

# بهینه‌سازی پارامترهای الگوریتم ژنتیک برای تعیین ضرایب مدل سینتیکی احتراق متان و هوا

سید مهدی هدایت‌زاده<sup>۱</sup>، محمد سلطانیه<sup>۱</sup>، اسماعیل فاتحی‌فر<sup>۲</sup>، امیر حیدری‌نسب<sup>۱</sup>، محمدرضا جعفری نصر<sup>۱</sup>  
۱- دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات تهران، دانشکده فنی و مهندسی، گروه مهندسی شیمی، تهران  
۲- دانشگاه صنعتی سهند، دانشکده مهندس شیمی، پژوهشکده مهندسی محیط زیست و توسعه پایدار، شهر جدید سهند، تبریز

## چکیده

استفاده از روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک در تعیین ثوابت سرعت واکنش در مدل‌های سینتیکی کاربرد زیادی دارد. از آنجایی که پارامترها و عملگرها (شامل: اندازه جمعیت، احتمال ترکیب و احتمال جهش) در این روش، تأثیر زیادی بر رسیدن به نقطه بهینه مطلق و همچنین در سرعت همگرایی روش دارد، مقاله حاضر به بررسی اثر این پارامترها پرداخته و با پیاده‌سازی این روش بر مدل احتراق متان/هوا در داخل راکتور همزده در شرایط مختلف عملیاتی و مقایسه نتایج بهینه‌سازی با نتایج مدل مبنا GRI-Mech 3.0 بهینه‌سازی شد. با تحلیل آماری، بهترین پارامترهای الگوریتم ژنتیک برای به دست آوردن پارامترهای سینتیکی به دست آمد. برای مقایسه مدل بهینه شده، از مدل شعله پیش‌اختلاطی استفاده گشت که نتایج آن از لحاظ پروفیل اجزا در طول شعله تطابق کامل با مدل سینتیکی مبنا داشت.

کلمات کلیدی: الگوریتم ژنتیک، مدل سینتیکی بهینه، راکتور همزده کامل، شعله پیش‌اختلاط، احتراق

## ۱- مقدمه

واکنشهای احتراق از واکنشهای ابتدایی رادیکالی تشکیل شده‌اند که به صورت زنجیره‌ای انجام می‌شوند. در هر زمان از فرآیند احتراق از انجام هر واکنش ابتدایی محصولی حاصل می‌گردد که با در نظر گرفتن خود آن محصول می‌توان واکنشهای جدیدی را به مجموعه واکنشهای مورد بررسی اضافه نمود. بنابراین، به لحاظ تئوری محدودیتی برای تعداد اجزای واسطه، تعداد محصولات احتراق و نیز واکنشهای ابتدایی وجود ندارد [۱]. آرایه این مدل‌های دقیق<sup>۱</sup> به معنای این نیست که تمامی واکنشهای ممکن در مجموعه مکانیسم واکنش گنجانده شده است، بلکه بدین معنا است که تمام واکنشهای آن به عنوان واکنشهای مؤثر شناسائی گشته‌اند. از این رو، ممکن است ثوابت معادله سرعت یک واکنش ابتدایی فاز گازی مشخص از یک مدل سینتیکی به مدلی دیگر متفاوت باشد که عامل اصلی این تفاوت در مقدار، جبران خطای حضور یا عدم حضور سایر واکنشهای ابتدایی در مدل است. پارامترهای سرعت واکنش شامل  $k_0$ ،  $\beta$  و  $E_a$  که در رابطه آرنیوس اصلاح شده وجود دارند، به شرح معادله (۱) با هم ارتباط دارند:

$$k = k_0 T^\beta \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (1)$$

به منظور مطالعه احتراق سوخته‌های جدید و یا مخلوط سوخته‌ها با هم می‌توان از واکنشهای ابتدایی در مدل سینتیکی احتراق سوختی مشابه استفاده نمود، ولی پارامترهای سرعت آنها را نمی‌توان به کار برد. در تحقیق لئونگ<sup>۲</sup> که احتراق ترکیبات هیدروکربنی C1 تا C3 در شعله نفوذی را مورد بررسی قرار داده است، نشان داده شده که اجتماع واکنشهای ابتدایی که از مدل‌های سینتیکی متفاوتی به دست آیند، اگر چه نتایج قابل قبولی را به دست خواهد داد، ولی در برخی موارد خطاهای قابل

<sup>1</sup> Comprehensive kinetic models

<sup>2</sup> Leung

ملاحظه‌ای را می‌تواند به دنبال داشته باشد [۲]. از این رو، بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی با روشهای ریاضی و با توجه به داده‌های تجربی مطرح شد که نمونه‌هایی از آن را می‌توان در مقالات مشاهده نمود [۱، ۳-۵].

کاربرد روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک در سینتیک واکنشهای شیمیایی، برای اولین بار توسط ولف و مروس<sup>۱</sup> برای واکنش کاتالیستی ترکیب اکسیدی متان به اتان مطرح گشت که در آن به دلیل کافی نبودن پاسخ به دست آمده از روش الگوریتم ژنتیک، از آن به عنوان حدس اولیه در سایر روشهای بهینه‌سازی استفاده شد [۶]. در تحقیقی دیگر، پولیفک<sup>۲</sup> و همکارانش با هدف ارایه روشی برای بهینه‌سازی سیستماتیک پارامترهای سرعت واکنشها، از روش الگوریتم ژنتیک بهره بردند که برای نمونه آن را در مورد مکانیسمهای کوچک دو مرحله‌ای و نیز سه مرحله‌ای احتراق متان پیاده‌سازی نمودند که نتایج خوبی به دنبال داشت. در مقالات دیگری نیز روش الگوریتم ژنتیک، برای واکنشهایی با تعداد محدودی از واکنشها به کار گرفته شد که اصلاحات مختصری بر روی این روش ارایه کرده بودند و دارای تمایز چندانی نسبت به روش اصلی نبودند [۷-۹]. در مقاله هریس<sup>۳</sup> که از روش الگوریتم ژنتیک در احتراق هیدروژن و اکسیژن به کار برده است، اشاره‌ای به مقادیر مورد استفاده پارامترهای جمعیتی، انتخاب، ترکیب و جهش الگوریتم ژنتیکی ذکر شده، ولی به دلایل انتخاب آنها اشاره‌ای نشده است [۱۰]. در مقاله الیوت<sup>۴</sup> و همکارانش نتایج مدل احتراق در راکتور همزده کامل و شعله پیش آمیخته در یک تابع هدف ترکیب گشتند تا به کمک بهینه‌سازی چند هدفی، نتایج بهتری برای پارامترهای سینتیک احتراق هیدروژن در اکسیژن به دست آید [۱۱]. در پژوهش دیگر الیوت و همکارانش، علاوه بر بررسی روش الگوریتم ژنتیک در احتراق هیدروژن و اکسیژن، برای نخستین بار الگوریتم ژنتیک بر روی سیستمهای واکنش بزرگتری مانند احتراق متان و نفت سفید در هوا نیز به کار گرفته شد که در آن نیز بین بهینه‌سازی یک هدفی و چند هدفی مقایسه به عمل آمده است [۱۲]. اگر چه به پارامترهای مورد استفاده در الگوریتم ژنتیک اشاره شده که در مورد جهش، تفاوت قابل توجهی با مقاله قبلی آنها دارد، ولی به دلیل انتخاب آنها در این پرداخته نشده است. در کار دیگر الیوت و همکارانش که بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی را در امر کاهش مدل سینتیکی احتراق متان و هوا استفاده کرده‌اند، با استفاده از آنالیز حساسیت، تأثیر احتمال جهش بر روی تعداد متوسط دفعات بازخوانی مدل احتراق و تعداد متوسط نسلها برای همگرایی مسأله بررسی شده و در نتیجه پارامترهای بهینه الگوریتم ژنتیک انتخاب گشته‌اند [۱۳]. بهینه‌سازی پارامترهای الگوریتم ژنتیک برای کارایی بیشتر و رسیدن به جواب بهتر در مورد سیستم واکنشهای کوچک توسط فاطمی و همکاران در مورد سیستم یک واکنش کاتالیستی غیرهمگن انجام شده که اثر عملگرهای مختلف در الگوریتم ژنتیک و مقادیر مختلف برای پارامترهای آنها انجام شده است [۱۴].

