



## استخراج ضرایب نرخ واکنش‌های کلی چندمرحله‌ای احتراق‌های هیدروکربنی متناظر با شرایط عملکردی محفظه برای پیش‌بینی آلاینده‌ها

علیرضا شاکری<sup>1</sup>، کریم مظاهری<sup>2\*</sup>

1- دانشجوی دکتری، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

2- استاد، مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

\* تهران، صندوق پستی 1458833351، mazaheri@sharif.edu

### چکیده

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 26 شهریور 1394

پذیرش: 15 آذر 1394

ارائه در سایت: 09 دی 1394

کلید واژگان:

مکانیزم‌های کلی پنج مرحله‌ای

بهینه‌ساز تکامل دیفرانسیلی

حل گر راکتور کاملاً مخلوط‌شده

دینامیک سیالات محاسباتی

مکانیزم کامل جی.آر.آی-3

در این مقاله یک روش عددی جهت استخراج ضرایب نرخ واکنش‌های کلی چندمرحله‌ای دلخواه برای احتراق هر سوخت هیدروکربنی با هوا متناسب با شرایط عملکردی ارائه و پیاده‌سازی شده است. اساس روش عددی بر اجرای هم‌زمان دو حل گر یکی حل گر میدان احتراقی و دیگری حل گر بهینه‌ساز عددی استوار است. برای حل میدان احتراقی از یک حل گر راکتور کاملاً مخلوط شده استفاده شده که هر یک از سینتیک شیمیایی کامل، اسکلتی یا کاهش یافته را می‌تواند به‌عنوان معیار در نظر گیرد. انتخاب ضرایب نرخ واکنش‌های کلی چندمرحله‌ای از پیش تعریف شده به‌عنوان متغیرهای طراحی بهینه‌ساز تکامل تدریجی و در نظر گرفتن اختلاف غلظت مواد حاصل از احتراق به‌دست‌آمده از سینتیک مبنا و مکانیزم چندمرحله‌ای به‌عنوان تابع هدف، مقادیر بهینه ضرایب نرخ را متناظر با شرایط عملکردی دلخواه ایجاد می‌کند. برای بررسی اعتبار و کاربرد این روش، سه مکانیزم کلی پنج مرحله‌ای برای احتراق متان با هوا متناسب با سه فشار عملکردی 1، 6.28 و 30 اتمسفر در محدوده نسبت هم‌ارزی 0.4-1.0 جهت پیش‌بینی انتشار آلاینده‌های مونوکسیدنیترژن و مونوکسیدکربن استخراج شده است. غلظت تمامی مواد حاصل از احتراق از جمله آلاینده‌های مونوکسیدنیترژن و مونوکسیدکربن و دمای شعله به‌دست آمده از مکانیزم‌های پنج مرحله‌ای ارائه شده با دقت بالایی با نتایج به‌دست آمده از مکانیزم کامل جی.آر.آی-3 تطابق دارد. یک مطالعه عددی مقایسه‌ای با استفاده از کد دینامیک سیالات محاسباتی برای یک محفظه احتراق آزمایشگاهی با به‌کارگیری مدل پنج مرحله‌ای تولید شده و یک مکانیزم کلی هشت مرحله‌ای تابع فشار (پیشنهاد شده توسط نووسیلوو) در فشار عملکردی 6.28 اتمسفر، انجام شده است.

## Extraction of Rate Coefficients of Multi-step Global Reactions for Combustion of Hydrocarbon Fuels Regarding Operating Conditions for Pollutant Prediction

Alireza Shakeri<sup>1</sup>, Karim Mazaheri<sup>2\*</sup>

1- Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran.

2- Department of Aerospace Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran.

\* P.O.B. 1458833351 Tehran, Iran, mazaheri@sharif.edu

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper  
Received 17 September 2015  
Accepted 06 December 2015  
Available Online 30 December 2015

### Keywords:

Five step global mechanisms  
Differential evolution optimizer  
Perfectly stirred reactor  
Computational fluid dynamics  
Full GRI.3 mechanism

### ABSTRACT

In this paper, a numerical method to extract rate coefficients of multi-step global reactions for combustion of hydrocarbon fuels with air regarding combustor operating conditions is presented and implemented. The numerical procedure is based on simultaneous interactions of two solvers including a solver for combustive field and another solver as numerical optimizer. A simple reactor solver, namely Perfectly Stirred Reactor (PSR) is employed as a solver for reactive flow, and chemical kinetics such as detailed, skeletal or reduced can be considered as benchmark mechanism. Considering rate coefficients of predefined multi-step global reactions as design variables for Differential Evolution (DE) optimizer and the difference between product concentrations obtained from benchmark mechanism and multi-step mechanism as cost function gives optimized values of rate coefficients regarding desired conditions. To confirm reliability and applicability of the present method, three different five-step models are generated for methane-air combustion under three different operating pressures (1.0, 6.28, and 30.0 atm.) and equivalence ratio ranges between 0.4-1.0 for predicting NO and CO emissions. Product concentrations such as NO and CO and flame temperature obtained from the presented five-step mechanisms are in close agreement with results obtained from the full GRI-3.0 mechanism. A comparative numerical study by means of Computational Fluid Dynamics (CFD) code has been performed for a laboratory scale combustor employing the generated five-step model and an eight-step pressure-dependent global mechanism (suggested by Novoselov) under operating pressure of 6.28 (atm.).

### 1-مقدمه

مهم (مانند هیدروژن، مونوکسیدکربن یا ..) تشکیل شده‌اند. تقسیم‌بندی آن‌ها براساس روابط نرخ می‌تواند به دو دسته «مکانیزم‌های با نرخ غیرآرنیوسی» و «مکانیزم‌های با نرخ شبه‌آرنیوسی» انجام شود. در دسته نخست نرخ انجام هر

مکانیزم‌های کلی احتراق متان- هوا از چندین واکنش کلی یا ابتدایی برای تشکیل گونه‌های اصلی (دی‌اکسیدکربن و آب) یا تولید و مصرف رادیکال‌های

Please cite this article using:

A. Shakeri, K. Mazaheri, Extraction of Rate Coefficients of Multi-step Global Reactions for Combustion of Hydrocarbon Fuels Regarding Operating Conditions for Pollutant Prediction, Modares Mechanical Engineering, Vol. 16, No. 1, pp. 163-172, 2015 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

واکنش به‌صورت یک تابع خطی برحسب نرخ خالص تولید گونه‌های یک مکانیزم کامل استخراج می‌شود [1-3]. هرچند که استفاده از این نوع مکانیزم‌ها در حل چندبعدی علاوه بر هزینه محاسباتی زیاد، برای کاربردهای بهینه‌سازی محفظه ناکارآمد خواهد بود. در دسته دوم که استفاده از این نوع مکانیزم‌ها در دینامیک سیالات محاسباتی، هزینه محاسبات را بسیار کاهش می‌دهد [4,5]، رابطه آرنیوس با ضرایب نرخ متناسب (ضریب پیش‌نمایی، توان دما، توان غلظت گونه‌ها و انرژی آزادسازی) با محدوده عملکردی مورد نظر می‌تواند استخراج شود [6-14]. از چالش‌های اصلی این نوع مکانیزم‌ها در قابلیت پیش‌بینی آلاینده‌های مونوکسیدنیترژن و مونوکسیدکربن، چگونگی تعیین ضرایب نرخ آن‌ها تحت محدوده‌ای از شرایط عملکردی و همچنین استفاده از این ضرایب تحت محدوده دیگری از شرایط عملکردی است و یافتن ضرایب با یکی از دو روش تجربی (برای مکانیزم‌های یک تا سه مرحله‌ای) یا عددی قابل انجام است.

با بررسی مطالعات محققان، عدم وجود ابزاری انعطاف‌پذیر جهت استخراج ضرایب نرخ متناسب با محدوده دلخواه پارامترهای عملکردی مشهود است. اگرچه نیکول [13] با استفاده از یک مدل راکتوری یک‌بعدی و تحلیل رگرسیون<sup>1</sup> ضرایب نرخ مکانیزم پنج مرحله‌ای پیشنهادی خود را برای شرایط اتمسفریک و فشار بالا استخراج کرد، ولی نتایج برای فشارهای بالا گزارش نشد، همچنین اثرات تغییر دمای نخستین مخلوط سوخت- هوا و محدوده‌های مختلف نسبت هم‌ارزی بر این ضرایب مورد مطالعه قرار نگرفت. از سویی مکانیزم هشت مرحله‌ای نووسیلوو [14] با روش عددی مبنی بر استفاده از دو مدل راکتوری، به استخراج ضرایب نرخ برای محدوده وسیعی از پارامترهای عملکردی محفظه پرداخت. با توجه به حساسیت زیاد این ضرایب به شرایط عملکردی [13]، استفاده از آن‌ها برای یک شرایط عملکردی با محدوده‌ای کوچک‌تر یا محدوده‌ای خارج از محدوده استخراج شده، منجر به ایجاد خطا خواهد شد.

در مطالعه حاضر یک الگوریتم عددی ترکیبی جهت تعیین ضرایب نرخ بهینه واکنش‌های مکانیزم چندمرحله‌ای تعریف شده متناسب با محدوده عملکردی دلخواه ارائه شده است. این الگوریتم عددی با اثر متقابل حل‌گر راکتور کاملاً مخلوط شده<sup>2</sup> با بهینه‌ساز تکامل‌تدریجی<sup>3</sup> به تعیین ضرایب نرخ واکنش‌های مکانیزم پنج مرحله‌ای تعریف شده توسط نیکول تحت سه شرایط عملکردی متفاوت پرداخته است. اعتبار کلی روش با مقایسه غلظت آلاینده‌ها با مکانیزم کامل تحت این سه شرایط نشان داده شده است. مکانیزم کامل جی.آر.آی-3 به‌عنوان مکانیزم مبنا [15] و دو نقطه عملکردی از مرجع [1] و یک نقطه عملکردی از مرجع [16] به‌عنوان شرایط عملکردی مبنا انتخاب شده‌اند. در پایان مطالعه عددی آلاینده‌های یک محفظه احتراق آزمایشگاهی تحت فشار عملکردی 6.28atm، دقیق‌تر بودن مکانیزم پنج مرحله‌ای تولید شده برای پیش‌بینی آلاینده مونوکسیدنیترژن را در مقایسه با مکانیزم هشت مرحله‌ای نووسیلوو [5] نشان می‌دهد.

## 2- الگوریتم محاسباتی

الگوریتم روش کنونی که فلوجارت محاسباتی آن در شکل 1 نشان داده شده است، از دو حل‌گر راکتور کاملاً مخلوط شده (PSR) برای حل صفربعدی میدان واکنشی، بهینه‌ساز تکامل‌تدریجی (DE) (بخش 2-2) برای بهینه‌سازی عددی ضرایب نرخ واکنش‌ها تشکیل شده است. در ادامه هر یک از باکس‌های

این الگوریتم تشریح شده‌اند.

