیند حل برای دو روش ANN-LES و DI-LES

روش حل عددی میدان جریان	زمان مورد نیاز برای هر تکرار در هر سلول محاسباتی (ثانیه)	نسبت افزایش سرعت
ANN-LES	۰/۰۰۱۹۹	۴/۸
DI-LES	۰/۰۰۹۶	۱/۰

1. Look-up table method
2. Double-precision
3. Large Eddy Simulation with Artificial Neural Network
4. Large Eddy Simulation with Direct Integration

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، به‌کارگیری شبکه عصبی در چارچوب حل LES افزایش سرعت $4/8$ برابری را نسبت به روش رایج انتگرالگیری مستقیم از سینتیک شیمیایی در حل LES نشان می‌دهد. این افزایش سرعت، به‌خوبی نمایانگر توانایی شبکه‌های عصبی مصنوعی در تخمین معادلات به‌شدت غیرخطی سینتیک شیمیایی است.

بحث و نتیجه‌گیری

در تحقیق انجام‌شده حل LES میدان جریان واکنشی با سوخت گاز سنتزی PSI به‌صورت شعله پیش‌مخلوط انجام گرفته است و اندرکنش جبهه شعله با اغتشاش جریان، که شامل تکانه‌های اغتشاشی مقیاس کوچک و تغییرات میدان اسکالر ناشی از مقیاس‌های بزرگ اغتشاشات است، بررسی شده است. تاکید اصلی در این رهیافت، به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی احتراق است که این روش به شکل موفقیت‌آمیزی در چارچوب شبیه‌سازی LES گنجانده شده است. همچنین، مزایای به‌کارگیری شبکه‌های عصبی مصنوعی در سینتیک شیمیایی احتراق در چارچوب حل عددی LES نسبت به دو روش کلاسیک انتگرالگیری مستقیم و جداول جستجوی مقادیر به لحاظ هزینه‌های محاسباتی (جمله‌های زمان و حافظه) نشان داده شده است. شبکه‌های عصبی مصنوعی دارای توانایی بالقوه برای تخمین توابع غیرخطی اند و سینتیک شیمیایی احتراق یک نمونه از پیچیده‌ترین معادلات دیفرانسیلی غیرخطی را داراست. بنابراین به‌کارگیری شبکه‌های عصبی که هم به لحاظ میزان حافظه مصرفی (نسبت به روش‌های جستجوی مقادیر) و هم به لحاظ افزایش سرعت پاسخ‌دهی (نسبت به روش انتگرالگیری مستقیم) ارجحیت دارند، می‌توانند جایگزین بسیار مناسبی برای این دو روش هزینه‌بر کلاسیک باشند. تنها شرط موفقیت‌آمیز بودن استفاده از شبکه‌های عصبی در سینتیک شیمیایی مدلسازی‌های عددی احتراق، آموزش صحیح و به‌دست آوردن درست الگوهای آموزشی برای این شبکه‌هاست. در تحقیق جاری، مدل زیرشبکه‌ای احتراقی اختلاط خطی گردابه برای مدلسازی احتراق و همچنین به‌دست آوردن الگوهای مناسب ورودی-خروجی برای آموزش شبکه عصبی استفاده شده است. بدیهی است که می‌توان روش‌های مناسب دیگری برای استخراج الگوهای مناسب فضای حالت ترموشیمیایی سیستم واکنشی نیز به‌دست آورد که چنین مطالعاتی در آینده مد نظر نویسندگان است.

تحقیق ارائه‌شده را می‌توان به‌عنوان پایه‌ای برای مطالعات بعدی با تمرکز بر افزایش سرعت حل معادلات سینتیک شیمیایی با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی در نظر گرفت. یکی از محاسن به‌کارگیری استفاده از مدل زیرشبکه‌ای احتراقی اختلاط خطی گردابه، تعمیم‌پذیری آن برای استفاده در هر دو حالت پیش‌مخلوط و غیرپیش‌مخلوط است که نتایج حل نمونه‌هایی از مسائل احتراقی غیرپیش‌مخلوط (مانند شعله سن‌دیا (D) با به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی و مدل احتراقی اختلاط خطی گردابه نیز در آینده نزدیک گزارش خواهد شد.

منابع

1. S. R. Turns, *An Introduction to Combustion*, McGraw-Hill, 2000.
2. T. Baritaud, T. Poinso and M. Baum, *Direct Numerical Simulation for Turbulent Reacting Flows*, Editions Technip, Paris, Editions Technip, 1996.
3. N. Peters, *Numerical Simulation of Combustion Phenomena*, Springer-Verlag, 1985.
4. W. P. Jones and P. R. Lindstedt, "Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion," *Combustion and Flame*, 73, 1988, pp. 223-233.
5. U. Maas and S. Pope, "Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition space," *Combustion and Flame*, 88, 1992, pp. 239-264.
6. S. B. Pope, "Computationally Efficient Implementation of Combustion Chemistry using In Situ Adaptive Tabulation," *Combustion Theory and Modeling*, 1, 1997, pp. 41-63.
7. K. Mehrota, C. K. Mohan and S. Ranka, S., *Elements of Artificial Neural Networks*, New York, MIT Press, 1997.
8. R. Beale and T. Jackson, *Neural Computing: An Introduction*, York (UK), IOP Publishing, 1990.