با توجه به این مسأله که تنظیم پارامترها و عملگرهای الگوریتم ژنتیک تأثیر شدیدی بر پاسخ نهایی و نیز سرعت همگرایی دارد و این خلأ در سینتیک واکنشهای احتراق فاز گازی به شدت احساس می‌گردد، هدف این تحقیق بر آن قرار گرفت تا با بررسی حالتهاى مختلف برای تابع هدف، عملگرها و پارامترهای جمعیتی الگوریتم ژنتیک در یک مدل دقیق سینتیکی احتراق فاز گازی، زمینه برای تهیه مدل‌های سینتیکی سوخته‌های جدید و نیز مخلوط سوخته‌ها هموار گردد. با در نظر گیری این نکته که پارامترهای سینتیکی در یک مکانیسم جدید مقدار اولیه دقیقی را ندارد، از طریق بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی می‌توان به مدل سینتیکی دقیقتری دست یافت. نتایج حاصل از این مقاله باعث می‌گردد که فرآیند بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی با صرف کمترین زمان ممکن به مناسبترین مجموعه پاسخ منتهی گردد.

<sup>1</sup> Wolf and Moros

<sup>2</sup> Polifke

<sup>3</sup> Harris

<sup>4</sup> Elliott

## ۲- روش مدل‌سازی احتراق و بهینه‌سازی

### ۲-۱- مدل سینتیکی انتخابی

برای بررسی توانایی روش الگوریتم ژنتیک در یافتن پارامترهای سینتیکی بهینه، از آخرین مدل ارائه شده توسط انستیتو تحقیقات گاز دانشگاه برکلی با عنوان GRI-Mech (نسخه ۳) استفاده شده است [۱۵] که در این مقاله با عنوان مدل مبنا نامیده شده است. این مدل مشتمل بر ۳۲۵ واکنش ابتدایی بوده که صرفنظر از برخی نقایص، در مورد شبیه‌سازی احتراق متان و گاز طبیعی بسیار موفق بوده است [۱۵، ۱۶]. این مکانیسم شامل زیر مکانیسمهای احتراق هیدروژن، متان، اتان، پروپان، بوتان، متانول و نیز اکسیداسیون نیتروژن می‌گردد.

### ۲-۲- مدل عددی احتراق

برای الگوریتم ژنتیک می‌توان از مدل‌های مختلفی مانند مدل‌های راکتور همزده [۱۰]، راکتور لوله‌ای، شعله پیش آمیخته [۱۳]، [۱۷]، خوداشتعالی، تأخیر در افروزش [۱۸]، موتور احتراق داخلی [۱۹-۲۲] و لوله موج به تنهایی یا به صورت ترکیبی استفاده نمود. الیوت نشان داده است که استفاده از تابع هدف راکتور همزده کامل نتیجه بهتری را نسبت به استفاده از شعله پیش‌اختلاطی به عنوان تابع هدف خواهد داد [۱۲]. در با توجه اینکه تعداد دفعات فراخوانی مدل توسط الگوریتم ژنتیک فراوان بوده و به طور مستقیم از تعداد جمعیت و تعداد نسل تأثیر می‌پذیرد، از مدل احتراق در راکتور همزده استفاده گردید که از لحاظ عددی بسیار ساده‌تر از سایر مدل‌ها بوده و لذا به کمک آن زمان بهینه‌سازی بسیار کاهش خواهد یافت.

### ۲-۳- الگوریتم ژنتیک

مفاهیم و کاربردهای الگوریتم ژنتیک به تفصیل در مراجع شرح داده شده‌اند [۲۳-۲۶]. در این مقاله، از کد الگوریتم ژنتیک چند هدفی NSGA-II که توسط دب<sup>۱</sup> و همکارانش تهیه گردیده [۲۷]، استفاده شده است. پارامترهای الگوریتم ژنتیک که در این مقاله، اثر آنها بررسی شده است، شامل: انتخاب تابع هدف، تعداد جمعیت اولیه ( $N_{pop}$ )، احتمال ترکیب ( $P_{cross}$ ) و احتمال جهش ( $P_{mut}$ ) هستند. تابع هدف بر اساس مجموع درصد خطای نسبی غلظت تمامی اجزای شیمیایی در خروجی راکتور همزده نسبت به مقدار پیش‌بینی شده آنها توسط مدل مبنا تعریف شده است که در معادله (۲) نشان داده شده است.

$$f_{obj} = \left( \sum_{i=1}^{N_r} \frac{(T_i^{cal} - T_i^{gri})}{T_i^{gri}} + \sum_{i=1}^{N_r} \sum_{j=1}^{N_{sp}} \frac{(Y_{i,j}^{cal} - Y_{i,j}^{gri})}{Y_{i,j}^{gri}} \right) \times 100 \quad (2)$$

در روابط فوق  $N_r$  تعداد حالت‌های مختلف برای راکتور همزده و  $N_{sp}$  تعداد اجزای شیمیایی موجود در مدل مبنا، متغیرهای  $T_i^{cal}$  و  $T_i^{gri}$  به ترتیب دمای محاسبه شده توسط مدل سینتیکی مورد بررسی و دمای محاسبه شده با مدل مبنا در راکتور شماره  $i$ -ام است. همچنین متغیرهای  $Y_{i,j}^{cal}$  و  $Y_{i,j}^{gri}$  به ترتیب کسر مولی جز  $z$  محاسبه شده توسط مدل سینتیکی مورد بررسی و کسر مولی جز  $z$  محاسبه شده با مدل مبنا در راکتور شماره  $i$ -ام می‌باشد.