همان‌طور که در باکس متوازی‌الاضلاع فلوجارت مشاهده می‌شود، ابتدا یک مکانیزم کامل (یا یک مکانیزم اسکلتی [17]) به‌عنوان مکانیزم مبنا و متغیرهای طراحی بهینه‌ساز (ضرایب نرخ واکنش‌های یک مکانیزم چندمرحله‌ای) معرفی و محدوده دلخواهی از شرایط عملکردی (نسبت هم‌ارزی و مقادیر مشخصی از فشار عملکردی و دمای نخستین) در نظر گرفته شده است. شایان یاد است که در این مقاله ضرایب نرخ واکنش‌های مکانیزم پنج مرحله‌ای ارائه شده توسط نیکول [13] (توصیف کامل در بخش 3) به‌عنوان متغیرهای طراحی قلمداد شده‌اند. براساس نخستین باکس مستطیلی، با فراخوانی حل‌گر راکتور کاملاً مخلوط‌شده و به‌کارگیری مکانیزم کامل، غلظت مواد حاصل از احتراق (از جمله آلاینده‌های مونوکسیدنیترژن و مونوکسیدکربن) و دمای شعله محاسبه شده که غلظت این آلاینده‌ها به‌عنوان مقادیر هدف برای بهینه‌ساز ذخیره شده‌اند. دومین باکس مستطیلی، بهینه‌ساز تکامل‌تدریجی مقدار نخستین برای متغیرهای طراحی (ضرایب نرخ واکنش‌های مکانیزم پنج مرحله‌ای) در نظر می‌گیرد. سپس با فراخوانی حل‌گر راکتور کاملاً مخلوط‌شده، غلظت مواد حاصل از احتراق و دمای شعله (با به‌کارگیری این مکانیزم پنج مرحله‌ای پیشنهادشده توسط بهینه‌ساز) محاسبه می‌شود (سومین باکس مستطیلی). باکس لوزی، غلظت آلاینده‌های مونوکسیدنیترژن و مونوکسیدکربن به‌دست‌آمده از مکانیزم پنج مرحله‌ای پیشنهاد شده توسط بهینه‌ساز با مقادیر به‌دست‌آمده از مکانیزم کامل (تابع هدف) مورد مقایسه قرار گرفته و پیشنهاد مقادیر جدید برای ضرایب نرخ واکنش توسط بهینه‌ساز تا کمینه‌شدن اختلاف این دو دسته مقادیر ادامه می‌یابد.

## 2-1- حل‌گر راکتور کاملاً مخلوط‌شده

در این بخش ابتدا معادلات حاکم بر راکتور کاملاً مخلوط‌شده که از ترکیب قانون بقای جرم برای گونه‌ها و قانون بقای انرژی به‌دست‌آمده، معرفی شده و به جزئیات استخراج این مدل پرداخته نمی‌شود. دستگاه معادلات جبری غیرخطی حاکم بر مدل راکتور کاملاً مخلوط‌شده در رابطه (1) نشان داده شده است [18].

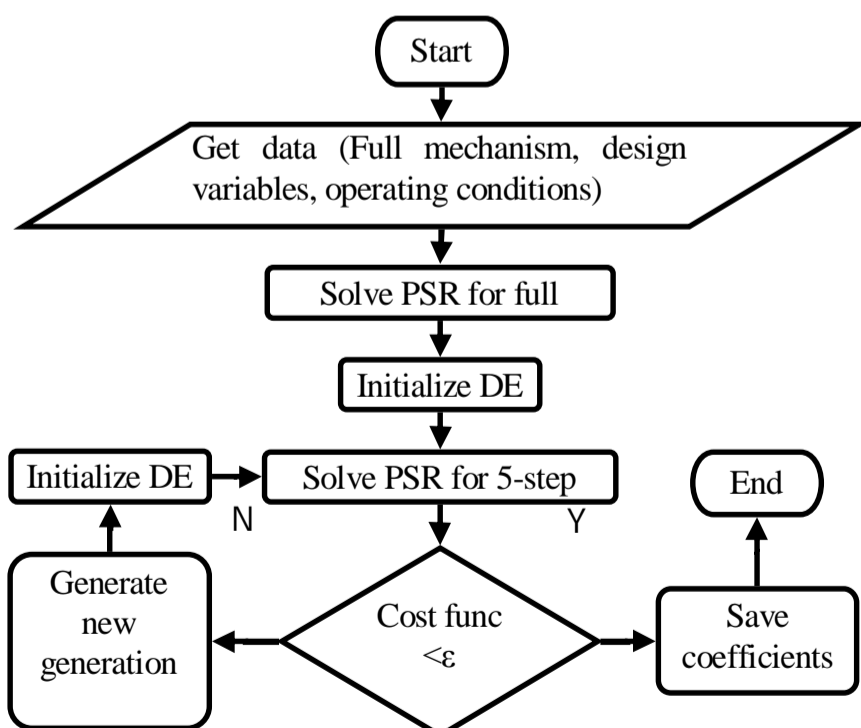
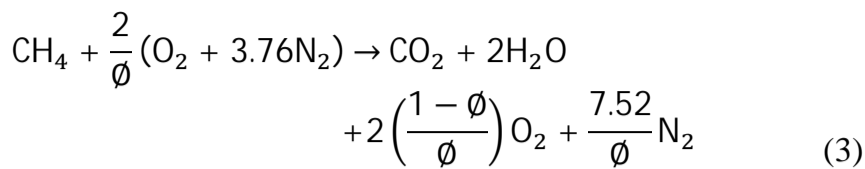


Fig. 1 Flow chart of the present analysis

شکل 1 فلوجارت تحلیل روش حاضر

- 1- Regression analysis
- 2- Perfectly Stirred Reactor
- 3- Differential Evolution optimizer



براساس تعریف، می‌توان کسر جرمی مواد اولیه را از رابطه (4) محاسبه کرد.

$$Y_{\text{CH}_4} = \frac{16\phi}{16\phi + 274.5} \quad (\text{a-4})$$

$$Y_{\text{O}_2} = \frac{64}{16\phi + 274.5} \quad (\text{b-4})$$

$$Y_{\text{N}_2} = \frac{210.5}{16\phi + 274.5} \quad (\text{c-4})$$

یکی دیگر از ورودی‌های محاسباتی، خواص ترمودینامیکی گونه احتراقی  $k$  شامل حرارت ویژه، انتالپی و انتروپی بوده که به‌صورت توابع چند جمله‌ای برحسب دمای شعله به‌صورت رابطه (5) قابل محاسبه‌اند [19].

$$\frac{C_{pk}^0}{R} = a_{1k} + a_{2k}T_k + a_{3k}T_k^2 + a_{4k}T_k^3 + a_{5k}T_k^4 \quad (\text{a-5})$$

$$\frac{H_k^0}{RT_k} = b_{1k} + \frac{b_{2k}}{2}T_k + \frac{b_{3k}}{3}T_k^2 + \frac{b_{4k}}{4}T_k^3 + \frac{b_{5k}}{5}T_k^4 + \frac{b_{6k}}{T_k} \quad (\text{b-5})$$

$$\frac{S_k^0}{R} = c_{1k} \ln T_k + c_{2k}T_k + \frac{c_{3k}}{2}T_k^2 + \frac{c_{4k}}{3}T_k^3 + \frac{c_{5k}}{4}T_k^4 + c_{7k} \quad (\text{c-5})$$

همان‌طور که در قسمت ورودی‌های معلوم نیز اشاره شد، ضرایب  $a_i$  و  $b_i$  و  $c_i$  برای تمام گونه‌های احتراقی در فایل داده‌های ترمودینامیکی موجود است [19].

یکی دیگر از ورودی‌های محاسباتی، ثابت نرخ انجام واکنش رفت بوده که برای واکنش‌های مستقل از فشار از رابطه (6) موسوم به رابطه آرنیوس برحسب دمای شعله محاسبه می‌شود [18].

$$k_{fr} = A_r T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{E_r}{R_u T}\right) \quad (6)$$

برای واکنش‌های تابع فشار روش ترو ارائه شده که مقدار ثابت نرخ انجام واکنش تحت فشار مورد نظر از رابطه (7) محاسبه می‌شود [20].

$$k = k_{\infty} \left( \frac{P_r}{1 + P_r} \right)^F \quad (\text{a-7})$$

$$P_r = \frac{k_0}{k_{\infty}} [M] \quad (\text{b-7})$$

$$\log F = \left\{ 1 + \left[ \frac{\log P_r + C}{n - d(\log P_r + C)} \right]^2 \right\}^{-1} \log F_{\text{cent}} \quad (\text{c-7})$$

$$C = -0.4 - 0.67 \log F_{\text{cent}} \quad (\text{d-7})$$

$$n = 0.75 - 1.27 \log F_{\text{cent}} \quad (\text{e-7})$$

$$d = 0.14 \quad (\text{f-7})$$

$$F_{\text{cent}} = (1-\alpha) \exp\left(-\frac{T}{T^{***}}\right) + \alpha \exp\left(-\frac{T}{T^*}\right) + \exp\left(-\frac{T}{T^{**}}\right) \quad (\text{g-7})$$

در این رابطه  $[M]$ ، غلظت مخلوط با در نظر گرفتن ضرایبی برای اعمال اثرات جسم سوم<sup>1</sup> در واکنش‌های مربوطه است [15].  $k_0$  و  $k_{\infty}$ ، ضرایب نرخ واکنش برای دو حالت فشار پایین و فشار بالا بوده که از فرمول آرنیوس مطابق رابطه (8) محاسبه می‌شود.

$$k_0 = A_0 T^{\beta_0} \exp\left(-\frac{E_0}{RT}\right) \quad (\text{a-8})$$

$$k_{\infty} = A_{\infty} T^{\beta_{\infty}} \exp\left(-\frac{E_{\infty}}{RT}\right) \quad (\text{b-8})$$

ضرایب  $\alpha$ ،  $T^{***}$ ،  $T^*$  و  $T^{**}$  ثوابتی هستند که مقادیرشان در فایل مربوط به

$$\begin{cases} \dot{m} \left( \sum_{i=1}^K Y_{i,\text{in}} \cdot h_i(T) - \sum_{i=1}^K Y_{i,\text{ou}} \cdot h_i(T) \right) = -Q \\ \dot{\omega}_1 \cdot M W_1 \cdot V + \dot{m} (Y_{1,\text{in}} - Y_{1,\text{ou}}) = 0 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_k \cdot M W_k \cdot V + \dot{m} (Y_{k,\text{in}} - Y_{k,\text{ou}}) = 0 \end{cases} \quad k = 1, \dots, K \quad (1)$$

که  $k$ ،  $K$ ،  $Y_{k,\text{in}}$ ،  $Y_{k,\text{ou}}$ ،  $M W_k$ ،  $h_k$ ،  $\dot{\omega}_k$ ،  $T$ ،  $Q$ ،  $V$  و  $\dot{m}$  به‌ترتیب بیانگر شماره گونه، تعداد گونه‌ها، کسر جرمی مواد نخستین، کسر جرمی محصولات احتراق، جرم ملکولی، انتالپی ویژه، نرخ تولید خالص گونه، دمای شعله، افت حرارت، حجم راکتور و شار جرمی راکتور است. از میان پارامترهای معرفی‌شده در راکتور کاملاً مخلوط‌شده، پارامترهای کسر جرمی مواد حاصل از احتراق ( $K$  مجهول) و دمای شعله (1 مجهول) به‌عنوان خروجی ( $K+1$  مجهول) و سایر پارامترها ورودی محسوب می‌شوند که در ادامه چگونگی محاسبه هریک بیان شده است. برای حل دستگاه بالا از روش نیوتن رافسون استفاده شده است که جزئیات روش در مرجع [18] وجود دارد.

