

مقایسه دو پیکره‌بندی مختلف در مدل احتراق چند منطقه‌ای مخلوط گاز طبیعی و هپتان نرمال در موتورهای احتراقی مخلوط همگن اشتعال تراکمی

آرش رحیمی ممقانی^{۱*}، رحیم خوش بختی سرای^{۲**} و اسماعیل فاتحی فر^{۱***}

۱- دانشگاه صنعتی سهند تبریز، دانشکده مهندسی شیمی

۲- دانشگاه صنعتی سهند تبریز، دانشکده مهندسی مکانیک

(دریافت: ۱۳۸۸/۸/۲۲، پذیرش: ۱۳۸۹/۳/۲۵)

در این مقاله سازوکار سینتیک شیمیایی تفصیلی (۷۶ گونه شیمیایی، ۴۶۴ واکنش) برای مخلوط گاز طبیعی و هپتان نرمال، با جزء جرمی دلخواه بین ۳۴ و ۸۵ درصد گاز طبیعی، با استفاده از ترکیب واکنش‌های تفصیلی گاز طبیعی و هپتان نرمال توسعه یافت. سپس با انجام تحلیل حساسیت سازوکار ترکیبی، واکنش‌های مهم مشخص شدند. همچنین از الگوریتم ژنتیک، برای بهینه‌سازی ضرایب آرنیوس واکنش‌های مشخص شده توسط آزمون حساسیت، استفاده شد. سرانجام با استفاده از دو پیکره‌بندی مختلف (شش منطقه‌ای و یازده منطقه‌ای) برای مدل چند منطقه‌ای احتراق و نتایج آزمایشگاهی موجود، دقت سازوکار ارائه شده بررسی شد. همچنین نتایج دو پیکره‌بندی مختلف برای مدل چند منطقه‌ای احتراق با هم مقایسه شدند. نتایج به دست آمده نشان داد که دو پیکره‌بندی مختلف، متغیرهای احتراقی، عملکردی یعنی شروع احتراق، تداوم احتراق، فشار متوسط، بازده گرمایی و انتشار آلاینده‌های موتور مخلوط همگن اشتعال تراکمی یعنی هیدروکربن‌های نسوخته و مونواکسیدکربن را به صورت مناسبی پیش‌بینی کرده است، به طوری که توافق خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارند. همچنین نتایج مدل احتراقی با شش منطقه، نزدیک به مدل احتراقی با یازده منطقه بود. اما زمان محاسبات لازم برای مدل احتراقی با یازده منطقه تقریباً دو برابر مدل احتراقی با شش منطقه بود.

واژگان کلیدی: احتراق مخلوط همگن اشتعال تراکمی، تحلیل حساسیت، سازوکار سینتیک شیمیایی، مدل احتراق چند منطقه‌ای، الگوریتم ژنتیک

مقدمه

افزایش نگرانی‌های زیست محیطی در چند دهه اخیر باعث توجه اساسی به تشکیل و انتشار آلوده‌کننده‌های محیط زیست و نحوه کنترل آن‌ها شده است. از آنجایی که حجم این آلاینده‌ها در سال‌های اخیر با رشد جوامع افزایش یافته، لذا این مسئله برای کشورهای در حال توسعه و به ویژه کشورهای توسعه یافته به عنوان یک مشکل جدی مطرح است. در این راستا، قانون‌های دولتی سختگیرانه‌ای جهت کنترل انتشار این آلوده‌کننده‌ها از وسایل نقلیه وضع شده و تکنولوژی‌های جدیدی برای اجرای این قانون‌ها پدید آمده است. یکی از راه‌حل‌های ارائه شده، احتراق مخلوط همگن اشتعال تراکمی در وسایل نقلیه است. احتراق مخلوط همگن اشتعال تراکمی یک احتراق خودبه‌خودی شامل مخلوط پیش‌آمیخته هوا و سوخت بدون استفاده از منبع انرژی خارجی برای اشتعال است. مخلوط هوا و سوخت به صورت پیش‌آمیخته وارد محفظه احتراق شده و احتراق تحت سازوکارهای سینتیک شیمیایی در یک فشار و دمای مشخص شروع می‌شود. این احتراق جایگزینی برای روش‌های سنتی احتراق اشتعال جرقه‌ای و تراکمی است. این روش دارای بازده گرمایی بالا، تولید کم اکسیدهای نیتروژن و ذرات معلق و

* دانشجوی دکتری (ایمیل: arash_rahimi_ma@yahoo.com)

** استادیار - نویسنده مخاطب (ایمیل: khoshtakhti@sut.ac.ir)

*** استادیار (ایمیل: fatehifar@sut.ac.ir)

همچنین مصرف سوخت پایین است [۱-۳]. اولین تحقیق انجام شده در این زمینه توسط انیسی و همکاران در سال ۱۹۷۹ صورت گرفت [۴]. سپس نجت و فوستر برای اولین بار چرخه چهار مرحله‌ای مخلوط همگن اشتعال تراکمی را طراحی کردند که دارای ترکیب سوخت ورودی و دمای متغیر بوده و سوخت استفاده شده در آن مخلوطی از هپتان نرمال و اکتان بود [۵].

از مشکلات اساسی این نوع احتراق کنترل شروع احتراق است. زیرا بر خلاف روش‌های مرسوم احتراقی که دارای روشی مستقیم برای کنترل زمان شروع احتراق‌اند، در این نوع احتراق فقط سازوکار انجام واکنش‌ها بر شروع فرایند احتراق حاکم است. همچنین یکی دیگر از مشکلات اساسی این نوع احتراق، محدوده عملکرد باریک این نوع احتراق است. از روش‌های پیشنهاد شده برای حل مشکلات ذکر شده، استفاده از ترکیب دو هیدروکربن مختلف به عنوان سوخت است. مخلوط دو هیدروکربن با وزن مولکولی متفاوت باعث تغییر احتراق مخلوط همگن اشتعال تراکمی می‌شود. مخلوط دو هیدروکربن را می‌توان به دو گروه عمده تقسیم کرد [۶]. ۱- مخلوط دو هیدروکربن مانند هپتان و اکتان ۲- مخلوط هیدروکربن با گاز سنتز (مونوکسید کربن و هیدروژن) که از آن جمله می‌توان به مخلوط بنزین و گازوئیل [۷]، هپتان و اتانول [۸]، گاز طبیعی و هیدروژن [۹] اشاره کرد.