### ۲-۴- طراحی آزمایشات

به منظور پوشش بهتر نتایج حاصل از بهینه‌سازی بر شرایط عملیاتی مختلف در احتراق، از اجرای مدل در شرایط مختلف نسبت سوخت/هوا و دمای ورودی گازها بهره گرفته شده است که سطوح تعریف شده آن منطبق بر سطوح تعریف شده در مقاله الیوت است که نتایج خوبی را ارائه نموده است [۱۲]. این تنوع در دو شرایط فوق در جدول (۱) نشان داده شده است. با توجه

<sup>1</sup> Deb

به سطوح تعریف شده برای هر متغیر مستقل راکتور و بر اساس روش طراحی آزمایش فاکتوریل کامل<sup>۱</sup>، ۲۰ حالت مختلف برای شبیه‌سازی راکتور همزده به دست آمد که در هر گام از بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک تمامی این حالتها اجرا شده و نتیجه آنها با نتیجه به دست آمده از همان حالت راکتور با مدل سینتیکی مبنا مقایسه گردد. برای حل مدل عددی راکتور همزده از کد آرورا<sup>۲</sup> استفاده شده است [۲۸].

جدول (۲) - سطوح تعریف شده برای پارامترهای الگوریتم ژنتیک

متغیر	سطح
جمعیت اولیه	۳ سطح: ۶۴، ۱۶، ۴
احتمال ترکیب	۳ سطح: ۰/۹۵ و ۰/۷ و ۰/۵۵
احتمال جهش	۳ سطح: ۰/۰۱، ۰/۰۵ و ۰/۱

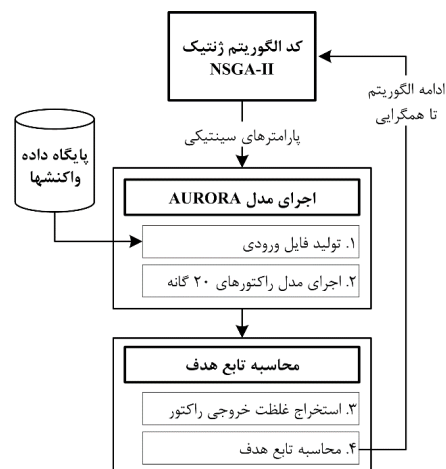
جدول (۱) - سطوح تعریف شده برای متغیرهای مدل راکتور همزده

متغیر	سطح
نسبت سوخت/هوا	۴ سطح: ۰/۵، ۱، ۱/۵ و ۲
دمای ورودی گازها (K)	۵ سطح: ۱۵۰۰، ۱۷۵۰، ۲۰۰۰، ۲۲۵۰ و ۲۵۰۰

به منظور دست‌یابی به پارامترهای بهینه الگوریتم ژنتیک که شامل: تعداد جمعیت اولیه، احتمال ترکیب و احتمال جهش می‌باشند، برای هر پارامتر ۳ سطح مختلف مطابق جدول (۲) تعریف شده است که از ترکیب آنها در هر بهینه‌سازی بر اساس روش فاکتوریل کامل ۲۷ حالت بهینه‌سازی طرح می‌گردد.

هر واکنش ابتدایی، مطابق معادله (۱)، دارای ۳ پارامتر سینتیکی است که به عنوان متغیرهای تصمیم‌گیری برای این بهینه‌سازی منظور می‌شوند. از این رو، برای بهینه‌سازی حاضر ۹۷۵ متغیر تصمیم‌گیری وجود خواهد داشت. قید بالا و پایین هر متغیر به صورت جداگانه تعریف شده و در محدوده  $\pm 20\%$  مقدار اصلی آن در مدل مبنا تعریف گردیده است. شایان ذکر است که این بازه با فرض مجهول بودن مقادیر پارامترهای سینتیکی انتخاب شده و بازه بسیار گسترده‌ای از لحاظ عددی است. الیوت برای تعیین محدوده در احتراق هیدروژن و هوا از سرعتهای گزارش شده در پایگاه داده NIST برای هر واکنش ابتدایی استفاده نمود [۲۹، ۳۰] که پیاده‌سازی آن برای مکانیسمهای پیچیده‌تر دشوار خواهد بود.

برای ارتباط کد بهینه‌سازی با کد آرورا مجموعه کدهای در محیط برنامه‌نویسی ++C ایجاد شد تا با هر مجموعه پارامتر سینتیکی، فایل ورودی کمکین<sup>۳</sup> تهیه، پیش‌پردازش و به کد آرورا انتقال می‌یابد. پس از هر بار اجرای مدل راکتور همزده کامل، فایل گزارش خروجی آرورا پردازش شده و دما و غلظت اجزا در خروجی راکتور استخراج شده و خطای نسبی آنها در مقایسه با مقادیر مدل مبنا محاسبه و به کد الگوریتم ژنتیک بر می‌گردد. ارتباط این نرم‌افزارها و کدها در شکل (۱) نشان داده شده است.



<sup>1</sup> Full Factorial

<sup>2</sup> AURORA

<sup>3</sup> CHEMKIN

شکل (۱)- ارتباط کد بهینه‌سازی با کد آرورا

با توجه به اینکه اجرای هر ۲۰ حالت راکتور در یک کامپیوتر سرور اچ. پی. پرقدرت دارای دو پردازنده اینتل زئون<sup>۱</sup> مدل ۵۵۶۰ حدود ۲/۵ ثانیه زمان نیاز دارد، اجرای بهینه‌سازی برای تعداد سطوح بیشتر پارامترها، تعداد جمعیت اولیه بیشتر و نیز تعداد نسل بیشتر بسیار زمان‌بر می‌شد. لذا، حداکثر جمعیت اولیه ۶۴ انتخاب شده و برای تمام موارد مطرح شده بهینه‌سازی این امکان به وجود آمد تا ۲۵۰ نسل پیش روند.

پس از اجرای تمام ۲۷ مورد بهینه‌سازی و به منظور تعیین شرایط مقادیر بهینه برای پارامترهای الگوریتم ژنتیک، از روش آنالیز واریانس<sup>۲</sup> استفاده گردید و مدل خطی برای بیان تأثیر پارامترهای الگوریتم ژنتیک بر روی مقدار نهایی تابع هدف به دست آمد.

### ۳- بحث و نتایج

یکی از نکات اساسی در طراحی آزمایشات، انجام تکرار در مورد هر آزمایش است که در این مقاله و به دلیل ماهیت تصادفی بودن پدیده‌های ترکیب و جهش و در نتیجه روند بهینه‌سازی، این سؤال مطرح می‌گردد که انجام تکرار برای هر آزمایش تا چه اندازه ضرورت دارد. با توجه به زمان‌بر بودن هر بهینه‌سازی، تکرار آزمایش فقط برای تعدادی از بهینه‌سازی‌ها که با روش فاکتوریل دوگانه برای کرانه بالا و پایین پارامترهای الگوریتم ژنتیک، شامل: جمعیت اولیه، احتمال ترکیب و احتمال جهش به دست آمده بودند، اجرا شد. نتایج به دست آمده از تکرار آزمایشات نشان می‌دهد در جدول (۳) نشان داده شده است.