### 2-1-1-1-1-2 ورودی‌های معلوم

یکی از ورودی‌های معلوم برای دستگاه معادلات بالا، ضرایب نرخ واکنش‌های ابتدایی مربوط به مکانیزم میناست. جهت وضوح موضوع، تمام واکنش‌های ابتدایی به‌صورت کلی رابطه (2) در نظر گرفته شده‌اند.

$$\sum_{k=1}^K \nu_{kr} \cdot \chi_k \xrightleftharpoons{k_{fr}, k_{br}} \sum_{k=1}^K \nu_{kr} \cdot \chi_k, \quad r = 1, \dots, R \quad (2)$$

که  $\chi_k$ ،  $R$ ،  $\nu_{kr}$  و  $\nu_{kr}$  به‌ترتیب گونه احتراق  $k$ ام، تعداد کل واکنش‌های ابتدایی، ضریب استوکیومتریکی گونه احتراقی  $k$ ام در مسیر رفت واکنش  $r$ ام و ضریب استوکیومتریکی گونه احتراقی  $k$ ام در مسیر برگشت واکنش  $r$ ام که این ضرایب برای هر یک از گونه‌های احتراقی در فایل مربوط به واکنش‌ها آورده شده است.

از جمله ورودی‌های معلوم دیگر، سه ضریب  $A_r$ ،  $\beta_r$  و  $E_r$  (ضریب پیش‌نمایی، توان دما و انرژی فعال‌سازی) در رابطه آرنیوس (که در بخش ورودی‌های محاسباتی معرفی شده است) که مقادیر متناظر برای هر یک از واکنش‌های ابتدایی در فایل واکنش‌ها موجود است. برای محاسبه نرخ واکنش‌های ابتدایی تابع فشار، رابطه آرنیوس قابل استفاده نبوده و توابع دیگری پیشنهاد شده (که در بخش ورودی‌های محاسباتی معرفی شده است) و حاوی ثوابتی هستند که به‌عنوان ورودی‌های معلوم در فایل مربوط به واکنش‌ها قابل مشاهده است.

ضرایب چند جمله‌ای‌های ارائه‌شده برای خواص ترمودینامیکی تمام گونه‌ها (که در بخش ورودی‌های محاسباتی معرفی شده‌اند) در فایل داده‌های ترمودینامیکی موجود است [19].

وزن ملکولی و انتالپی تشکیل گونه احتراقی  $k$ ام ( $h_{f,k}^0$ ) نیز از ورودی‌های معلوم محسوب می‌شود که داده‌های آن در فایل داده‌های ترمودینامیکی ارائه شده است [19].

### 2-1-1-2 ورودی‌های محاسباتی

اگرچه می‌توان کاهش حرارت را با روابط تجربی موجود تخمین زد، در این‌جا از افت حرارت صرف‌نظر شده است.

کسر جرمی مواد اولیه یکی از ورودی‌های محاسباتی به شمار می‌رود که برای محاسبه آن‌ها باید ابتدا معادله واکنش کلی یک مرحله‌ای احتراق متان-هوا برحسب نسبت هم‌ارزی براساس رابطه (3) در نظر گرفته شود.

1- Third body efficiency

## 2-2- بهینه‌ساز تکامل تدریجی

عملکرد مکانیزم پنج مرحله‌ای تحت تأثیر 17 پارامتر مستقل از یکدیگر است (توصیف در بخش 3) و قرار است که ضرایب بهینه این مکانیزم از دیدگاه کمینه بودن آلاینده‌ها متناسب با محدوده پارامترهای عملکردی مورد نظر تعیین شوند. معیاری برای سنجش عملکرد این سیستم به‌عنوان تابع هدف در یک فضای 17 بعدی بایستی تعریف گردد (توصیف کامل در پاراگراف آخر). روش‌های بهینه‌سازی را می‌توان به دو دسته کلی، تکاملی و گرادیانی تقسیم‌بندی کرد. کاربرد روش نخست برای مسایل گسسته و روش دوم برای مسایل پیوسته است. مسایل پیوسته به مسایلی اطلاق می‌شود که بین تابع هدف و متغیرهای طراحی یک تابع پیوسته برقرار باشد و این تابع نسبت به هریک از این متغیرها مشتق‌پذیر باشد. مزیت عمده روش‌های گرادیانی نسبت به روش‌های تکاملی سرعت و دقت بالاست. مزیت عمده روش‌های تکاملی نسبت به گرادیانی، کاربردی بودن برای موضوع مورد بحث در این مقاله است؛ بنابراین روش تکامل تدریجی در این‌جا استفاده شده است [22].

در این پاراگراف تئوری بهینه‌ساز تکامل تدریجی به اختصار معرفی شده است. فرآیند بهینه‌سازی با روش تکامل تدریجی از ایجاد نخستین نسل تصادفی در فضای مورد بررسی آغاز می‌شود که هر نسل شامل  $N_p$  عضو و هر عضو معرف یک بردار با 17 مؤلفه است. در مرحله تولید نسل،  $N_p$  عضو تصادفی در فضای 17 بعدی تابع هدف (که در ادامه معرفی شده) ایجاد می‌شود. مرحله بعدی مرحله جهش است که برای هر نسل،  $N_p$  مرتبه تکرار خواهد شد. در این مرحله به‌ازای هر یک از اعضای نسل کنونی (عضو هدف)، 3 عضو غیرهمسان دیگر به‌صورت تصادفی انتخاب می‌شود (جمعاً 4 عضو غیرهمسان). از سه بردار گزینش شده، دو بردار وارد یک تفاضل وزنی<sup>1</sup> شده و حاصل این تفاضل یک بردار است که با بردار سوم جمع می‌شود. این فرآیند  $N_p$  مرتبه تکرار می‌شود تا  $N_p$  بردار وزنی ایجاد شود. مرحله بعدی مرحله ترکیب است که مؤلفه‌های هر کدام از بردارهای نسل کنونی (هر بردار معرف یک عضو) با مؤلفه‌های بردار جهش‌یافته خود ترکیب شده و یک بردار به نام بردار آزمون<sup>2</sup> یا بردار کاندید<sup>3</sup> تشکیل می‌دهد. بردار آزمون معرف عضو جدیدی است که علاوه بر خصوصیات والد خود تلفیقی از خصوصیات دیگر اعضای هم‌نسل والدش را داراست. این مرحله برای هر نسل  $N_p$  مرتبه تکرار می‌شود. در مرحله گزینش عضو جدید با والد خود از نظر ارضا تابع هدف مقایسه می‌شود و بدین ترتیب اعضای نسل آینده مشخص می‌شود. علاقمندان برای کسب جزئیات می‌توانند به مرجع [22] مراجعه کنند.

جهت راه‌اندازی بهینه‌ساز تکامل تدریجی در روند برنامه کامپیوتری سه المان اصلی برای آن فراهم شده است. این المان‌ها عبارتند از متغیرهای طراحی، تابع هدف و محدودیت‌ها (قیود). مجهولات ضرایب نرخ واکنش‌های مکانیزم پنج مرحله‌ای نیکول (توصیف در بخش 3) به‌عنوان متغیرهای طراحی تعیین شده‌اند. تابع هدف به‌عنوان ارزیاب اختلاف غلظت آلاینده‌های مونوکسیدنیترژن و مونوکسیدکربن به‌دست‌آمده از مکانیزم پنج مرحله‌ای و مکانیزم کامل جی.آر.آی-3 طبق رابطه (18) محاسبه می‌شود. برای هر یک از متغیرهای طراحی محدوده‌ای شامل کمترین و بیشترین مقدار ممکنه به‌عنوان قید طراحی در روند برنامه رایانه‌ای اعمال شده است. پس از حل نهایی در صورتی که ضرایب به‌دست‌آمده روی یکی از کران‌ها قرار گیرند، به اندازه‌ی بازه مورد نظر تغییر کرده و حل انجام می‌شود تا نتیجه مطلوب

واکنش‌ها وجود دارد. با توجه به اینکه تعداد واکنش‌های موجود در مکانیزم کامل جی.آر.آی-3 که ثابت نرخ آن‌ها باید از این روش محاسبه گردد زیادند، در این‌جا ارائه مقادیرشان غیر ممکن است [15]. روش دیگری که برای محاسبه ثابت نرخ انجام واکنش رفت ارائه شده است روش لیندمان است که با برابر واحد قرار دادن مقدار  $F$  در رابطه 7 به‌دست می‌آید [21].

ثابت تعادل واکنش  $K_{pr}$  بر مبنای فشار (از رابطه (9)) و بر مبنای غلظت (از رابطه (10)) محاسبه می‌شود.

$$K_{pr} = \exp\left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT}\right) \quad (a-9)$$

$$\frac{\Delta H_r^0}{RT} = \sum_{k=1}^K (v_{kr}'' - v_{kr}') \frac{H_k^0}{RT} \quad (b-9)$$

$$\frac{\Delta S_r^0}{R} = \sum_{k=1}^K (v_{kr}'' - v_{kr}') \frac{S_k^0}{R} \quad (c-9)$$

$$K_{cr} = K_{pr} \left(\frac{P}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^K (v_{kr}'' - v_{kr}')} \quad (10)$$

ثابت نرخ انجام واکنش برگشت برحسب ثابت تعادل بر مبنای غلظت و ثابت نرخ انجام واکنش رفت، از رابطه (11) محاسبه می‌شود.

$$k_{br} = \frac{k_{fr}}{K_{cr}} \quad (11)$$

آنتالپی گونه احتراقی  $k$ ام برحسب دما از رابطه (12) محاسبه می‌شود.

$$h_k = h_{f,k}^0 + \int_{T_{ref}}^T C_{p,k} dT \quad (12)$$

یکی دیگر از ورودی‌های محاسباتی، نرخ خالص تولید گونه احتراقی  $k$ ام ( $\dot{\omega}_k$ ) است که در هر مرحله پیش از حل دستگاه معادلات 1، لازم است محاسبه شود. برای این منظور، ابتدا غلظت مولی گونه ( $[\chi_k]$ ) با به‌کارگیری کسر جرمی گونه ( $Y_k$ ) (به‌دست‌آمده از حل مرحله پیشین) از رابطه (13) محاسبه می‌شود.

$$[\chi_k] = \frac{P \left(\frac{Y_k}{Mw_k}\right)}{R \sum_{j=1}^K \frac{Y_j T_j}{Mw_j}} \quad (13)$$

سپس نرخ خالص تولید گونه احتراقی  $k$ ام، با به‌کارگیری غلظت مولی، ضرایب استوکیومتریکی رفت و برگشت و ضرایب مربوط به اثرات جسم سوم ( $a_{kr}$ ) در رابطه (14) محاسبه می‌شود.

$$\dot{\omega}_k = \sum_{r=1}^R \left( \sum_{k=1}^K a_{kr} [\chi_k] \right) \left\{ k_{fr} \prod_{k=1}^K [\chi_k]^{v_{kr}'} - k_{br} \prod_{k=1}^K [\chi_k]^{v_{kr}''} \right\} \quad (14)$$

## 2-3-1- خروجی‌های حل‌گر

مقادیر نهایی کسر جرمی گونه‌های احتراقی ( $Y_k$ ) و دمای شعله ( $T$ ) به‌عنوان خروجی‌های حل دستگاه معادلات (1) محسوب می‌شوند و غلظت‌ها برحسب کسر مولی از روابط (15-17) محاسبه می‌شوند.

$$X_k = \frac{Y_k}{Mw_k \sum_{j=1}^K \frac{Y_j}{Mw_j}} \quad (15)$$

$$X_k (\text{ppmv}) = X_k \times 10^6 \quad (16)$$

$$X_k (\text{ppmvd}) = X_k (\text{ppmv}) \frac{9.52 - \phi}{9.52 + \phi} \quad (17)$$

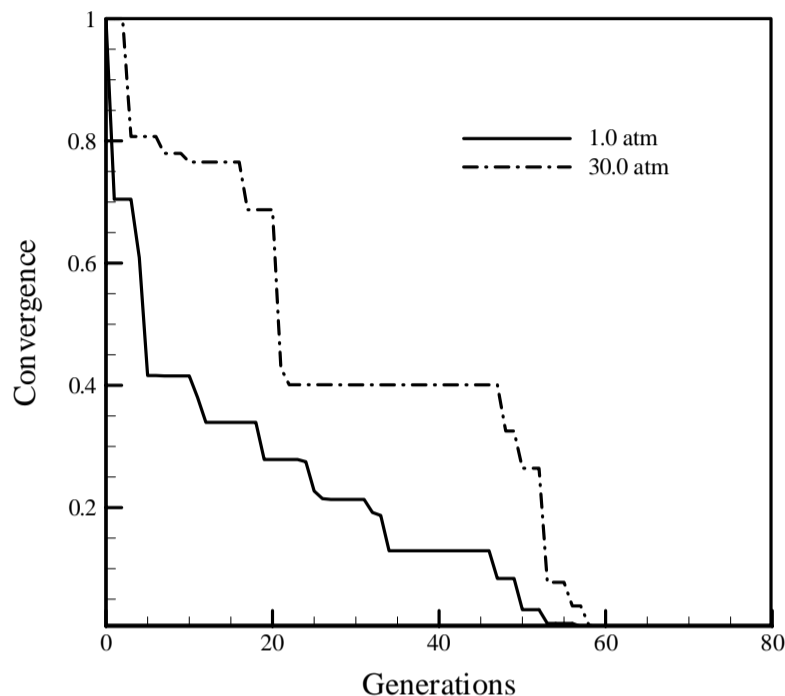
1- Weighted Difference  
2- Trial  
3- Candidate

حاصل شود.