از روش‌های بررسی این احتراق، مدلسازی آن با استفاده از سازوکارهای سینتیک شیمیایی تفصیلی است. انجام این امر بدون در نظر گرفتن سازوکار سینتیک شیمیایی مناسب و مدلی که فرایندهای مختلف فیزیکی و شیمیایی انجام گرفته در داخل محفظه احتراق را توصیف کند، امکان‌پذیر نیست. مدلسازی این احتراق دارای پیچیدگی‌های متعددی است. مدل مذکور باید تمامی فرایندهای فیزیکی و شیمیایی اتفاق افتاده در داخل محفظه احتراق یعنی انتقال گرما و انتقال جرم و احتراق را به طور کامل در نظر بگیرد. از مدل‌های مناسب برای توصیف این احتراق، مدل‌های احتراق چند منطقه‌ای همراه با سازوکارهای سینتیک شیمیایی تفصیلی است که تمامی فرایندهای مذکور را در نظر می‌گیرد. مدل‌های دو منطقه‌ای از ساده‌ترین مدل‌های احتراق چند منطقه‌ای‌اند. در این گروه از مدل‌ها، مخلوط گرم داخل محفظه را به عنوان یک منطقه و لایه مرزی در تماس با دیواره سیلندر را به عنوان منطقه دیگر در نظر می‌گیرند. فایولند [۱۰] از مدل دو منطقه‌ای جهت مدلسازی احتراق مخلوط همگن اشتعال تراکمی استفاده کرده و نتایج بهتری نسبت به مدل تک منطقه‌ای به دست آورد. از مدل‌های چند منطقه‌ای با تعداد مناطق بیشتر نیز استفاده شده است. به عنوان مثال، کومنینوس [۱۱] از مدل احتراق یازده منطقه‌ای برای مدلسازی این احتراق استفاده کرده است. کانگسیرپارپ [۱۲] نیز از مدل احتراق یازده منطقه‌ای جهت در نظر گرفتن گرادیان دما و غلظت در داخل محفظه سیلندر استفاده کرد. با استفاده از مدل مذکور متغیرهای عملکردی موتور به صورت مناسبی پیش‌بینی شدند. آکوس [۱۳] از مدل ده منطقه‌ای تودرتو بدون در نظر گرفتن انتقال جرم و گرما بین مناطق، برای مدلسازی استفاده کرده است. آمانو [۱۴] نیز از مدل چند منطقه‌ای با در نظر گرفتن انتقال گرما بین مناطق به بررسی این احتراق پرداخته است. ایسلی [۱۵] از مدل شش منطقه‌ای تودرتو استفاده کرده است. در مدل او منطقه شش به عنوان منطقه شکاف در نظر گرفته شده است. همچنین محققان دیگری از الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی واکنش‌های احتراق استفاده کرده‌اند. به عنوان مثال هریس [۱۶] توانایی الگوریتم ژنتیک را برای بهینه‌سازی ضرایب سینتیکی واکنش‌های احتراق نشان داد. کانگسیرپارپ [۱۷] سازوکار ترکیبی برای سوخت هپتان نرمال و گاز سنتز با استفاده از بهینه‌سازی ضرایب سینتیکی سازوکار احتراق هپتان نرمال توسط الگوریتم ژنتیک ارائه کرده است. نتایج کار او نشان‌دهنده پیش‌بینی صحیح زمان شروع احتراق با استفاده از این سازوکار است.

در کار حاضر، از مدل احتراق چند منطقه‌ای و دو پیکره‌بندی مختلف جهت در نظر گرفتن گرادیان دما و غلظت در داخل محفظه سیلندر استفاده شده است. هدف از این تحقیق ارائه سازوکار ترکیبی برای دو سوخت گاز طبیعی و هپتان نرمال و بررسی احتراق این سوخت ترکیبی در موتور مخلوط همگن اشتعال تراکمی با دو پیکره‌بندی مختلف است. پیکره‌بندی اول شامل شش منطقه و پیکره‌بندی دوم شامل یازده منطقه است. تفاوت این دو نوع پیکره‌بندی با کارهای قبلی، در نظر گرفتن انتقال گرما و جرم بین تمامی مناطق و همچنین در نظر گرفتن سه منطقه به جای یک منطقه برای لایه مرزی مجاور با سیلندر است. به این صورت که بالا و پایین و اطراف سیلندر هر کدام به عنوان منطقه‌ای جداگانه در نظر گرفته شده است. برای تعیین واکنش‌های مهم در سازوکار ترکیبی تفصیلی ارائه شده، تحلیل حساسیت انجام می‌شود. همچنین از الگوریتم ژنتیک برای تصحیح متغیرهای سینتیکی واکنش‌های مشخص شده توسط آزمون تحلیل حساسیت استفاده می‌شود. برای