جدول (۳)- نتایج بهینه‌سازی با در نظر گرفتن تکرار آزمایشات

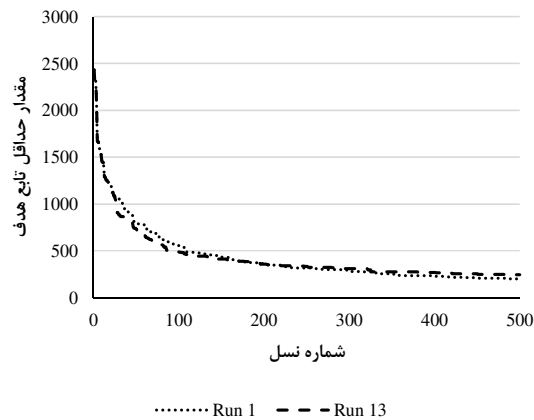
شماره بلوک	جمعیت اولیه	احتمال ترکیب	احتمال جهش	آزمایشات	تابع هدف	
					مقدار نسل اول	مقدار نهایی
۱	۴	۰/۵۵	۰/۰۱	۹ ۱۵	۴۸۲/۵۰۳	۸۶/۸۸
					۳۶۷۸/۴۲	۸۶/۸۸
۲	۴	۰/۵۵	۰/۵	۳ ۶	۱۷۹۰/۴۳	۴۸/۵۹
					۳۴۸۲/۸۶	۴۸/۵۹
۳	۴	۰/۹۵	۰/۰۱	۵ ۱۶	۳۸۷/۹۸	۸۹/۸۵
					۳۸۷/۹۸	۸۹/۸۵
۴	۴	۰/۹۵	۰/۵	۲ ۴	۱۸۳۷/۲۶	۴۷/۶۳
					۳۵۰۸/۳۶	۴۷/۶۳
۵	۶۴	۰/۵۵	۰/۰۱	۱ ۱۳	۱۹۸/۵۹	۹۱/۸۲
					۲۴۲۹/۲	۸۹/۹۱
۶	۶۴	۰/۵۵	۰/۵	۷ ۸	۱۷۸۷/۴۳	۲۶/۴۲
					۲۴۲۹/۲	۲۶/۴۲
۷	۶۴	۰/۹۵	۰/۰۱	۱۰ ۱۱	۲۱۰/۲۴	۹۱/۳۴
					۲۴۲۹/۲	۸۹/۴۹
۸	۶۴	۰/۹۵	۰/۵	۱۲ ۱۴	۱۴۲۱/۴۵	۴۱/۴۸
					۲۴۲۹/۲	۲۹/۸۱

همانگونه که در جدول (۳) مشاهده می‌گردد، در اغلب بلوکهای آزمایش، تکرار آزمایش تأثیری در نتیجه همگرایی ندارد.

<sup>1</sup> Intel Xeon

<sup>2</sup> ANOVA

برای بلوکهایی که اختلاف در نتیجه تکرار آزمایش مشاهده می‌گردد، روند همگرایی ترسیم گردید. یک نمونه آن برای بلوک ۷ که در آن آزمایشات شماره ۱ و ۱۳ تکرار شده‌اند، در شکل (۲) نشان داده شده است.

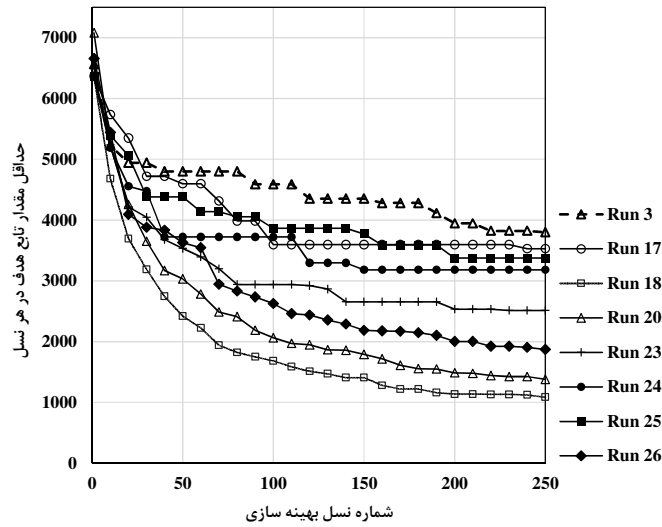


شکل (۲) - روند همگرایی در بهینه‌سازی بلوک ۷ (آزمایش شماره ۱ و ۱۳ تکراری می‌باشند)

روند همگرایی نشان داده شده در شکل (۲) بیانگر این مطلب است که اگر چه اختلاف مختصری بین نتیجه آزمایش اصلی و نتیجه تکرار آن وجود دارد، هم مقدار اختلاف بین دو نتیجه کم بوده و هم روند همگرایی بسیار مشابه می‌باشد. از این رو، به طور کیفی می‌توان اطمینان داشت که تکرار آزمایش برای بهینه‌سازی‌های اصلی ضروری نخواهد بود. لذا آزمایشات برای تعیین مقادیر بهینه پارامترهای الگوریتم ژنتیک بدون تکرار اجرا شدند که زمان را به شکل قابل توجهی کاهش داد. با اجرای تمامی بهینه‌سازی‌ها که مقادیر پارامترهای الگوریتم ژنتیک آنها از طراحی آزمایش تعیین شده بودند، مقدار حداقل تابع هدف (مقدار بهینه) برای هر بهینه‌سازی در جدول (۴) گزارش گشت. روند همگرایی تعدادی منتخب از بهینه‌سازی‌ها نیز در شکل (۳) نشان داده شده است.

جدول (۴) - مقادیر پارامترهای الگوریتم ژنتیک مقدار نهایی تابع هدف در پایان هر بهینه‌سازی