جدول 3 ضرایب نرخ مکانیزم پنج مرحله‌ای احتراق گاز طبیعی برای شرط عملکردی با فشار 30 اتمسفر (واحدها: مول، سی‌سی، ثانیه و کلون)

**Table 3** Rate coefficients of the five-step mechanism of natural gas combustion for operating condition with pressure of 30 atm. (units are moles, cubic centimeters, seconds, Kelvin)

Re. No.	A	B	C	D
1	2.46E+18	1.70986	0.596584	12276
2	9.04 E+20	1.57258	1.786810	30594
3	5.57 E+14	1.00381	---	163184
4	9.66 E+34	3.82085	0.245818	189571
5	7.75 E+16	---	---	41727



**Fig. 2** Convergence of the optimized five-step global mechanisms

شکل 2 همگرایی مکانیزم‌های پنج مرحله‌ای بهینه شده

از مکانیزم کامل و مکانیزم پنج مرحله‌ای بهینه‌شده) بسیار بالایی برخوردار همگرایی (معیار همگرایی کمینه بودن اختلاف غلظت آلاینده‌ها به دست آمده است.

صحه‌گذاری و نتایج در دو بخش ارائه شده است. تمرکز در بخش نخست بر نتایج سینتیک به دست آمده تحت دو شرایط عملکردی اتمسفریک و فشار بالا (30 atm) معطوف بوده است [1]. در حالی که در بخش دوم نتایج حاصل از به‌کارگیری سینتیک تولید شده تحت فشار 6.28 atm جهت پیش‌بینی عددی غلظت مونوکسیدنیتروژن مورد بررسی قرار گرفته است.

#### 4-1- تحلیل مکانیزم‌های پنج مرحله‌ای تحت شرایط مختلف

مالامپالی یک مکانیزم پنج مرحله‌ای کلی ارائه و عملکرد آن را تحت شرایط اتمسفریک و فشار 30 atm در محدوده نسبت هم‌ارزی 0.4-1.0 مورد بررسی قرار داد [1]. دو اشکال بزرگ مکانیزم مالامپالی این است که نخست تعداد گونه‌های شرکت‌کننده در مکانیزم زیاد هستند و به‌کارگیری این مکانیزم در حل عددی دینامیک سیالات محاسباتی، هزینه محاسبات را افزایش می‌دهد، همچنین نرخ هریک از واکنش‌ها به صورت یک تابع خطی برحسب نرخ خالص تولید گونه‌های موجود در مکانیزم کامل است؛ بنابراین استفاده از این نوع رابطه برای نرخ واکنش‌ها در کدهای دینامیک سیالات محاسباتی نیز بر مشکلات آن دامن می‌زند. از سوی دیگر نیکول، یک مکانیزم پنج مرحله‌ای کلی با نرخ‌های نمایی مطابق جدول 2 ارائه کرد. کمتر بودن تعداد گونه‌ها و سادگی استفاده از روابط نمایی برای نرخ‌ها در کدهای دینامیک سیالات محاسباتی، مزیت‌های مکانیزم نیکول نسبت به مکانیزم مالامپالی را نمایان می‌کند. گرچه نیکول ضرایب مجهول مکانیزم پیشنهاد شده (جدول 2) را با

$$I_{PSR} = \int_{\phi_1}^{\phi_2} \left( \frac{|Y_{NO}^{det}(\phi) - Y_{NO}^{glb}(\phi)|}{Y_{NO}^{det}(\phi_1)} + \frac{|Y_{CO}^{det}(\phi) - Y_{CO}^{glb}(\phi)|}{Y_{CO}^{det}(\phi_1)} \right) d\phi \quad (18)$$

در این رابطه  $I$ ، تابع هدف و  $\phi_1 - \phi_2$  محدوده دلخواه نسبت هم‌ارزی،  $det$  و  $glb$  نیز به ترتیب به مکانیزم کامل و مکانیزم کلی اشاره دارند.

#### 3- معرفی شرایط عملکردی و مکانیزم پنج مرحله‌ای مبنا

در این مقاله سه شرط عملکردی بر مبنای شرایط مطالعه‌شده توسط مالامپالی (دو شرط) [1] و شومان (یک شرط) [16] برای پوشش دادن محدوده وسیعی از فشار عملکردی انتخاب شده‌اند. این شرایط عملکردی در جدول 1 ارائه شده‌اند. صورت کلی مکانیزم پنج مرحله‌ای ارائه شده توسط نیکول به‌عنوان مبنا انتخاب شده که واکنش‌ها و ضرایب نرخ هریک در جدول 2 ارائه شده‌اند [13]. براساس جدول 2، پنج مرحله این مکانیزم به ترتیب عبارتند از اکسیداسیون سوخت متان به مونوکسیدکربن و آب، اکسیداسیون مونوکسیدکربن به دی‌اکسیدکربن، تجزیه دی‌اکسیدکربن به مونوکسیدکربن و اکسیژن، تشکیل مونوکسیدنیتروژن در ناحیه شعله و سرانجام تشکیل مونوکسیدنیتروژن در ناحیه پشت شعله. در کار حاضر، دو مرحله تشکیل مونوکسیدنیتروژن در ناحیه شعله و پشت شعله مطابق کار نیکول در نظر گرفته شده است. همان‌طور که در بخش مقدمه نیز یاد شد، نیکول ضرایب بهینه را تحت محدوده خاصی از شرایط عملکردی از روش تحلیل رگرسیون استخراج کرد، ولی در این مقاله روش بهینه‌سازی تکامل تدریجی پیاده‌سازی شده است. از جمله مزایای این کار می‌توان نسبت به تغییر شرایط عملکردی (محدوده نسبت هم‌ارزی، فشار کارکردی و دمای اولیه مخلوط سوخت و هوا)، نوع سوخت و تعداد واکنش‌های مکانیزم انعطاف‌پذیر بوده و قابلیت استخراج ضرایب بهینه متناسب با محدوده شرایط عملکردی دلخواه اشاره کرد.

#### 4- صحه‌گذاری و نتایج

پیش از ارائه صحه‌گذاری و تحلیل نتایج به دست آمده، یک نمونه از مجموعه ضرایب نرخ واکنش به دست آمده (به‌عنوان نمونه برای شرط عملکردی با فشار 30 atm) در جدول 3 ارائه شده است. پیشینه همگرایی فرآیند عددی برای دو حالت فشار اتمسفریک و فشار بالا (30 atm) در شکل 2 نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، روش بهینه‌سازی استفاده شده از سرعت

جدول 1 شرایط عملکردی مبنا

**Table 1** Base operating conditions

Case No.	$\tau$ (ms)	$\Phi$ (-)	$T_0$ (K)	$P$ (bar)	$\dot{m}$ (kg/s)	Ref.
1	2.0	0.4-1.0	600	1.00	---	[1]
2	4.0	0.66	573	6.50	0.46E-03	[16]
3	2.0	0.6-1.0	600	30.0	---	[1]

جدول 2 مکانیزم پنج مرحله‌ای مبنا برای احتراق گاز طبیعی با هوا

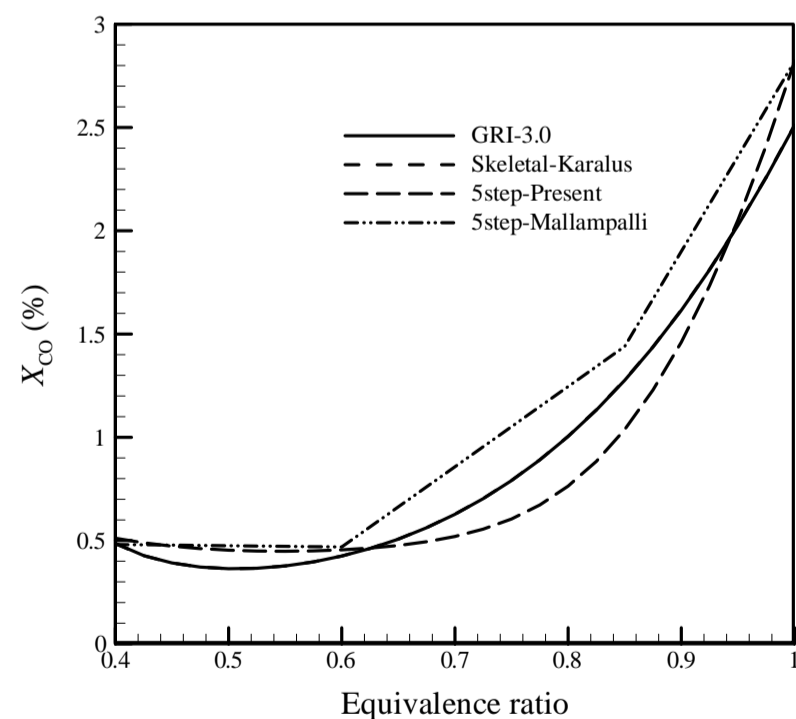
**Table 2** Base five-step\* mechanism for natural gas combustion [13]

No.	Reaction Description	Reaction Rate [mole/cm <sup>3</sup> /s]
1	CH <sub>4</sub> +1.5O <sub>2</sub> =>CO+2H <sub>2</sub> O	A <sub>1</sub> [CH <sub>4</sub> ] <sup>B<sub>1</sub>[O<sub>2</sub>]<sup>C<sub>1</sub>exp(-D<sub>1</sub>/R<sub>v</sub>/T)</sup></sup>
2	CO+0.5O <sub>2</sub> =>CO <sub>2</sub>	A <sub>2</sub> [CO] <sup>B<sub>2</sub>[O<sub>2</sub>]<sup>C<sub>2</sub>exp(-D<sub>2</sub>/R<sub>v</sub>/T)</sup></sup>
3	CO <sub>2</sub> =>CO+0.5O <sub>2</sub>	A <sub>3</sub> [CO <sub>2</sub> ] <sup>B<sub>3</sub>exp(-D<sub>3</sub>/R<sub>v</sub>/T)</sup>
4	N <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =>2NO	A <sub>4</sub> [O <sub>2</sub> ] <sup>B<sub>4</sub>[CO]<sup>C<sub>4</sub>exp(-D<sub>4</sub>/R<sub>v</sub>/T)</sup></sup>
5	N <sub>2</sub> +O <sub>2</sub> =>2NO	A <sub>5</sub> T <sup>0.5</sup> [N <sub>2</sub> ][O <sub>2</sub> ]exp(-D <sub>5</sub> /R <sub>v</sub> /T)