9. J. A. Blasco, N. Fueyo, C. Dopazo and J. Ballester, Modelling the Temporal Evolution of a Reduced Combustion Chemical System with an Artificial Neural Networks," *Combustion and Flame*, 123, 1998, pp. 38-52.
10. Y. Choi and J. Y. Chen, "Fast Prediction of Start-of-Combustion in HCCI with Combined Artificial Neural Networks and Ignition Delay Model," *Proc. Combust. Inst.*, 30, 2005, pp. 2711-2718.
11. J. Y. Chen, J. A. Blasco, N. Fueyo and C. Dopazo, "An Economical Strategy for Storage of Chemical Kinetics: Fitting In-situ Adaptive Tabulation with Artificial Neural Networks," *Proc. Combust. Inst.*, 28, 2000, pp. 115-121.
12. R. Kapoor, A. Lentati and S. Menon, "Simulations of Methane-Air Flames using ISAT and ANN," *AIAA-01-3847*, 2001.
13. N. S. Mehdizadeh and P. Sinaei, "Modelling Methane-Air Turbulent Diffusion Flame in a Gas Turbine Combustor with Artificial Neural Network," *The Aeronautical Journal*, 113, 2009, pp. 541-547.
14. T. Smith and S. Menon, "One-Dimensional Simulations of Freely Propagating Turbulent Pre-Mixed Flames," *Combust. Sci. Technol.* 128, 1996, pp. 99-130.
15. A. R. Kerstein, "Linear-Eddy Model of Turbulent Scalar Transport and Mixing," *Combust. Sci. Tech.*, 60, 1988, pp. 391-421.
16. V. Sankaran, T. G. Drozda, J. C. Oefelein, "A Tabulated Closure for Turbulent Non-Premixed Combustion Based on the Linear Eddy Model," *Proc. Combust. Inst.*, 32, 2009, pp. 1527-1535.
17. N. B. Karayiannis and A. N. Venetsanopoulos, *Artificial Neural Networks*, USA, Kluwer Academic Publishers, 1993.
18. D. E. Rumelhart and J. L. McClelland, *Parallel Distributed Processing: Exploration in the Microstructure of Cognition*, Vol. 1, *Foundations*, Cambridge, MIT Press, 1986.
19. R. D. Bradar and R. M. Jones, "GE IGCC Technology and Experience With Advanced Gas Turbines," Ger-4207, GE Power Systems, Schenectady, NY, October 2000.
20. B. A. Sen and S. Menon, "Turbulent Premixed Flame Modeling using Artificial Neural Network Based Chemical Kinetics," *Proc. Combust. Inst.*, 32, 2009, pp. 1605-1611.
21. A. Trounev and T. Poinso, "The Evolution Equation for the Flame Surface Density in Turbulent Premixed Combustion," *Journal of Fluid Mech.*, 278, 1994, pp. 1-31.
22. F. C. Christo, A. R. Masri and E. M. Nebot, "Artificial Neural Network Implementation of Chemistry Simulation of H₂/CO₂ Flames," *Combustion and Flame*, 106, 1996, pp. 406-427.
23. J. Y. Chen, J. A. Blasco, N. Fueyo and C. Dopazo, "An Economical Strategy for Storage of Chemical Kinetics: Fitting In-Situ Adaptive Tabulation with Artificial Neural Networks," *Proceedings of the Combustion Institute*, 28, 2000, pp. 115-121.

English Abstract

Large Eddy Simulation of the Premixed Flame-Turbulence Interactions using Artificial Neural Network in Chemical Kinetics Tabulation

Payam Sinaei, Sadegh Tabejamaat and Nasser Seraj Mehdizadeh
Department of Aerospace Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran

(Received: 2013.11.12, Received in revised form: 2014.4.9, Accepted: 2014.5.9)

A large eddy simulation (LES) of premixed flame-turbulence interaction is performed with special emphasis on computing the instantaneous chemical species reaction rates with the recently developed approach of artificial neural networks (ANNs) for chemical kinetics. Training of the neural network is based on an independent flame study using linear eddy mixing technique. An analysis of computational performance, considering CPU time and a comparison between the performance of artificial neural network technique and other conventional methods is used to represent the chemical kinetics such as direct integration (DI) - and the ability of neural networks to model the highly non-linear and stiff chemistry ODEs is illustrated. The sub-grid combustion model of the LES is based on a linear eddy mixing model while a skeletal multi-species, multi-step chemical kinetic mechanism is applied for the combustion. A feed-forward, multi-layer architecture is chosen for the neural network and the training algorithm is based on a back-propagation gradient descent rule with adaptive learning rate and individual momentum factors for the weight coefficients. The flow field distribution and the flame characteristics obtained by LES with neural network based chemical kinetics tabulation, are in reasonable agreement with previous direct numerical simulation (DNS) study of the flame. The results show if the neural network is trained accurately, it can predict the instantaneous chemical species reaction rates in LES framework.

Keywords: Premixed flame-Large eddy simulation (LES)-Artificial neural network-Chemical kinetics