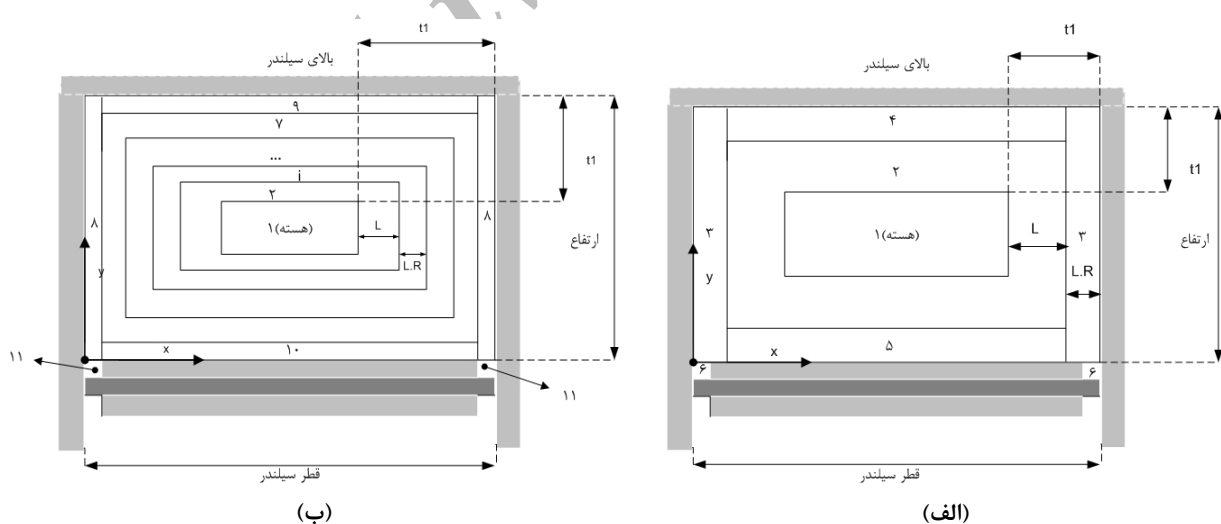
استفاده از الگوریتم ژنتیک شرایط عملکردی مختلفی برای موتور در نظر گرفته می‌شود تا بتوان احتراق و عملکرد و نشر آلاینده‌های موتورهای مخلوط همگن اشتعال تراکمی را در بازه وسیعی از شرایط عملکردی موتور پیش‌بینی کرد. سازوکار سینتیکی ترکیبی ارائه شده از ترکیب دو سازوکار GRI-MECH3 [۱۸] (شامل ۵۳ گونه شیمیایی و ۳۲۵ واکنش) برای احتراق گاز طبیعی و سازوکار Valeri [۱۹] (شامل ۵۷ گونه شیمیایی و ۲۹۰ واکنش) برای احتراق هپتان نرمال تشکیل می‌شود. سازوکار سینتیکی ترکیبی توسعه یافته شامل ۷۶ گونه شیمیایی و ۴۶۴ واکنش است که دربرگیرنده واکنش‌های هپتان نرمال و گاز طبیعی است. در این سازوکار ترکیبی، واکنش‌های ۱ تا ۳۲۵ دقیقاً مطابق با سازوکار GRI-MECH3 است و واکنش‌های ۳۲۶ تا ۴۶۴ از سازوکار Valeri استخراج شده که در ضمیمه الف نشان داده شده است.

فرضیات مدل

مدلسازی در قسمت بسته چرخه احتراق یعنی از بسته شدن سوپاپ مکش تا باز شدن سوپاپ تخلیه که شامل مراحل تراکم، احتراق و انبساط است، صورت گرفته است. فشار، دما، غلظت و دیگر متغیرهای ترمودینامیکی هر یک از مناطق بر اساس قانون گاز ایدئال محاسبه شده و در لحظه شروع مدلسازی یعنی بسته شدن سوپاپ مکش برای تمامی مناطق یکسان در نظر گرفته شده است. برای بقیه مراحل مدلسازی به دلیل در نظر گرفتن مدل احتراق چند منطقه‌ای گرادیان دما و غلظت بین مناطق در نظر گرفته شده است. همچنین جهت کاهش زمان محاسباتی فرض شده است که در دمای کمتر از ۶۰۰ درجه کلوین، انجام واکنش‌های سینتیکی احتراق ناچیز بوده و از آن‌ها صرف‌نظر شده است. دلیل این امر این است که از بین دو هیدروکربن مورد نظر (گاز طبیعی و هپتان نرمال)، تنها هپتان نرمال دارای احتراق مرحله سرد (Cool flame region) است که بین ۶۰۰ تا ۸۰۰ درجه کلوین است [۲۰]. در ادامه به توصیف دو پیکره‌بندی در نظر گرفته شده و مدل‌های انتقال گرمای مورد استفاده و سایر معادلات حاکم بر مسئله می‌پردازیم.

پیکره‌بندی مناطق

شکل (۱) دو پیکره‌بندی در نظر گرفته شده را نشان می‌دهد.



شکل ۱- پیکره‌بندی مناطق در نظر گرفته شده، (الف) پیکره‌بندی شش منطقه‌ای (ب) پیکره‌بندی یازده منطقه‌ای

همان‌طور که از این شکل مشخص است مناطق فرضی در نظر گرفته شده برای هر یک از دو پیکره‌بندی را می‌توان به سه دسته طبقه‌بندی کرد: ۱- منطقه هسته که به صورت استوانه توپر با شماره ۱ در قسمت وسط سیلندر و با فاصله مساوی از بالا، پایین و دیواره سیلندر در نظر گرفته شده که این فاصله با متغیر t_1 در هر یک از دو پیکره‌بندی نشان داده شده است.