\*This mechanism contains seventeen unknowns

در این کردارها (3، 4)، نتایج حاصل از روش حاضر با نتایج یک مکانیزم اسکلتی [17] و مکانیزم مالمپالی [1] نیز مورد مقایسه قرار گرفته است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، غلظت مونوکسید نیتروژن با دقت به نسبت بالایی در مقایسه با مکانیزم کامل جی.آر.آی-3 به دست آمده است. دلایل انطباق بسیار خوب غلظت آلاینده مونوکسید نیتروژن حاصل از مدل تولیدشده با مکانیزم جی.آر.آی-3 نسبت به مدل مالمپالی این است که نخست اختلاف غلظت آلاینده مونوکسید نیتروژن حاصل از مکانیزم کامل و مدل پنج مرحله‌ای تولید شده به‌عنوان تابع هدف فرآیند بهینه‌سازی در نظر گرفته شده است. دوم در کار مالمپالی غلظت‌ها به‌صورت گسسته برای سه یا چهار  $\phi$  (در فشار 1.0 atm مقادیر 0.4، 0.6، 0.8، 1.0 و در فشار 30.0 atm مقادیر 0.6، 0.85، 1.0) محاسبه شده‌اند، درحالی که مدل‌های سینتیکی این مقاله با در نظر گرفتن نسبت‌های هم‌ارزی زیادی در محدوده  $\phi=0.4-1.0$  استخراج شده‌اند. برای توجیه رفتار این آلاینده در نسبت هم‌ارزی نزدیک به 1.0 (نقطه بیشینه کردار شکل 4)، دمای شعله آدیباتیک با افزایش نسبت هم‌ارزی افزایش یافته و در یک نسبت هم‌ارزی نزدیک به حالت استوکیومتریک ( $\phi \approx 1.0$ ) به مقدار بیشینه خود می‌رسد و سپس با افزایش نسبت هم‌ارزی کاهش می‌یابد [18]. با توجه به وابستگی غلظت آلاینده مونوکسید نیتروژن به دمای شعله، رفتاری مشابه با رفتار دما برای غلظت این آلاینده برحسب نسبت هم‌ارزی انتظار می‌رود [18]. علاوه بر این با افزایش فشار کارکردی نیز مقدار بیشینه غلظت این آلاینده در نسبت هم‌ارزی کمتری رخ می‌دهد [18].

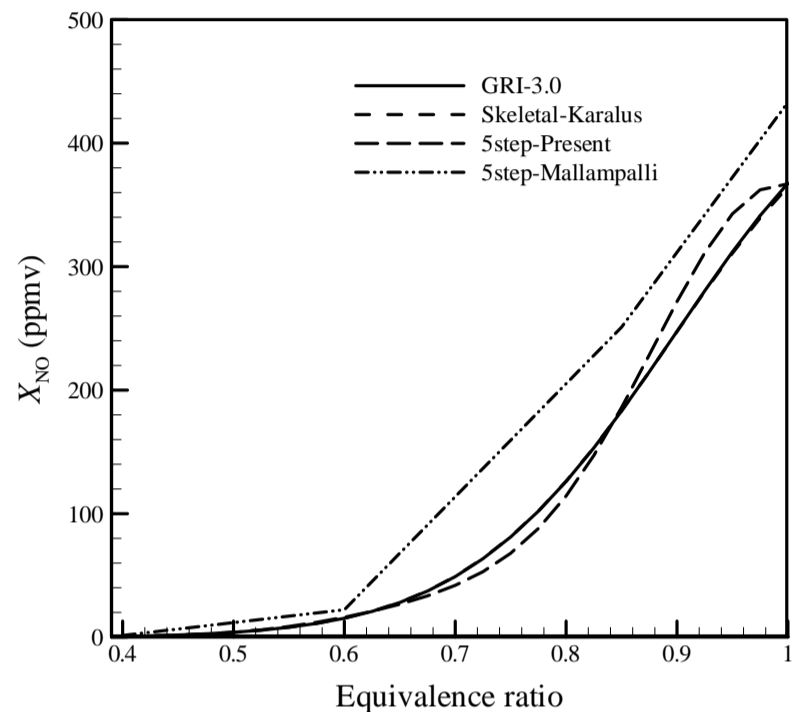
شکل‌های (5، 6) غلظت آلاینده مونوکسید کربن را تحت شرایط عملکردی مالمپالی (فشارهای 1.0 و 30.0 atm) را نشان می‌دهد. نتایج به‌دست آمده تطابق قابل قبولی با نتایج مکانیزم کامل جی.آر.آی-3 دارد. دو نکته قابل توجه این کردارها این است که نخست نتایج مکانیزم مالمپالی در نسبت‌های هم‌ارزی اشاره شده در پاراگراف پیشین (0.4، 0.6، 1.0، 0.8) تطابق مناسب‌تری با نتایج مکانیزم کامل ارائه کرده است. دوم مدل پنج مرحله‌ای تولید شده انطباق بهتری در نسبت‌های هم‌ارزی کمتر حاصل



**Fig. 5** CO concentrations versus  $\Phi$  in the PSR based on the generated five-step mechanism for methane-air combustion in the PSR, comparing with GRI 3.0, KF, and 5-step of Mallampalli at  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=1.00$  atm

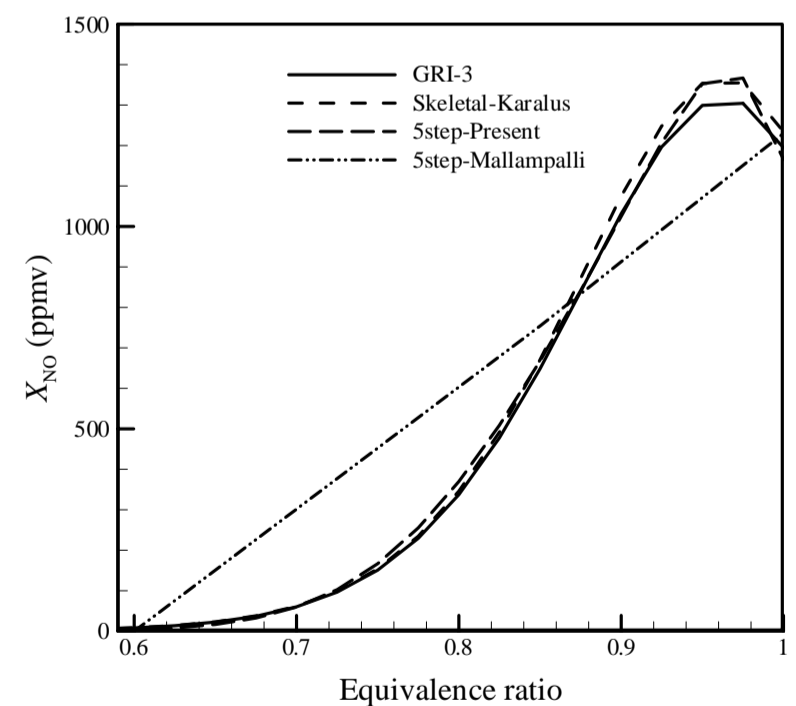
شکل 5 غلظت مونوکسید کربن برحسب نسبت هم‌ارزی براساس مکانیزم تولیدشده برای احتراق گاز طبیعی در راکتور کاملاً مخلوط شده، مقایسه با جی.آر.آی-3، اسکلتی و مالمپالی تحت  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=1.00$  atm

استفاده از تحلیل رگرسیون تنها برای فشار اتمسفر یک در محدوده نسبت هم‌ارزی 0.4-0.7 و دمای اولیه 500 K ارائه کرد [13]، در این‌جا این ضرایب برای محدوده وسیع‌تری از نسبت هم‌ارزی (0.4-1.0)، فشار (1.0، 6.5، 30.0 atm) به دست آمده است. در ادامه نتایج حاصل از سینتیک تولید شده تحت شرایط عملکردی (مطالعه شده توسط مالمپالی) و به‌کارگیری شکل کلی مکانیزم نیکول و الگوریتم روش کنونی ارائه شده است. شکل‌های (3، 4)، کسر مولی آلاینده مونوکسید نیتروژن برحسب نسبت هم‌ارزی تحت شرایط عملکردی مالمپالی (1.0 و 30 atm) را نشان می‌دهد.



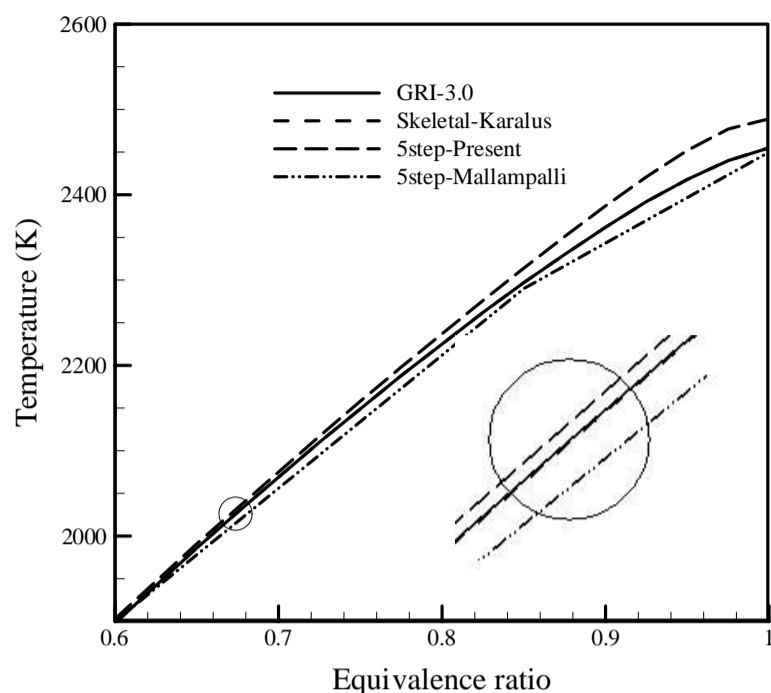
**Fig. 3** NO concentrations versus  $\Phi$  in the PSR based on the generated five-step mechanism for methane-air combustion in the PSR, comparing with GRI 3.0, KF, and 5-step of Mallampalli at  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=1.00$  atm

شکل 3 غلظت مونوکسید نیتروژن برحسب نسبت هم‌ارزی براساس مکانیزم تولید شده برای احتراق گاز طبیعی در راکتور کاملاً مخلوط شده، مقایسه با جی.آر.آی-3، اسکلتی و مالمپالی تحت  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=1.00$  atm