شماره آزمایش	جمعیت اولیه	احتمال ترکیب	احتمال جهش	مقدار نهایی تابع هدف	شماره آزمایش	جمعیت اولیه	احتمال ترکیب	احتمال جهش	مقدار نهایی تابع هدف
۱	۱۶	۰/۵۵	۰/۱	۳۳۰۶/۸	۱۵	۱۶	۰/۷	۰/۰۵	۲۳۱۶/۴
۲	۴	۰/۹۵	۰/۱	۴۰۹۹/۳	۱۶	۱۶	۰/۷	۰/۰۱	۱۳۴۷/۸
۳	۴	۰/۵۵	۰/۱	۳۷۹۸/۹	۱۷	۶۴	۰/۹۵	۰/۱	۳۵۲۹/۹
۴	۶۴	۰/۹۵	۰/۰۵	۲۳۱۶/۵	۱۸	۶۴	۰/۷	۰/۰۱	۱۰۸۸/۲
۵	۱۶	۰/۵۵	۰/۰۱	۹۵۷/۳	۱۹	۴	۰/۷	۰/۰۱	۱۷۹۶/۵
۶	۴	۰/۹۵	۰/۰۵	۲۸۳۲/۸	۲۰	۱۶	۰/۹۵	۰/۰۱	۱۳۷۹/۸
۷	۴	۰/۵۵	۰/۰۵	۳۳۱۵/۷	۲۱	۶۴	۰/۹۵	۰/۰۱	۱۳۰۰/۶
۸	۴	۰/۷	۰/۱	۴۴۵۷/۲	۲۲	۶۴	۰/۵۵	۰/۰۱	۹۹۱/۷
۹	۱۶	۰/۵۵	۰/۰۵	۲۳۰۰/۶	۲۳	۶۴	۰/۷	۰/۰۵	۲۵۱۴/۳
۱۰	۱۶	۰/۹۵	۰/۱	۳۷۹۰/۹	۲۴	۶۴	۰/۷	۰/۱	۳۱۸۲/۰
۱۱	۴	۰/۹۵	۰/۰۱	۱۸۹۸/۳	۲۵	۶۴	۰/۵۵	۰/۱	۳۳۷۲/۴
۱۲	۱۶	۰/۷	۰/۱	۳۲۶۷/۶	۲۶	۴	۰/۵۵	۰/۰۱	۱۸۷۲/۳
۱۳	۱۶	۰/۹۵	۰/۰۵	۳۰۶۱/۴	۲۷	۴	۰/۷	۰/۰۵	۲۶۱۸/۹
۱۴	۶۴	۰/۵۵	۰/۰۵	۲۴۱۷/۲	-	-	-	-	-



شکل (۳)- روند همگرایی برخی از بهینه‌سازیه‌ها (حداقل مقدار تابع هدف در هر نسل بر حسب شماره نسل)

با در نظر گرفتن این مطلب که بهینه‌سازی تا ۲۵۰ نسل ادامه یافت، مقدار تابع هدف به دست آمده برای این مجموعه بهینه‌سازی‌ها، بین ۹۵۷ و ۴۴۵۷ بود. از بین حالت‌های مختلف، ۱۱ حالت بهینه‌سازی در فرصت ۲۵۰ نسل، همگرایی مناسب (کمتر از مقدار حد وسط) نداشتند که تعداد جمعیت اولیه آنها پراکنده (از هر ۳ سطح)، احتمال ترکیب متنوع (از هر ۳ سطح) ولی احتمال جهش آنها فقط ۰/۰۵ و ۰/۱ بوده و هیچ موردی از بهینه‌سازی‌های ضعیف دارای احتمال جهش ۰/۰۱ نبودند. این مطلب به طور کیفی نشان می‌دهد که با کاهش احتمال جهش، همگرایی به مقادیر بهتری از تابع بهینه‌مقدور خواهد بود.

### ۳-۱- تحلیل آماری

به منظور بررسی آماری سه پارامتر جمعیت اولیه، احتمال ترکیب و احتمال جهش، از روش آنالیز واریانس و رگرسیون خطی با استفاده از نرم‌افزار مینی‌تب<sup>۱</sup> (نسخه ۱۶) بهره گرفته شد. جدول آنالیز واریانس به شرح جدول (۵) به دست آمد.

جدول (۵): آنالیز واریانس فاکتورها

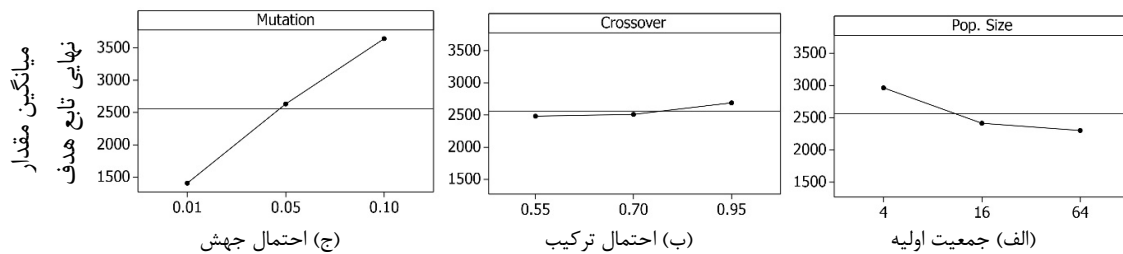
فاکتور	درجه آزادی	جمع مربعات (اصلاحی)	میانگین مربعات (اصلاحی)	مقدار F	مقدار P
جمعیت اولیه	۲	۲۲۷۲۹۵۶	۱۱۳۶۴۷۸	۲۰/۱۳	۰/۰۰۰
احتمال ترکیب	۲	۲۳۰۱۱۷	۱۱۵۰۵۹	۲/۰۴	۰/۱۵۷
احتمال جهش	۲	۲۲۶۷۷۸۶۳	۱۱۳۳۸۹۳۲	۲۰/۰۸	۰/۰۰۰
خطا	۲۰	۱۱۲۹۳۷۲	۵۶۴۶۹	-	-
مجموع	۲۶	-	-	-	-

با در نظر گرفتن سطح معنی‌داری  $\alpha=0/05$ ، مقدار P-value مربوط به فاکتور احتمال ترکیب از این مقدار بالاتر بود که در

<sup>۱</sup> Minitab

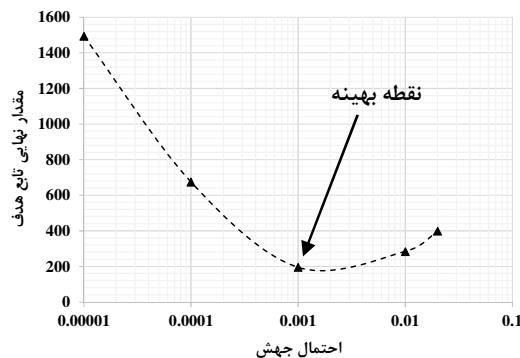
نتیجه رابطه معنی‌داری بین مقدار احتمال ترکیب و مقدار نهایی تابع هدف وجود ندارد. این در حالی است که بین فاکتورهای جمعیت اولیه و مقدار نهایی تابع هدف و نیز بین احتمال جهش و مقدار نهایی تابع هدف ارتباط معنی‌داری وجود دارد. عدم وجود ارتباط معنی‌داری بین مقدار نهایی تابع هدف و احتمال ترکیب در شکل (۴-ب) نیز قابل مشاهده است.