۲- مناطق مجاور که شامل مناطق ۲ تا ۵ در پیکره‌بندی شش منطقه‌ای و مناطق ۲ تا ۱۰ در پیکره‌بندی یازده منطقه‌ای است. فرض شده است که ضخامت هر یک از این مناطق با نزدیک‌تر شدن به دیواره سیلندر نازک‌تر می‌شود که برای در نظر گرفتن این امر از متغیر هندسی R که مقداری کوچک‌تر از یک فرض شده، استفاده شده است. دلیل در نظر گرفتن فرضیه نازک شدن ضخامت مناطق با نزدیک‌تر شدن به دیواره سیلندر این است که از نتایج استخراج شده برای این نوع احتراق از محاسبات دینامیک سیالاتی دیده می‌شود که هر چه به سمت دیواره سیلندر نزدیک‌تر می‌شویم تغییرات دمایی زیادتر می‌شود. بنابراین برای تطبیق این واقعیت در مدلسازی از متغیر هندسی R جهت نازک‌تر کردن ضخامت مناطق با نزدیک‌تر شدن به دیواره استفاده شده است. متغیر L نیز ضخامت منطقه ۲ را برای هر یک از دو پیکره‌بندی نشان می‌دهد. ۳- منطقه ۶ در پیکره‌بندی اول و منطقه ۱۱ در پیکره‌بندی دوم به عنوان منطقه نسوخته بین شیارهای پیستون و سیلندر در نظر گرفته شده است. در طول مدلسازی حجم این منطقه ثابت و برابر با سه درصد حجم فضای مرده موتور در نظر گرفته شده است [۲۱].

قابل ذکر است که نسبت حجم منطقه ۱ به کل محفظه احتراق در لحظه بسته شدن سوپاپ ورودی و متغیر هندسی R به عنوان متغیرهای قابل تنظیم در نظر گرفته شده و در این مطالعه به ترتیب برابر با $0/2$ و $0/8$ برای هر یک از دو پیکره‌بندی فرض شده‌اند. اعداد مذکور از مقایسه نتایج مدل چند منطقه‌ای با نتایج آزمایشگاهی به دست آمده است. با معلوم بودن این مقادیر تمامی ابعاد هندسی هر یک از مناطق در هر لحظه مشخص می‌شود.

انتقال گرما

برای محاسبه انتقال گرمای جابه‌جایی بین لایه مرزی و دیواره سیلندر از رابطه تصحیح شده وشنی [۲۲] استفاده شده که در معادله (۱) نشان داده شده است.

$$h_c(t) = \beta H(t)^{-0.2} P(t)^{0.8} T(t)^{-0.73} v(t)^{0.8} \quad (1)$$

در این معادله h_c ضریب انتقال گرمای جابه‌جایی و β ضریب تصحیح است که تابعی از هندسه موتور و برابر با $3/26$ است [۲۳]. همچنین H ارتفاع سیلندر، P فشار داخل سیلندر، T دمای منطقه مجاور دیواره سیلندر، v سرعت متوسط گازها و t زمان است.

انتقال گرمای بین مناطق نیز طبق سازوکار هدایتی انجام می‌شود. بنابراین شار گرمایی را طبق رابطه فوریه می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\dot{q} = -k_{tot} \frac{dT}{dy} \quad (2)$$

در این رابطه \dot{q} شار گرمایی، y فاصله بین دو منطقه مجاور و k_{tot} ضریب هدایتی کل دو منطقه مجاور است. برای محاسبه ضریب هدایتی کل از روش یانگ و مارتین [۲۴] استفاده شده است. در این روش ضریب هدایتی کل به صورت مجموع دو ضریب هدایتی آرام و آشفته بیان می‌شود که شامل رابطه‌های زیر است:

$$K_{tot} = k_l + k_t \quad (3)$$

$$\frac{k_t}{k_l} = \frac{Pr_l \mu_t}{Pr_t \mu_l} \quad (4)$$

$$\frac{\mu_t}{\mu_l} = ky_n^+ [1 - \exp(-2\alpha ky_n^+)] \quad (5)$$

$$y_n^+ = \frac{u^*}{\mu_w} \int_0^{y_n} \rho dy_n \quad (6)$$

در معادلات بالا زیرنویس l نشانگر جمله آرام، زیرنویس t نشانگر جمله آشفته و w نشانگر محاسبه متغیر مورد نظر در دمای دیواره سیلندر است. همچنین Pr عدد بی‌بعد پرانتل، μ گرانیوی، y_n فاصله معمولی از دیواره سیلندر، k ضریب فون کارمن و برابر با $0/41$ ، α برابر با $0/06$ [۱۱]، ρ دانسیته و u^* سرعت مشخصه که متناسب با دور موتور است.

قابل ذکر است که دمای منطقه نسوخته یعنی منطقه ۶ در پیکره‌بندی اول و منطقه ۱۱ در پیکره‌بندی دوم برابر با دمای دیواره سیلندر در نظر گرفته شده است. علت این امر زیاد بودن نرخ انتقال گرما در این مناطق به دلیل بالا بودن نسبت سطح به حجم در این مناطق است [۲۱].

معادلات حاکم بر مسئله

جرم کل داخل محفظه سیلندر به دلیل مدلسازی قسمت بسته چرخه احتراق یعنی از لحظه بسته شدن سوپاپ ورودی تا باز شدن سوپاپ خروجی ثابت است، ولی جرم هر یک از مناطق ثابت نبوده و به دلیل یکسان بودن فشار داخل محفظه احتراق، انتقال جرم بین مناطق انجام می‌شود. بنابراین خواهیم داشت:

$$\frac{dm_{tot}}{dt} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{dm_k}{dt} \neq 0 \quad K = 1, \dots, N_Z \quad (8)$$

$$\sum_{K=1}^{N_Z} m_k = m_{tot} \quad K = 1, \dots, N_Z \quad (9)$$

در معادلات بالا m_{tot} جرم کل داخل سیلندر، زیرنویس k نشانگر منطقه k ام و N_Z تعداد کل مناطق است.