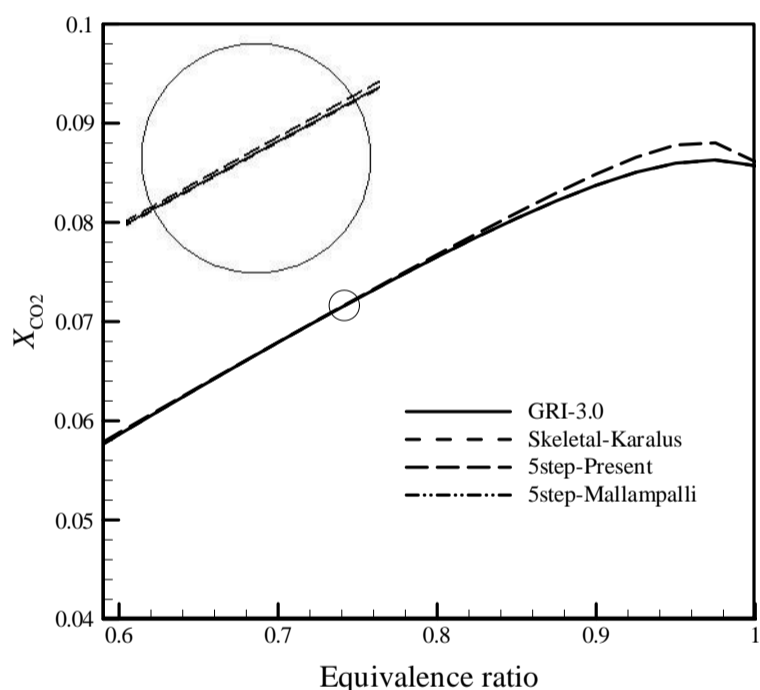
**Fig. 4** NO concentrations versus  $\Phi$  in the PSR based on the generated five-step mechanism for methane-air combustion in the PSR, comparing with GRI 3.0, KF, and 5-step of Mallampalli at  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=30.0$  atm

شکل 4 غلظت مونوکسید نیتروژن برحسب نسبت هم‌ارزی براساس مکانیزم تولید شده برای احتراق گاز طبیعی در راکتور کاملاً مخلوط شده، مقایسه با جی.آر.آی-3، اسکلتی و مالمپالی تحت  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=30.00$  atm



**Fig. 7** Flame temperature versus  $\Phi$  in the PSR based on the generated five-step mechanism for methane-air combustion in the PSR, comparing with GRI 3.0, KF, and 5-step of Mallampalli at  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=30.0$  atm

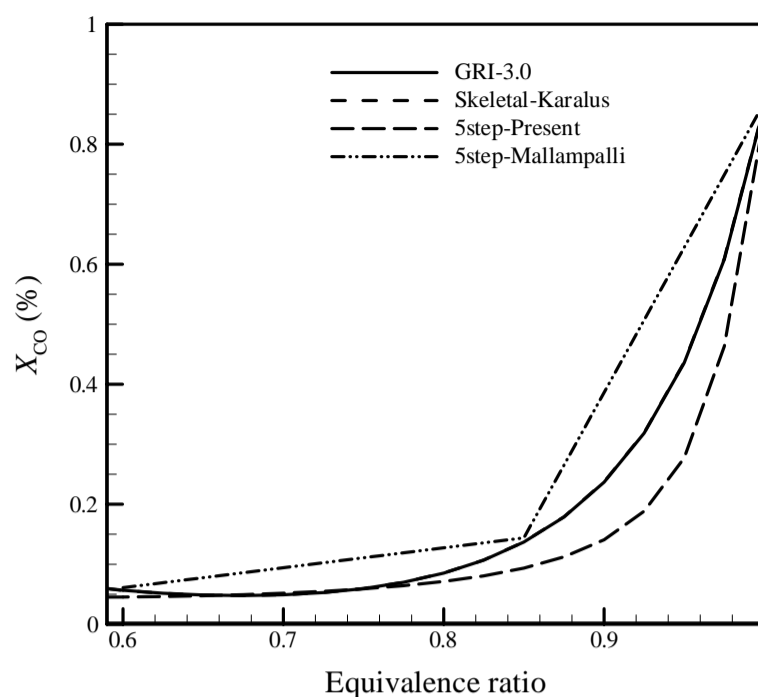
شکل 7 دمای شعله بر حسب نسبت هم‌ارزی براساس مکانیزم تولید شده برای احتراق گاز طبیعی در راکتور کاملاً مخلوط شده، مقایسه با جی.آر.آی-3، اسکلتی و مالمپالی تحت  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=30.00$  atm



**Fig. 8**  $\text{CO}_2$  concentrations versus  $\Phi$  in the PSR based on the generated five-step mechanism for methane-air combustion in the PSR, comparing with GRI 3.0, KF, and 5-step of Mallampalli at  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=30.0$  atm

شکل 8 غلظت دی‌اکسیدکربن بر حسب نسبت هم‌ارزی براساس مکانیزم تولید شده برای احتراق گاز طبیعی در راکتور کاملاً مخلوط شده، مقایسه با جی.آر.آی-3، اسکلتی و مالمپالی تحت  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=30.00$  atm

همان‌طور که پیشتر نیز اشاره شد، دمای شعله و غلظت محصولات احتراق تابع غلظت رادیکال‌های آزادند [13]؛ بنابراین توجیه‌پذیر است که مکانیزم مالمپالی (که رادیکال‌های آزاد بیشتری را نسبت به مکانیزم نیکول دربر دارد) تخمین مناسب‌تری را ارائه کند. البته هزینه محاسباتی بالاتر مکانیزم مالمپالی نسبت به مکانیزم کنونی و همچنین مشکلات مربوط به استفاده از نرخ‌های واکنش مکانیزم مالمپالی در کدهای دینامیک سیالات محاسباتی، در مقابل تخمین دقیق‌تر غلظت سایر محصولات به جز مونوکسیدنیترژن، نیازمند مصالحه برای کاربران این مکانیزم‌هاست.



**Fig. 6** CO concentrations versus  $\Phi$  in the PSR based on the generated five-step mechanism for methane-air combustion in the PSR, comparing with GRI 3.0, KF, and 5-step of Mallampalli at  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=30.0$  atm

شکل 6 غلظت مونوکسیدکربن بر حسب نسبت هم‌ارزی براساس مکانیزم تولید شده برای احتراق گاز طبیعی در راکتور کاملاً مخلوط شده، مقایسه با جی.آر.آی-3، اسکلتی و مالمپالی تحت  $\tau=2.0$  ms,  $T_0=600$  K,  $P=30.00$  atm

کرده است. توجیه موضوع نخست این است که به دلیل این که غلظت آلاینده مونوکسیدکربن تابع غلظت رادیکال‌های آزاد است [13]، مکانیزم مالمپالی که رادیکال‌های آزاد بیشتری را نسبت به مکانیزم نیکول در بر دارد، تخمین مناسب‌تری از این آلاینده ارائه می‌کند. توجیه موضوع دوم این است که مکانیزم نیکول هیچ رادیکال آزادی را (به جز مونوکسیدکربن) دربر نگرفته است و در نسبت‌های هم‌ارزی کم که غلظت رادیکال‌های آزاد کمتر است، تطابق مناسب‌تری با نتایج مکانیزم کامل حاصل شده است. (البته با جایگزینی حل‌گرهای احتراقی دقیق‌تر نظیر راکتورهای یک بعدی، نتایج بهتری به‌دست آمده که در مقاله‌ای جداگانه ارائه خواهد شد.)

شکل‌های (7-10) به ترتیب دمای شعله، غلظت دی‌اکسیدکربن، آب و اکسیژن را تحت شرایط عملکردی با فشار کارکرد 30 atm را در مقایسه با مکانیزم‌های جی.آر.آی-3، اسکلتال، پنج مرحله‌ای تولید شده و پنج مرحله‌ای مالمپالی نشان می‌دهند. نکته قابل توجه این است که علی‌رغم این که در روند بهینه‌سازی عددی، کمینه بودن اختلاف غلظت آلاینده‌های مونوکسید نیترژن و مونوکسیدکربن حاصل از مکانیزم‌های کامل و پنج مرحله‌ای به‌عنوان توابع هدف در نظر گرفته شده‌اند، برای سایر گونه‌ها (از جمله آب، دی‌اکسیدکربن و اکسیژن) و دمای شعله نیز تطابق بسیار خوبی به‌دست آمده است. بررسی دقیق‌تر توزیع دما (شکل 7) نشان می‌دهد که نتایج حاصل از مکانیزم اسکلتال تحت تمام نسبت‌های هم‌ارزی، کاملاً بر نتایج مکانیزم کامل منطبق است. این درحالی است که مدل پنج مرحله‌ای کنونی، دما را بیشتر و مدل مالمپالی دما را کمتر از مقدار مکانیزم کامل تخمین زده است. علاوه بر این در نسبت‌های هم‌ارزی کمتر از حدود 0.8، نتایج حاضر با نتایج مکانیزم کامل مطابقت بیشتری دارد، در حالی که در نسبت‌های هم‌ارزی بزرگ‌تر از 0.8 مکانیزم مالمپالی مطابقت بیشتری حاصل کرده است.

بررسی دقیق‌تر توزیع غلظت‌های دی‌اکسیدکربن، آب و اکسیژن (شکل‌های 8-10) نشان می‌دهد که نتایج حاصل از مکانیزم مالمپالی تطابق مناسب‌تری نسبت به مکانیزم کنونی با نتایج مکانیزم‌های کامل و اسکلتال دارد.

#### 1-2-4- هندسه محفظه JSR

محفظه استاندارد آزمایشگاهی JSR شامل دو مخروط ناقص و یک استوانه است به طوری که استوانه میان دو مخروط ناقص محصور شده است. ورودی محفظه دایروی بوده و محل قرارگیری آن در مرکز قاعده پایینی مخروط ناقص ابتدایی است. خروجی‌های محفظه به صورت چهار روزه بوده که با فواصل یکسان در یک ارتفاع ثابت از قاعده پایینی مخروط ناقص ابتدایی قرار گرفته‌اند. سنسورهای اندازه‌گیری غلظت محصولات احتراقی در ارتفاعی معادل  $\frac{2}{3}$  ارتفاع کل از قاعده پایین مخروط ناقص ابتدایی، بین خط مرکزی محفظه و دیواره جانبی آن واقع شده‌اند.

#### 2-2-4- روش حل عددی

مطالعات تجربی متعددی در خصوص محفظه‌های JSR وجود دارد [24,23]، ولی تاکنون مطالعه عددی ارزان قیمت برای پیش‌بینی آلاینده مونوکسیدنیترژن برای احتراق گاز طبیعی تحت شرایط فشار بالا ارائه نشده است. در این‌جا محفظه شومان و داده‌های تجربی آن برای صحنه‌گذاری حل عددی مورد استفاده قرار گرفته است [16]. برای حل تقارن محوری محفظه، چهار روزه خروجی با یک شیار با مساحت معادل جایگزین شده‌اند. یک شبکه سازمان‌یافته شامل 40000 سلول برای حل عددی آن به کار گرفته شده و معادلات نویر- استوکس میانگین حل شده‌اند. برای مدل‌سازی میدان جریان آشفته، مدل تنش رینولدز و برای برهم‌کنش شیمی و میدان اغتشاشی، روش ترکیبی نرخ محدود- اتلاف گردابه به کار گرفته شده است. نرخ جریان جرم، کسر جرمی مواد اولیه، دمای سکون نخستین و شدت اغتشاش به عنوان شرایط مرزی در ورود محفظه و فشار استاتیک به عنوان فشار عملکردی و پارامترهایی نظیر کسر جرمی محصولات احتراق، دمای سکون خروجی و شدت توربولانس به عنوان شرایط مرزی در خروج محفظه در نظر گرفته شده‌اند.