در مرحله بعد، رگرسیون خطی بین فاکتورها و تابع هدف نهایی انجام گرفت تا مقدار مناسب پارامترهای الگوریتم ژنتیک به دست آید. رگرسیون خطی برای داده‌های به دست آمده، ضریب همبستگی  $0.95/71$  را داشت که نشان می‌دهد توانایی پیش‌بینی بیش از  $95\%$  از تغییرات را دارد. همانگونه در شکل (۴) نشان داده شده است، مقدار تأثیر هر سه فاکتور بر متوسط مقدار نهایی تابع هدف به صورت مجزا ترسیم شده است. با بررسی تأثیر جمعیت اولیه که در شکل (۴-الف) نمایش داده شده است، این نتیجه استنباط می‌گردد که با افزایش تعداد جمعیت اولیه، مقدار کمتری برای تابع هدف قابل حصول باشد. اگر چه تابع هدف در مقایسه شرایطی که جمعیت اولیه ۴ و ۱۶ انتخاب گردیده تفاوت محسوسی دارد، ولی این تفاوت بین جمعیت ۱۶ و ۶۴ کاسته می‌شود. با توجه به زمان مورد نیاز برای بهینه‌سازی اصلی که ممکن است به چندین هزار نسل بینجامد، انتخاب تعداد نسل کمتر می‌تواند در تعداد نسل بسیار زیاد به همان پاسخ، ولی در زمان کمتر و نیاز به محاسبه کمتر حاصل گردد.



شکل (۴) - تأثیر فاکتورهای جمعیت اولیه، احتمال ترکیب و احتمال جهش بر متوسط مقدار نهایی تابع هدف

با بررسی تأثیر احتمال جهش که در شکل (۴-ج) نمایش داده شده است، مشاهده می‌گردد که به دلیل شیب زیاد منحنی رگرسیون، بیشتر تأثیر توسط این پارامتر بر روی مقدار نهایی تابع هدف ایجاد شده است. اگر چه احتمال جهش بالا، سبب می‌شود که الگوریتم ژنتیک از دام نقاط بهینه موضعی رهایی یابد، ولی در خصوص این نوع بهینه‌سازی که تعداد پارامتر تصمیم‌گیری بسیار بوده و ممکن است حساسیت زیادی نسبت به برخی از پارامترهای تصمیم‌گیری وجود داشته باشد، احتمال جهش زیاد نمی‌تواند موجبات نیل به مقدار تابع هدف کمتر را فراهم آورد. با توجه به اینکه مقدار متوسط تابع هدف با رسیدن به احتمال  $0.01$  جهش، باز هم شیب مثبت دارد، می‌توان انتظار داشت که با کاهش بیشتر احتمال جهش مقدار تابع هدف کمتری به دست آید. برای این منظور آزمایشات جدیدی برای مقدار کمتر احتمال جهش شامل:  $0.0001$ ،  $0.00001$ ،  $0.000001$  و  $0.0000001$  انجام شد که نتایج آن در شکل (۵) نشان داده شده است. همانگونه که در این شکل قابل مشاهده است، مقدار تابع هدف به دست آمده با الگوریتم ژنتیکی که احتمال  $0.00001$  باشد، کمترین مقدار است.





شکل (۵) - تأثیر احتمال جهش بر مقدار نهایی تابع هدف در دامنه بسط یافته  
(خط چین برای نشان دادن روند تغییرات ترسیم شده است)

### ۲-۳- تحلیل پاسخ بهینه

#### ۱-۲-۳- راکتور همزده کامل

پس از انتخاب پارامترهای بهینه الگوریتم ژنتیک، بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی احتراق متان و هوا در راکتور همزده به طور کامل پیاده‌سازی شد و بهینه‌سازی پس از ۱۰۰۰۰ نسل، به مقدار تابع هدف ۵۴/۸۹ رسید. نتیجه حاصل به این معنی است که مجموع درصد خطای نسبی دما و تمام ۵۳ جز موجود در تمام ۲۰ راکتور پس از بهینه‌سازی ۵۴/۸۹٪ است که با تقسیم این خطا بین ۲۰ راکتور و ۵۴ پارامتر خروجی در هر راکتور، خطای متوسط ۰/۰۵٪ برای هر پارامتر به دست آمده است. این در حالی است که مجموع خطاهای نسبی مدل در ابتدای بهینه‌سازی (برای حدسهای اولیه الگوریتم ژنتیک در اولین نسل) برابر ۶۳۶۳/۳۲٪ بوده که به طور متوسط برای هر پارامتر خروجی مدل ۱۱۷/۸٪ خطا داشته است. جهت مقایسه دقت مدل سینتیکی به دست آمده و مدل مبنا برای تمامی ۲۰ راکتور همزده، پروفیل دما و غلظت اجزا در یک شعله پیش‌اختلاط به عنوان نمونه با استفاده از هر دو مدل سینتیکی شبیه‌سازی گردید.

دمای پیش‌بینی شده توسط مدل بهینه در بهترین حالت بدون خطا به دست آمده و در بدترین حالت با خطای نسبی ۰/۰۰۷٪ که به طور متوسط خطایی بسیار کم و در حدود ۰/۰۰۲٪ داشته است، حاصل شد. مدل بهینه توانسته با دقت خوبی غلظت اجزای شیمیایی خروجی راکتور همزده را پیش‌بینی نماید. همانگونه که در شکل (۶) مشاهده می‌گردد، درصد خطای پیش‌بینی در اغلب اجزای شیمیایی کمتر از ۱۰٪ است و در ۷ موردی که مقدار خطا بیشتر از ۱۰٪ بوده است، مجموع متوسط کسر مولی آنها در تمام ۲۰ راکتور از  $1,92 \times 10^{-8}$  کمتر بوده است که قابل چشم‌پوشی می‌باشد.



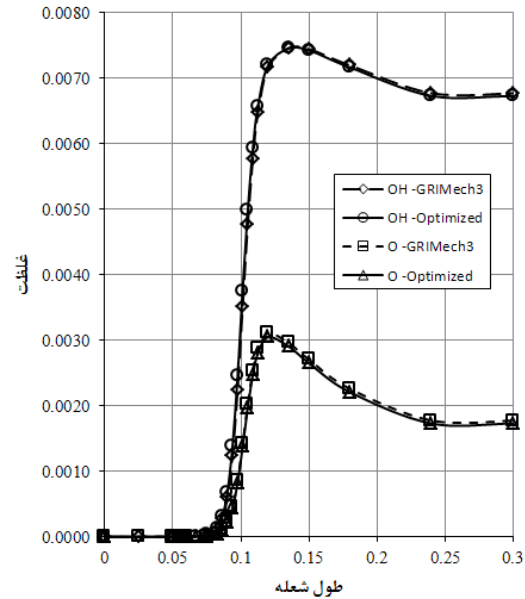
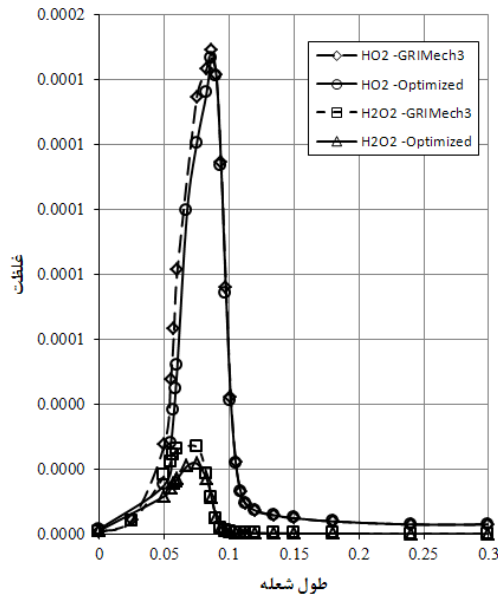
شکل (۶) - درصد خطای نسبی مدل سینتیکی بهینه در پیش‌بینی غلظت اجزای شیمیایی خروجی راکتورهای همزده