برای محاسبه فشار داخل سیلندر و جرم تمامی مناطق از قانون گاز ایدئال به صورت زیر استفاده می‌شود:

$$P = \frac{m_{tot} R_u}{\sum_{k=1}^{N_Z} \frac{V_k MW_k}{T_k}} \quad (10)$$

$$m_k = P \frac{V_k MW_k}{R_u T_k} \quad K = 1, \dots, N_Z \quad (11)$$

در معادلات بالا V_k حجم منطقه k ام، T_k دمای منطقه k ام، MW_k جرم مولکولی متوسط منطقه k ام و R_u ثابت جهانی گازهاست. معادلات تغییر حجم سیلندر، بقای انرژی و نرخ تولید خالص گونه‌ها نیز به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$\frac{dV}{dt} = V_c \left[\frac{1}{2} (r_c - 1) \sin \theta \frac{d\theta}{dt} - \frac{1}{2} (R_c^2 - \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}} (-\sin 2\theta) \frac{d\theta}{dt} \right] \quad (12)$$

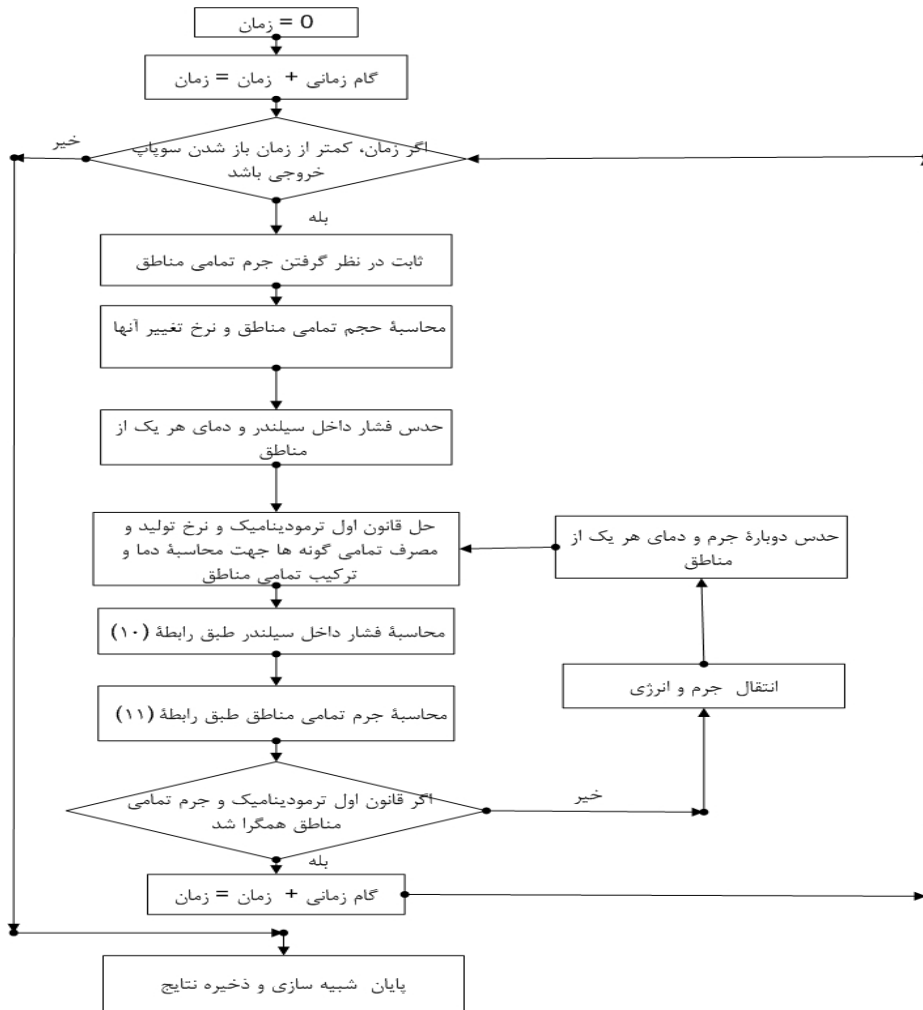
$$m_k \bar{c}_v^k \frac{dT_k}{dt} = -m_k \sum_{i=1}^{N_s} U_i \frac{dY_{i,k}}{dt} - P \frac{dV_k}{dt} + \frac{dQ_k}{dt} \quad (13)$$

$$\frac{dY_{i,k}}{dt} = \frac{\dot{\omega}_{i,k} MW_i}{\rho_k} \quad (14)$$

در معادلات بالا V_c حجم فضای مرده، r_c نسبت تراکم، θ زاویه میل لنگ، R_c نسبت طول شاتون به طول لنگ، \bar{c}_v^k ظرفیت گرمایی متوسط منطقه k ام در حجم ثابت، $Y_{i,k}$ جزء جرمی گونه i در منطقه k ام، Q_k گرمای ورودی یا خروجی از منطقه k ام، N_s تعداد کل گونه‌های شیمیایی، ρ_k دانسیته متوسط منطقه k ام و $\dot{\omega}_{i,k}$ آهنگ مولی مصرف گونه i در منطقه k ام است.

شرح روش حل مسئله

مدل مذکور به زبان برنامه‌نویسی فرترن نوشته شده است. الگوریتم رایانه‌ای مدل مذکور در شکل (۲) نشان داده شده است.