#### 3-2-4- نتایج حل عددی

توزیع عددی آلاینده‌های مونوکسیدنیترژن و مونوکسیدکربن برحسب موقعیت شعاعی درون هندسه JSR در موقعیت محوری ثابت 13.46 mm (محل نصب سنسورهای اندازه‌گیری غلظت‌ها) حاصل از مکانیزم پنج مرحله‌ای کلی تولید شده، مکانیزم هشت مرحله‌ای ارائه شده توسط نووسیلوو [5] با نتایج تجربی محفظه شومان [16] در شکل‌های (11، 12) ارائه شده است. غلظت آلاینده مونوکسیدنیترژن به دست آمده از مکانیزم پنج مرحله‌ای بهینه شده، بیشینه حدود 25 درصد نسبت به نتیجه به دست آمده از مکانیزم هشت مرحله‌ای نووسیلوو به نتایج تجربی نزدیک‌تر است. در حالی که غلظت آلاینده مونوکسیدکربن در بدترین حالت حدود 40 درصد نسبت به مکانیزم هشت مرحله‌ای نووسیلوو از نتایج تجربی دورتر است. البته مقدار این اختلاف در نزدیکی خروجی محفظه به حدود 25 درصد تقلیل می‌یابد. در این مقاله از مدل راکتور صفر بعدی به عنوان حل‌گر احتراقی استفاده کردیم، در صورتی که استفاده از مدل‌های راکتور یک بعدی نتایج دقیق‌تری را در پی خواهد داشت. اگرچه در این‌جا نتایج مربوطه به توسعه الگوریتم عددی حاضر براساس به‌کارگیری مدل راکتور یک بعدی به عنوان حل‌گر احتراقی ارائه نشده است، ولی نتایج هر دو آلاینده تطابق مطلوب‌تری نسبت به مکانیزم نووسیلوو را با نتایج تجربی داشته است، که در مقاله جداگانه‌ای ارائه خواهد شد.

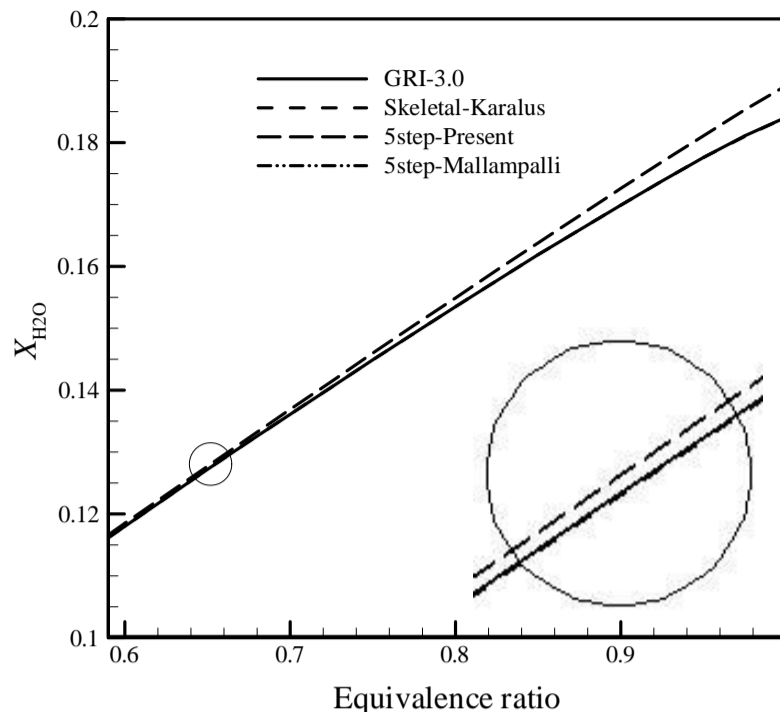


Fig. 9 H<sub>2</sub>O concentrations versus  $\Phi$  in the PSR based on the generated five-step mechanism for methane-air combustion in the PSR, comparing with GRI 3.0, KF, and 5-step of Mallampalli at  $\tau = 2.0$  ms,  $T_0 = 600$  K,  $P = 30.0$  atm

شکل 9 غلظت آب برحسب نسبت هم‌ارزی براساس مکانیزم تولید شده برای احتراق گاز طبیعی در راکتور کاملاً مخلوط شده، مقایسه با جی.آر.آی-3، اسکلتی و مالمپالی تحت  $\tau = 2.0$  ms,  $T_0 = 600$  K,  $P = 30.00$  atm

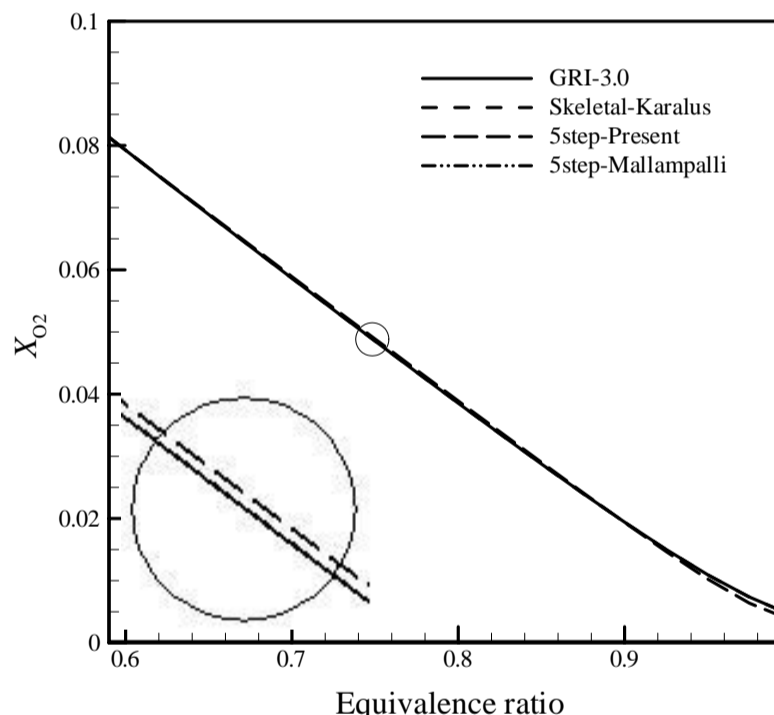


Fig. 10 O<sub>2</sub> concentrations versus  $\Phi$  in the PSR based on the generated five-step mechanism for methane-air combustion in the PSR, comparing with GRI 3.0, KF, and 5-step of Mallampalli at  $\tau = 2.0$  ms,  $T_0 = 600$  K,  $P = 30.0$  atm

شکل 10 غلظت اکسیژن برحسب نسبت هم‌ارزی براساس مکانیزم تولید شده برای احتراق گاز طبیعی در راکتور کاملاً مخلوط شده، مقایسه با جی.آر.آی-3، اسکلتی و مالمپالی تحت  $\tau = 2.0$  ms,  $T_0 = 600$  K,  $P = 30.00$  atm

#### 2-4- کاربرد در شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی

برای نشان دادن کاربرد روش کنونی در پیش‌بینی عددی غلظت آلاینده‌های مونوکسیدنیترژن و مونوکسیدکربن، یک کد دینامیک سیالات محاسباتی (FLUENT 6.3.26) برپایه فشار به کار گرفته شده و رفتار این آلاینده‌ها در یک هندسه آزمایشگاهی تحت عنوان JSR<sup>1</sup> تحت شرایط عملکردی ارائه شده در ردیف دوم جدول 1 مورد مطالعه قرار گرفته است.



شده است. در این جا سه مدل سینتیکی قابل قبول استخراج شد، اگرچه هیچ محدودیتی جهت پیاده‌سازی الگوریتم کنونی برای سوخت‌های هیدروکربنی دیگر و سایر مکانیزم‌های کلی از پیش تعریف شده با نرخ شبه‌آرنیوسی وجود ندارد.

جهت نشان دادن قابلیت این الگوریتم، محدوده‌های وسیع‌تری از شرایط عملکردی نیکول و نووسیلوو تحت  $0.4 < \phi < 1.0$ ، فشارهای 1.0، 6.28 و 30.0 اتمسفر و دماهای اولیه 573 K و 600 K برای مخلوط سوخت- هوا مورد بررسی قرار گرفتند. نتایج به دست آمده با نتایج حاصل از مکانیزم کامل جی.آر.آی-3، یک مکانیزم اسکلتی، مکانیزم هشت مرحله‌ای کلی نووسیلوو و مکانیزم پنج مرحله‌ای مالامپالی مورد مقایسه قرار گرفت. برای صحت‌گذاری استفاده از مدل‌های تولیدشده در کدهای دینامیک سیالات محاسباتی، مطالعه عددی آلاینده‌های مونوکسید نیتروژن و مونوکسید کربن یک محفظه JSR انجام شد.

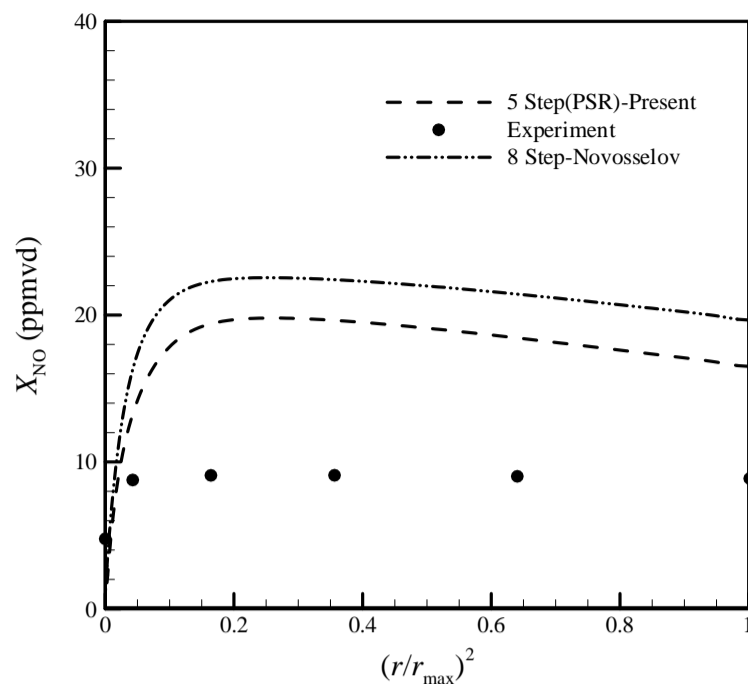
از جمله فعالیت‌های آتی جهت ادامه بهبود روش کنونی از نقطه نظر حل‌گر میدان واکنشی می‌توان به جایگزینی حل‌گرهای راکتوری دقیق‌تر مانند حل‌گر یک بعدی شعله پیش‌آمیخته و یا ترکیب حل‌گرهای راکتوری صفر بعدی با یک بعدی اشاره کرد. پیشنهاد دیگر از نقطه نظر بهینه‌ساز عددی، می‌تواند جایگزینی بهینه‌سازهای با دقت و سرعت بالاتر نسبت به بهینه‌ساز تکامل تدریجی است.