#### ۲-۳- شعله پیش‌اختلاط

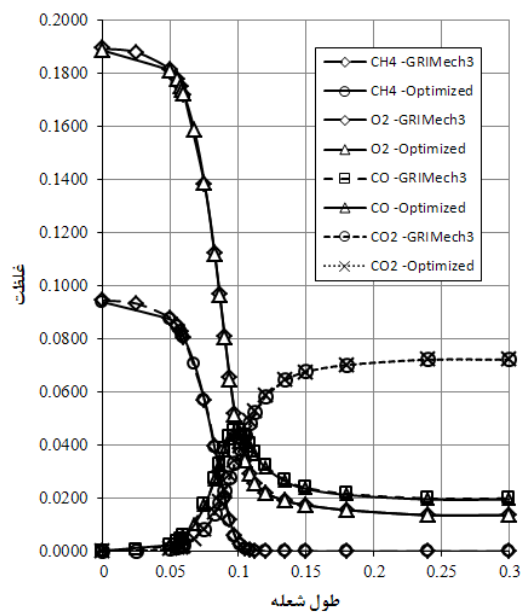
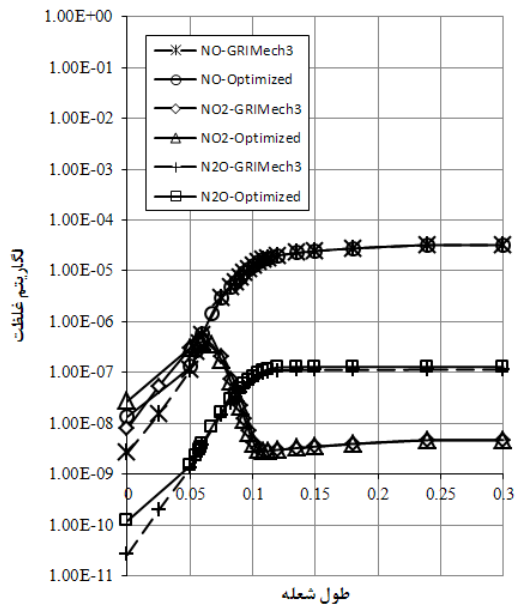
جهت حصول اطمینان بیشتر از دقت مدل سینتیکی بهینه، از آن در شبیه‌سازی شعله پیش‌آمیخته استفاده گردید که این امر توسط نرم افزار پرمیکس<sup>۲</sup> انجام شد. پروفیل غلظت اجزای با اهمیت مکانیسم که شامل رادیکالهای O، OH، HO<sub>2</sub>، H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> و

<sup>2</sup> PREMIX

مولکولهای متان، اکسیژن، مونوکسید کربن، دی اکسید کربن و نیز اکسیدهای نیتروژن می‌باشند، در نسبت سوخت به هوای ۰/۷۵ به دست آمد و با پروفیل‌های متناظر با مدل مبنا مقایسه گردید. پروفیل غلظت اجزای مورد نظر در شکل‌های (۷) تا (۱۰) نشان داده شده‌اند.



شکل (۷) - پروفیل کسر مولی رادیکالهای OH و O در طول شعله پیش‌آمیخته متان و هوا ( $\Phi=0,75$ )  
 شکل (۸) - پروفیل کسر مولی رادیکالهای HO<sub>2</sub> و H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> در طول شعله پیش‌آمیخته متان/هوا ( $\Phi=0,75$ )



شکل (۹) - پروفیل کسر مولی متان، اکسیژن، مونوکسید کربن و دی اکسید کربن در طول شعله پیش‌آمیخته متان و هوا ( $\Phi=0,75$ )  
 شکل (۱۰) - پروفیل کسر مولی اکسیدهای نیتروژن، شامل NO، NO<sub>2</sub> و N<sub>2</sub>O در طول شعله پیش‌آمیخته متان و هوا ( $\Phi=0,75$ )

نتایج بسیار خوب حاکی از این مطلب است که مدل به دست آمده علاوه بر راکتورهای همزده کامل، قابلیت

استفاده در شعله پیش‌اختلاطی را هم دارا خواهد بود. وجود تفاوت در برخی نقاط از منحنی‌ها از تفاوت تعداد گره‌ها در شبکه گره‌بندی در طول شعله ناشی شده است.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این تحقیق، در میان پارامترهای الگوریتم ژنتیک که شامل: جمعیت اولیه، احتمال ترکیب و احتمال جهش بودند، احتمال جهش به عنوان مؤثرترین پارامتر برای بهینه‌سازی پارامترهای مدل سینتیکی شناسایی شد که مقدار بهینه آن برای واکنش احتراق متان و هوا برابر ۰/۰۰۱ پیش‌بینی گشت. مقدار جمعیت اولیه ۱۶ برای بهینه‌سازی بهترین مقدار گزارش شد که اگر چه تعداد بیشتر ممکن بود در تعداد نسل کمتری به جواب بهینه همگرا گردد، ولی زمان مورد نیاز محاسبه برای این کمتر بود. نتایج نشان داد که پارامتر احتمال ترکیب بر روی همگرایی الگوریتم ژنتیک در این نوع مسایل، تأثیر معناداری ندارد. تکرار آزمایشات نشان داد که استفاده از الگوریتم ژنتیک در جهت بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی واکنشهای شیمیایی نیاز به تکرار ندارند و مقدار حاصله بهینه مطلق خواهد بود.

با وجود اینکه بازه اولیه برای پارامترهای سینتیکی در محدوده  $\pm 20\%$  مدل سینتیکی GRI-Mech قرار داشتند و مقدار دقیقی برای آنها فرض نشده بود، بهینه‌سازی به روش الگوریتم ژنتیک توانست با دقت بسیار خوبی مقادیر مدل سینتیکی را پیش‌بینی نماید که نتیجه آنها در مدل راکتور همزده و نیز در شعله پیش‌آمیخته با نتیجه مدل GRI-Mech مطابقت کامل داشت. به کمک این مزیت، می‌توان مدلهای سینتیکی واکنشهای احتراق مخلوط گازهای را که پارامترهای سینتیکی آنها دارای مقادیر نیستند، بسیار مؤثر خواهد بود.