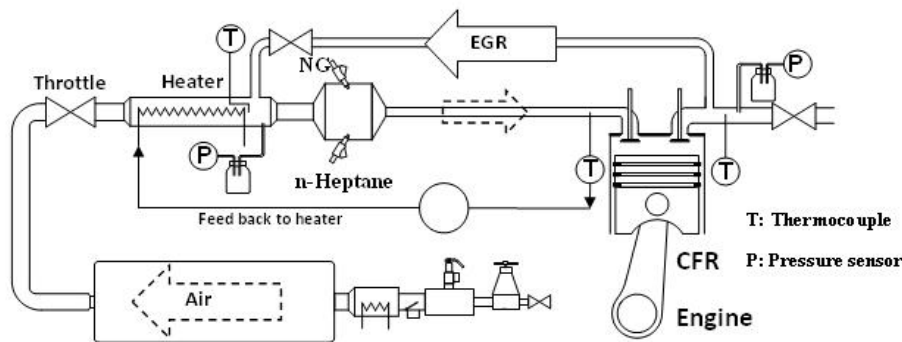
شکل ۲- فلوجارت حل مسئله

همان‌طور که از این شکل مشخص است محاسبات برای هر بازه زمانی در دو مرحله انجام می‌شود. در مرحله اول جرم مناطق ثابت در نظر گرفته می‌شود یا به عبارتی از انتقال جرم بین مناطق صرف‌نظر می‌شود. در این مرحله دما و ترکیب هر منطقه با حل همزمان قانون اول ترمودینامیک و نرخ تولید و مصرف تک‌تک گونه‌ها محاسبه می‌شود. در مرحله دوم در ابتدا فشار و جرم تمامی مناطق با استفاده از معادلات (۱۰) و (۱۱) محاسبه می‌شود. اگر جرم محاسبه شده در این مرحله با جرم فرض شده در مرحله اول تفاوت بیشتری از تلورانس در نظر گرفته شده داشته باشد یا قانون اول ترمودینامیک ارضاء نشود، انتقال جرم بین مناطق صورت می‌گیرد. به دلیل انتقال جرم، انتقال انرژی و گونه‌های شیمیایی نیز صورت می‌گیرد. بنابراین مرحله دوم تا همگرایی جرم تمامی مناطق و قانون اول ترمودینامیک تکرار می‌شود.

مشخصات موتور و پایلوت آزمایشگاهی

برای ارزیابی نتایج مدل از نتایج آزمایشگاهی استفاده شده است. نتایج آزمایشگاهی مورد نظر از آزمایش‌های انجام شده بر روی موتور تحقیقاتی CFR مدل Waukesha در آزمایشگاه موتور دانشگاه آلبرتا تهیه شده است. موتور مورد نظر دارای قطر سیلندر ضرب در کورس برابر با $۸۲/۶ \times ۱۱۴/۳$ میلی‌متر و حجم جابه‌جایی برابر با ۶۱۲ سانتی‌متر مکعب است. این موتور دارای قابلیت تنظیم فشار ورودی و نیز حاوی یک گرم‌کننده جهت تنظیم دمای مخلوط ورودی است. ورودی‌های مورد نظر به سیلندر شامل

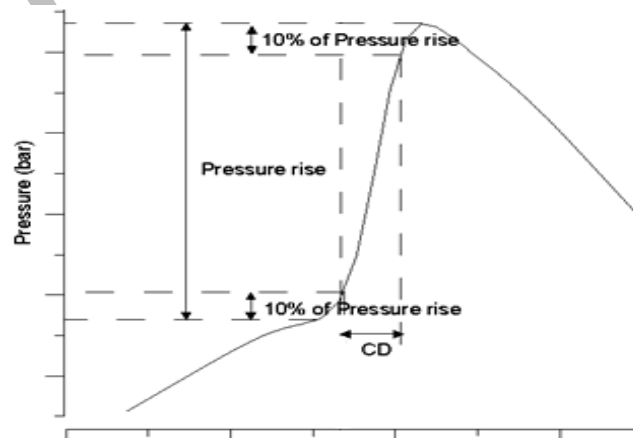
هوا، گاز طبیعی، هپتان نرمال و بازخورانی گازهای خروجی است. تزریق سوخت به صورت مایع یا گاز، با استفاده از دو افشانه (Injector) مجزا انجام می‌شود. برای تنظیم مقدار بازخورانی گازهای خروجی نیز از یک شیر پروانه‌ای استفاده شده است. برای اندازه‌گیری فشار داخل سیلندر، یک ترنسدیوسر فشار مدل Kistler 6043A به کار گرفته شده که زمان‌بندی داده‌برداری توسط یک زاویه‌سنج از نوع BEI انجام شده است که قابلیت اندازه‌گیری به ازای ۰/۱ درجه میل‌لنگ را دارد. همچنین داده‌های آزمایشگاهی در دور موتور ثابت و برابر با ۸۰۰ دور بر دقیقه به دست آمده است. شکل (۳) پایلوت آزمایشگاهی مورد نظر را نشان می‌دهد.



شکل ۳- پایلوت آزمایشگاهی استفاده شده

تحلیل حساسیت

هدف از انجام تحلیل حساسیت تعیین واکنش‌های مهم برای بهینه‌سازی متغیرهای سینتیکی آن‌هاست. تحلیل حساسیت با دور موتور ۸۰۰ دور بر دقیقه، نسبت هم‌ارزی برابر با ۰/۴۱، ۰/۱۶ و مقدار بازخورانی گازهای خروجی برابر با ۱/۵ درصد، ۲۴ درصد و تحت شرایط عملکردی یعنی فشار ورودی برابر با ۱/۰۱ بار، ۱/۰۵ بار، دمای ورودی برابر با ۳۷۳ کلوین، ۳۹۳ کلوین و جزء جرمی گاز طبیعی برابر با ۴۴ درصد، ۷۲/۵ درصد انجام شده است. این آزمون با استفاده از مدل چند منطقه‌ای احتراق و هر یک از دو پیکره‌بندی ذکر شده، انجام شده است. متغیرهای انتخاب شده جهت تحلیل حساسیت زمان شروع احتراق و مدت زمان احتراق است. در این مطالعه زمان شروع احتراق برابر با زمانی که بیشترین افزایش فشار رخ می‌دهد، انتخاب شده و مدت زمان احتراق برابر با مدت زمان افزایش فشار در مرحله احتراق اصلی از ۱۰ درصد تا ۹۰ درصد انتخاب شده است [۲۵]. شکل (۴) تعیین مدت زمان احتراق (CD) با استفاده از نمودار فشار را به صورت طر حواره نشان می‌دهد.