#### 6- فهرست علائم

$A, a$	ضریب پیش‌نمایی، بازده جسم سوم
$B, b$	توان گونه در رابطه آرنیوس، ضریب چندجمله‌ای
$C$	حرارت ویژه $(m^2s^{-2}K^{-1})$ ، توان گونه در رابطه آرنیوس
$c$	ضریب چندجمله‌ای
$D$	توان گونه در رابطه آرنیوس
$E$	انرژی فعال‌سازی در رابطه آرنیوس $(kgm^2s^{-2})$
$F$	متغیر روش ترو
$H$	انتالپی $(kgm^2s^{-2})$
$h$	انتالپی ویژه $(m^2s^{-2})$ ، تاریخچه همگرایی تابع هدف
$I$	تابع هدف در فرآیند بهینه‌سازی
$K$	ثابت تعادل
$k$	ثابت نرخ انجام واکنش
$\dot{m}$	شار جرمی $(kgs^{-1})$
$M_w$	جرم مولکولی $(kgkmol^{-1})$
$N$	شماره نسل در فرآیند بهینه‌سازی
$P$	فشار $(kgm^{-1}s^{-2})$
$R$	ثابت گاز $(m^2s^{-2}K^{-1})$
$S$	انتروپی $(m^2s^{-2}K^{-1})$
$T$	دما (K)
$V$	حجم $(cm^3)$
$X$	کسر مولی
$Y$	کسر جرمی

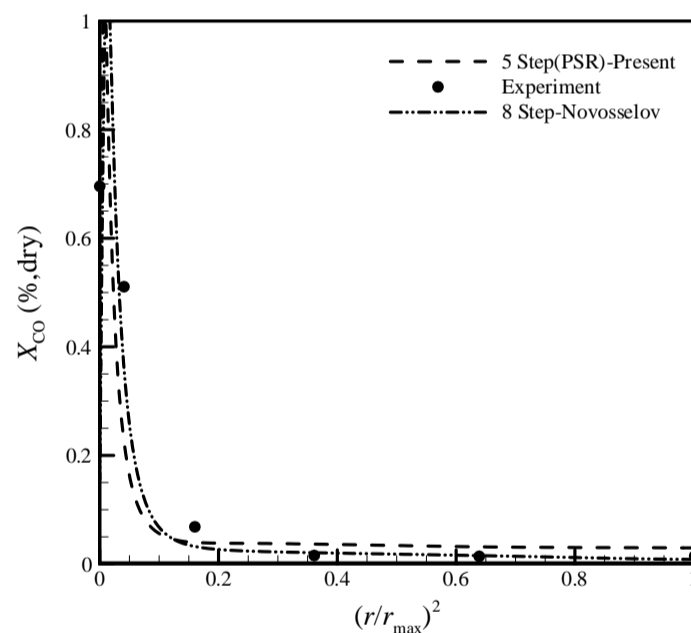
#### علائم یونانی

$\omega$	نرخ خالص تولید گونه احتراقی $(molcm^{-3}s^{-1})$
$[\chi]$	غلظت مولی $(molcm^{-3})$
$\tau$	زمان اقامت (s)
$\beta$	توان دما در رابطه آرنیوس



**Fig. 11.** NO concentrations versus radial coordinate in the JSR at fixed axial position (13.46 mm) based on the generated five-step mechanism for CH<sub>4</sub>-air combustion in the PSR, and eight-step mechanism of Novoselov, comparing with the experiment and CFD simulation at  $\tau=4.0$  ms,  $T_0=573$  K,  $P=6.28$  atm

شکل 11 غلظت مونوکسید نیتروژن برحسب موقعیت شعاعی تحت موقعیت محوری ثابت 13.46 mm داخل JSR براساس مکانیزم پنج مرحله‌ای تولید شده در راکتور کاملاً مخلوط شده احتراق متان- هوا و مکانیزم هشت مرحله‌ای نووسیلوو، مقایسه با نتایج عددی تحت  $\tau=4.0$  ms,  $T_0=573$  K,  $P=6.28$  atm



**Fig. 12.** CO concentrations versus radial coordinate in the JSR at fixed axial position (13.46 mm) based on the generated five-step mechanism for CH<sub>4</sub>-air combustion in the PSR, and eight-step mechanism of Novoselov, comparing with the experiment and CFD simulation at  $\tau=4.0$  ms,  $T_0=573$  K,  $P=6.28$  atm

شکل 12 غلظت مونوکسید کربن برحسب موقعیت شعاعی تحت موقعیت محوری ثابت 13.46 mm داخل JSR براساس مکانیزم پنج مرحله‌ای تولید شده در راکتور کاملاً مخلوط شده برای احتراق متان با هوا و مکانیزم هشت مرحله‌ای نووسیلوو، مقایسه با نتایج عددی تحت  $\tau=4.0$  ms,  $T_0=573$  K,  $P=6.28$  atm

#### 5- نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک الگوریتم عددی جدید بر پایه اندرکنش حل‌گر «راکتور کاملاً مخلوط شده» با بهینه‌ساز «تکامل تدریجی» برای استخراج ضرایب نرخ واکنش مکانیزم‌های کلی چند مرحله‌ای از پیش تعریف‌شده (تحت محدوده دلخواهی از شرایط عملکردی)، جهت پیش‌بینی آلاینده‌ها ارائه و پیاده‌سازی

- [7] C. K. Westbrook, J. Creighton, C. Lund, F. L. Dryer, A numerical model of chemical kinetics of combustion in a turbulent flow reactor, *Physical Chemistry*, Vol. 81, No. 25, pp. 2542-2554, 1977.
- [8] C. K. Westbrook, F. L. Dryer, Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, *Combustion Science and Technology*, Vol. 27, No. 1-2, pp. 31-43, 1981.
- [9] J. Duterque, R. Borghi, H. Tichtinsky, Study of quasi-global schemes for hydrocarbon combustion, *Combustion Science and Technology*, Vol. 26, No. 1-2, pp. 1-15, 1981.
- [10] F. L. Dryer, I. Glassman, High-temperature oxidation of CO and CH<sub>4</sub>, *Fourteenth Symposium (International) on Combustion*, Vol. 14, No. 1, pp. 987-1003, 1973.
- [11] W. P. Jones, R. P. Lindstedt, Global reaction schemes for hydrocarbon combustion, *Combustion and Flame*, Vol. 73, No. 3, pp. 233-249, 1988.
- [12] V. Dupont, M. Pourkashanian, A. Williams, Modeling of process heaters fired by natural gas, *The Institute of Energy*, Vol. 66, No. 466, pp. 20-28, 1993.
- [13] D. G. Nicol, P. C. Malte, A. J. Hamer, R. J. Roby, R. C. Steele, Development of a five-step global methane oxidation-NO formation mechanism for lean-premixed gas turbine combustion, *Engineering for Gas Turbine and Power*, Vol. 121, No. 2, pp. 272-280, 1999.
- [14] I. V. Novosselov, *Eight step global kinetic mechanism on methane oxidation with nitric oxide formation for lean premixed combustion turbine*, MS Thesis, University of Washington, Washington, 2001.
- [15] C. Bowman, R. Hanson, D. Davidson, W. J. Gardiner, V. Lissianski, G. Smith, D. Golden, M. Frenklach, M. Goldenberg, *GRI 3.0 Detailed Mechanism*, Accessed on 30 July 1999; [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).
- [16] T. R. Shuman, *NO<sub>x</sub> and CO formation for lean premixed methane air combustion in a jet stirred reactor operated at elevated pressure*, PhD Thesis, University of Washington, Washington, 2000.
- [17] M. F. Karalus, K. B. Fackler, I. V. Novosselov, J. C. Kramlich, P. C. Malte, A skeletal mechanism for the reactive flow simulation of methane combustion, *Proceedings of The ASME Turbo Expo 2013: Turbine Technical Conference and Exposition*, San Antonio, Texas, U.S.A., June 3-7, 2013.
- [18] S. R. Turns, *An introduction to combustion.*, Third Edition, New York: Mc Graw Hill, 2012.
- [19] E. Goos, A. Burcat, B. Ruscic, *Extended third millenium ideal gas and condensed phase thermodynamical database for combustion with updates from active thermodynamical tables*, Accessed on 31 December 2010; [garfield.chem.elte.hu/Burcat/Introduction.pdf](http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/Introduction.pdf).
- [20] P. H. Stewart, C. W. Larson, D. M. Golden, Pressure and temperature dependence reactions proceeding via a bound complex. 2. Application to 2CH<sub>3</sub>=>C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>+H<sup>\*</sup>, *Combustion and Flame*, Vol. 75, No. 1, pp. 25-31, 1989.
- [21] F. A. Lindemann, S. Arrhenius, I. Langmuir, N. R. Dhar, J. Perrin, W. C. M. Lewis, Discussion on the radiation theory of chemical action, *Transactions of The Faraday Society*, Vol. 17, No. 1, pp. 598-606, 1922.
- [22] K. Price, R. M. Storn, J. A., Lampine, *Differential evolution: a practical approach to global optimization*, 2005<sup>th</sup> Edition, Berlin: Springer, 2005.
- [23] R. A. Corr, P. C. Malte, N. M. Marinov, Evaluation of NO<sub>x</sub> mechanisms for lean premixed combustion, *Engineering for Gas Turbine and Power*, Vol. 114, No. 2, pp. 425-434, 1992.
- [24] R. C. Steele, P. C. Malte, D. G. Nicol, J. C. Kramlich, NO<sub>x</sub> and N<sub>2</sub>O in lean premixed jet stirred flames, *Combustion and Flame*, Vol. 100, No. 3, pp. 440-449, 1995.

$\phi$  نسبت هم‌ارزی  
 $\nu$  ضریب استوکیومتریکی  
 $\Delta$  اختلاف

#### بالانویس‌ها

det مکانیزم کامل  
 glb مکانیزم کلی  
 ' مسیر رفت واکنش  
 " مسیر برگشت واکنش  
 0 استاندارد

#### زیرنویس‌ها

0 فشار پایین، اولیه  
 1,2, ..., 7 ضرایب چند جمله‌ای، مجهولات ضرایب نرخ مکانیزم  
 $\infty$  فشار بالا  
 b واکنش برگشت  
 c بر مبنای غلظت  
 f تشکیل، واکنش رفت  
 K بیشترین تعداد گونه احتراقی  
 k شماره گونه احتراقی  
 p بر مبنای فشار، جمعیت در فرآیند بهینه‌سازی  
 R بیشترین تعداد واکنش ابتدایی  
 r شماره واکنش ابتدایی

#### 7- مراجع

- [1] H. P. Mallampalli, T. H. Fletcher, J. Y. Chen, Evaluation of CH<sub>4</sub>/NO<sub>x</sub> reduced mechanisms used for modeling lean premixed turbulent combustion of natural gas, *Engineering for Gas Turbine and Power*, Vol. 120, No. 4, pp. 703-712, 1998.
- [2] C. J. Sung, C. K. Law, J. Y. Chen, Augmented reduced mechanism for NO emission in methane oxidation, *Combustion and Flame*, Vol. 125, No. 1, pp. 906-919, 2001.
- [3] A. Massias, D. Diamantis, E. Mastorakos, D. A. Goussis, An algorithm for the construction of global reduced mechanisms with CSP data, *Combustion and Flame*, Vol. 117, No. 4, pp. 117-685, 1999.
- [4] A. J. Hamer, R. J. Roby, CFD modeling of a gas turbine combustor using reduced chemical mechanisms, *Proceeding of The 33<sup>rd</sup> AIAA Joint Propulsion and Exhibit Conference*, Seattle, U.S.A., July 06, 1997.
- [5] I. V. Novosselov, P. C. Malte, Development and application of an eight-Step global mechanism for CFD and CRN simulations of lean-premixed combustors, *Engineering for Gas Turbine and Power*, Vol. 130, No. 2, pp. 1-9, 2008.
- [6] R. B. Edelman, O. F. Fortune, A quasi-global chemical kinetic model for the finite rate combustion of hydrocarbon fuels with application to turbulent burning and mixing in hypersonic engines and nozzles, *Proceedings of The 7<sup>th</sup> Aerospace Science Meeting*, New York, U.S.A., June 01, 1969.