استفاده از خطای نسبی دما و غلظت اجزا در خروجی راکتور همزده، تابع هدف مناسبی برای بهینه‌سازی پارامترهای سینتیکی واکنشها با استفاده از الگوریتم ژنتیک است. اگر چه، حتی در بهترین حالت نیز، خطای نسبی غلظت تعداد محدودی از اجزا زیاد بود، ولی هیچ کدام از اجزای نهایی و واسطه مهم احتراق را شامل نمی‌شد. استفاده از نتایج مدل راکتور همزده کامل در تابع هدف بهینه‌سازی می‌تواند ابزار مناسبی برای تعیین پارامترهای سینتیکی باشد. از آنجایی که حل عددی این مدل ساده بوده و زمان محاسبه کمی احتیاج دارد، لذا برای استفاده در بهینه‌سازی به روش الگوریتم ژنتیک که دفعات اجرای زیادی نیاز دارد، مناسب است.

#### ۵- تشکر و قدردانی

در پایان از همکاری صمیمانه آقایان دکتر افشین ابراهیمی و مهندس عبدل عاقلی در اداره خدمات ماشینی دانشگاه صنعتی سهند تبریز و مهندس بختیار احمدی در واحد انفورماتیک دانشگاه آزاد اسلامی واحد ایلخچی که امکان استفاده از سرورهای محاسباتی را فراهم نمودند، تشکر و قدردانی به عمل می‌آید.

#### ۶- مراجع

1. Frenklach, M., H. Wang, and M.J. Rabinowitz, *Optimization and analysis of large chemical kinetic mechanisms using the solution mapping method—combustion of methane*. Progress in Energy and Combustion Science, 18(1): pp. 47-73. 1992.
2. Leung, K.M. and R.P. Lindstedt, *Detailed kinetic modeling of C1 — C3 alkane diffusion flames*. Combustion and Flame, 102(1-2): pp. 129-160. 1995.
3. Bock, H.G., *Numerical treatment of inverse problems in chemical reaction kinetics*, in *Modelling of Chemical Reaction Systems: Proceedings of an International Workshop*, K.H. Ebert, P. Deuflhard, and W. Jäger, Editors. 1981, Springer: Heidelberg, Fed. Rep. of Germany. p. 102.

4. Deufflhard, P. and U. Nowak, *Efficient Numerical Simulation and Identification of Large Chemical Reaction Systems*. Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie, 90(11): pp. 940-946. 1986.
5. Milstein, J., *The inverse problem: estimation of kinetic parameters*, in *Modelling of Chemical Reaction Systems: Proceedings of an International Workshop*, K.H. Ebert, P. Deufflhard, and W. Jäger, Editors. 1981, Springer: Heidelberg, Fed. Rep. of Germany. p. 92.
6. Wolf, D. and R. Moros, *Estimating rate constants of heterogeneous catalytic reactions without supposition of rate determining surface steps an application of a genetic algorithm*. Chemical Engineering Science, 52(7): pp. 1189-1199. 1997.
7. Terry, D.B. and M. Messina, *Heuristic search algorithms for the determination of rate constants and reaction mechanisms from limited concentration data*. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, 38(6): pp. 1232-1238. 1998.
8. Von Arx, K.B., et al., *Using limited concentration data for the determination of rate constants with the genetic algorithm*. Environmental Science and Technology, 32(20): pp. 3207-3212. 1998.
9. Balland, L., et al., *A genetic algorithm with decimal coding for the estimation of kinetic and energetic parameters*. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 50(1): pp. 121-135. 2000.
10. Harris, S.D., et al., *The optimisation of reaction rate parameters for chemical kinetic modelling of combustion using genetic algorithms*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 190(8-10): pp. 1065-1090. 2000.
11. Elliott, L., et al., *Multiobjective genetic algorithm optimization for calculating the reaction rate coefficients for hydrogen combustion*. Industrial and Engineering Chemistry Research, 42(6): pp. 1215-1224. 2003.
12. Elliott, L., et al., *Genetic algorithms for optimisation of chemical kinetics reaction mechanisms*. Progress in Energy and Combustion Science, 30(3): pp. 297-328. 2004.
13. Elliott, L., et al., *Reaction mechanism reduction and optimization using genetic algorithms*. Industrial and Engineering Chemistry Research, 44(4): pp. 658-667. 2005.
14. Fatemi, S., M. Masoori, and R. Bozorgmehry Boozarjomehry, *Application of genetic algorithm in kinetic modeling and reaction mechanism studies*. Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering, 24(4): pp. 37-46. 2005.
15. [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).
16. Curran, H.J., *Detailed chemical kinetic modeling; Is there life after gri-mech 3.0?* Fuel Chemistry, 49(1): pp. 263-264. 2004.
17. Polifke, W., W. Geng, and K. Döbbeling, *Optimization of rate coefficients for simplified reaction mechanisms with genetic algorithms*. Combustion and Flame, 113(1-2): pp. 119-135. 1998.
18. Elliott, L., et al., *The use of ignition delay time in genetic algorithms optimisation of chemical kinetics reaction mechanisms*. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 18(7): pp. 825-831. 2005.
19. Hernández, J.J., R. Ballesteros, and J. Sanz-Argent, *Reduction of kinetic mechanisms for fuel oxidation through genetic algorithms*. Mathematical and Computer Modelling, 52(7-8): pp. 1185-1193. 2010.
20. Huang, H. and W. Su, *Optimization of a reduced chemical kinetic model for HCCI engine simulations by micro-genetic algorithm*. Transactions of Tianjin University, 12(1): pp. 66-71. 2006.
21. Kim, S.K., et al., *Application of a genetic algorithm to the optimization of rate constants in chemical kinetic models for combustion simulation of HCCI engines*. JSME International Journal, Series B: Fluids and Thermal Engineering, 48(4): pp. 717-724. 2006.
22. Nobakht, A.Y., R.K. Saray, and G.S. Astiar, *Optimization of GRI-mech 3.0 mechanism using HCCI combustion models and genetic algorithm*. International Journal of Engineering, Transactions A: Basics, 24(2): pp. 155-168. 2011.
23. Davis, L., *Handbook of genetic algorithms*. 1991, New York: Van Nostrand Reinhold. xii, 385 p.
24. Haupt, R.L. and S.E. Haupt, *Practical genetic algorithms*. 2nd ed. 2004, Hoboken, N.J.: John Wiley. xvii, 253 p.

25. Rothlauf, F., *Representations for genetic and evolutionary algorithms*. 2nd ed. 2006, Heidelberg: Springer. xvii, 325 p.
26. Sivanandam, S.N. and S.N. Deepa, *Introduction to genetic algorithms*. 2007, Berlin ; New York: Springer. xix, 442 p.
27. Deb, K., et al., *A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II*. *Evolutionary Computation*, IEEE Transactions on, 6(2): pp. 182-197. 2002.
28. Meeks, E., et al., *AURORA: A Fortran program for modeling well stirred plasma and thermal reactors with gas and surface reactions*. 1996, Sandia National Laboratories.
29. Elliott, L., et al., *Incorporation of physical bounds on rate parameters for reaction mechanism optimization using genetic algorithms*. *Combustion Science and Technology*, 175(4): pp. 619-648. 2003.
30. *NIST Chemical Kinetics Database: A compilation of kinetics data on gas-phase reactions*. 2013, National Institute of Standards and Technology.