شکل ۴- تعیین مدت زمان احتراق با استفاده از نمودار فشار

تحلیل حساسیت از تفاضل نسبی دو متغیر ذکر شده محاسبه می‌شود. یکی از این دو مقدار از نتایج مدل با در نظر گرفتن سازوکار اصلی و متغیر سینتیکی مورد نظر و دیگری از نتایج مدل با افزایش دو برابر همان متغیر سینتیکی به دست می‌آید که در رابطه زیر نشان داده شده است.

$$Sensitivity(i, j) = \frac{|Z_{original}(i, j) - Z_{modified}(i, j)|}{Z_{original}(i, j)} \quad (15)$$

در رابطه بالا Z نشان‌دهنده زمان شروع احتراق یا مدت زمان احتراق، i نشان‌دهنده شماره واکنش و j نشان‌دهنده هر یک از متغیرهای سینتیکی آرنیوسی یعنی A ، b و E طبق رابطه زیر است:

$$K = A \times T^b \times \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (16)$$

معیار انتخاب واکنش‌های حساس برای شروع زمان احتراق 0.01 و مدت زمان احتراق 0.1 در نظر گرفته شده است. جدول (۱) واکنش‌هایی را که در آزمون تحلیل حساسیت مقادیری مساوی یا بالاتر از معیارهای ذکر شده داشته‌اند را نشان می‌دهد.

الگوریتم ژنتیک

در این مقاله برای بهینه‌سازی متغیرهای سینتیک شیمیایی واکنش‌های مشخص شده توسط تحلیل حساسیت از الگوریتم ژنتیک استفاده شده است. اساس اندیشه الگوریتم ژنتیک، استفاده از مفهوم وراثت بین نسل‌های جمعیت و به کارگیری آن به عنوان یک الگوریتم است. بر اساس نظریه انتخاب داروین از بین یک جمعیت موجوداتی باقی می‌مانند که بیشترین تطابق را با شرایط محیطی خود داشته باشند [۲۶].

در این کار، با استفاده از یک کد که به زبان برنامه نویسی فرترن نوشته شده است، نخست الگوریتم ژنتیک متغیرهای سینتیکی را از داخل یک فایل به عنوان ورودی فراخوانی می‌کند. سپس جمعیتی را در بازه ± 15 درصد به صورت تصادفی تولید می‌کند و با فراخوانی برنامه مربوط به سینتیک شیمیایی تفصیلی احتراق چند منطقه‌ای، برآورد اولیه‌ای از تابع سازگاری با استفاده از این جمعیت اولیه انجام می‌دهد. سپس با استفاده از عملگرهای انتخاب، ادغام و جهش جمعیت جدیدی را تولید می‌کند و تابع سازگاری را مجدداً محاسبه می‌کند و مراحل بعدی به صورت سلسله‌وار تا رسیدن به حداکثر نسل که برابر با 500 در نظر گرفته شده، ادامه می‌یابد. نرخ ادغام، نرخ جهش و تعداد جمعیت به ترتیب برابر با 0.5 ، 0.2 و 50 در نظر گرفته شده‌اند.

تابع سازگاری مورد استفاده در الگوریتم ژنتیک به صورت زیر تعریف شده است:

$$\text{Fitness Function} = \sum_{i=1}^2 w_i \times \left| \frac{X_{i,code} - X_{i,test}}{X_{i,test}} \right| \quad (17)$$

در معادله بالا w_i ضریب وزنی تابع هدف i ام و جمله $\left| \frac{X_{i,code} - X_{i,test}}{X_{i,test}} \right|$ نیز به عنوان تابع هدف i ام است که در آن، $X_{i,code}$

مقدار محاسبه شده متغیر i ام به وسیله مدل و $X_{i,test}$ مقدار به دست آمده آزمایشگاهی برای متغیر i ام است. متغیرهای انتخاب شده به دو گروه اصلی تقسیم می‌شوند. اولین گروه شامل زمان شروع احتراق و فشار موثر متوسط بوده که نشانگر احتراق و عملکرد موتورند. دومین گروه شامل متغیرهای آلایندگی موتور یعنی میزان مونوکسیدکربن و هیدروکربن‌های نسوخته در لحظه باز شدن سوپاپ خروجی‌اند. جدول (۱) نیز ضرایب سینتیکی بهینه واکنش‌های انتخاب شده را برای دو پیکره‌بندی نشان می‌دهد. جدول (۲) نیز هفت حالت عملکردی انتخاب شده را نشان می‌دهد. در این جدول حالت‌های ۱ تا ۴ برای ارزیابی نتایج مدل و حالت‌های ۵ تا ۷ برای فرایند بهینه‌سازی در الگوریتم ژنتیک استفاده شده است.

جدول ۱- واکنش‌های منتخب به همراه مقادیر بهینه شده برای دو پیکره‌بندی انتخاب شده

شماره واکنش	واکنش	A (mol · cm · s · K) (اصلی)	A (mol · cm · s · K) (بهینه شده)	
			پیکره‌بندی شش منطقه‌ای	پیکره‌بندی یازده منطقه‌ای
۸۵	2OH(+M)=H2O2(+M)	$7/40 \times 10^{13}$	$7/61 \times 10^{13}$	$7/02 \times 10^{13}$
۸۷	OH+HO2=O2+H2O	$1/45 \times 10^{13}$	$1/50 \times 10^{13}$	$1/47 \times 10^{13}$
۸۸	OH+H2O2=HO2+H2O	$2/00 \times 10^{13}$	$1/77 \times 10^{13}$	$2/18 \times 10^{13}$
۱۰۱	OH+CH2O=HCO+H2O	$3/43 \times 10^9$	$3/00 \times 10^9$	$3/76 \times 10^9$
۱۱۹	HO2+CH3=OH+CH3O	$3/78 \times 10^{13}$	$4/26 \times 10^{13}$	$3/23 \times 10^{13}$
۱۲۱	HO2+CH2O=HCO+H2O2	$5/60 \times 10^6$	$5/53 \times 10^6$	$5/90 \times 10^6$
۳۲۶	C7H16+O2=C7H15-1+HO2	$2/50 \times 10^{13}$	$2/44 \times 10^{13}$	$2/85 \times 10^{13}$
۳۲۷	C7H16+O2=C7H15-2+HO2	$2/80 \times 10^{14}$	$2/78 \times 10^{14}$	$2/87 \times 10^{14}$
۳۳۰	C7H16+OH=C7H15-1+H2O	$8/60 \times 10^9$	$8/54 \times 10^9$	$9/82 \times 10^9$
۳۳۱	C7H16+OH=C7H15-2+H2O	$4/80 \times 10^9$	$5/10 \times 10^9$	$4/56 \times 10^9$
۳۳۳	C7H16+HO2=C7H15-2+H2O2	$1/00 \times 10^{13}$	$9/93 \times 10^{13}$	$1/14 \times 10^{13}$
۳۳۵	C7H16+CH3=C7H15-2+CH4	$8/00 \times 10^{11}$	$7/61 \times 10^{11}$	$7/25 \times 10^{11}$
۳۴۲	C7H14O2H+O2=C7H14O2HO2	$2/34 \times 10^{11}$	$2/42 \times 10^{11}$	$2/00 \times 10^{11}$
۳۴۳	C7H14O2HO2=C7KET21+OH	$2/97 \times 10^{13}$	$2/63 \times 10^{13}$	$2/95 \times 10^{13}$
۳۴۴	C7KET21=C5H11CO+CH2O+OH	$1/00 \times 10^{16}$	$1/10 \times 10^{16}$	$1/11 \times 10^{16}$
۳۵۳	C5H11=C2H5+C3H6	$3/20 \times 10^{13}$	$3/41 \times 10^{13}$	$3/22 \times 10^{13}$
۳۹۵	CH3O2+HO2=CH4O2+O2	$4/63 \times 10^{11}$	$4/08 \times 10^{11}$	$5/01 \times 10^{11}$
		(b) (اصلی)	b (بهینه شده)	
			پیکره‌بندی شش منطقه‌ای	پیکره‌بندی یازده منطقه‌ای
۴۷	H+H2O2=HO2+H2	۲/۰۰	۲/۲۸	۱/۸۷
۵۳	H+CH4=CH3+H2	۱/۶۲	۱/۶۰	۱/۷۶
۸۵	2OH(+M)=H2O2(+M)	-۰/۳۷	-۰/۴۲	-۰/۳۶
۹۹	OH+CO=H+CO2	۱/۲۳	۱/۲۲	۱/۱۷
۱۱۲	OH+C2H4=C2H3+H2O	۲/۰۰	۱/۹۶	۲/۰۱
۱۱۳	OH+C2H6=C2H5+H2O	۲/۱۲	۲/۲۲	۲/۲۸
۱۲۱	HO2+CH2O=HCO+H2O2	۲/۰۰	۱/۸۹	۱/۹۵
۱۶۱	CH3+CH2O=HCO+CH4	۲/۸۱	۳/۱۲	۳/۱۶
۱۶۳	CH3+CH3OH=CH3O+CH4	۱/۵۰	۱/۳۱	۱/۲۸
۱۶۵	CH3+C2H6=C2H5+CH4	۱/۷۴	۱/۷۵	۱/۷۷
۳۲۸	C7H16+H=C7H15-1+H2	۲/۰۰	۲/۲۶	۱/۷۸
۳۲۹	C7H16+H=C7H15-2+H2	۲/۰۰	۱/۷۴	۲/۰۱
۳۳۰	C7H16+OH=C7H15-1+H2O	۱/۱۰	۱/۱۳	۱/۱۶
۳۳۱	C7H16+OH=C7H15-2+H2O	۱/۳۰	۱/۳۰	۱/۲۲

		E (cal/mole) (اصلی)	E (cal/mole) (بهینه شده)	
			پیکره‌بندی شش منطقه‌ای	پیکره‌بندی یازده منطقه‌ای
۳۸	H+O ₂ =O+OH	۱۷۰۳۹	۱۵۱۷۰	۱۷۹۷۷
۱۲۱	C+O ₂ =O+CO	۱۱۹۹۹	۱۳۰۰۷	۱۱۱۹۶
۳۲۶	C ₇ H ₁₆ +O ₂ =C ₇ H ₁₅ -1+HO ₂	۴۸۸۰۵	۵۴۴۰۵	۵۰۳۷۲
۳۲۷	C ₇ H ₁₆ +O ₂ =C ₇ H ₁₅ -2+HO ₂	۴۷۱۷۵	۵۲۵۳۶	۴۸۹۴۶
۳۳۰	C ₇ H ₁₆ +OH=C ₇ H ₁₅ -1+H ₂ O	۱۸۱۵	۱۶۵۶	۱۷۶۹
۳۳۱	C ₇ H ₁₆ +OH=C ₇ H ₁₅ -2+H ₂ O	۶۹۰	۶۹۲	۶۹۸
۳۳۳	C ₇ H ₁₆ +HO ₂ =C ₇ H ₁₅ -2+H ₂ O ₂	۱۶۹۴۸	۱۷۱۲۵	۱۴۵۹۲
۳۵۲	C ₅ H ₁₁ CO=C ₅ H ₁₁ +CO	۹۵۹۹	۸۵۰۶	۸۷۵۴
۳۵۳	C ₅ H ₁₁ =C ₂ H ₅ +C ₃ H ₆	۲۸۲۹۷	۲۷۲۲۶	۳۲۳۳۴
۳۷۱	C ₃ H ₅ +O ₂ =C ₃ H ₄ +HO ₂	۹۹۹۹	۱۱۰۶۲	۱۰۸۱۶
۳۹۴	CH ₃ +O ₂ =CH ₃ O ₂	۱۷۲۰۲	۱۷۷۳۳	۱۹۱۷۲
۳۹۵	CH ₃ O ₂ +HO ₂ =CH ₄ O ₂ +O ₂	-۲۵۸۳	-۲۷۴۴	-۲۹۲۶
۴۰۴	CH ₄ O ₂ =CH ₃ O+OH	۴۲۹۱۵	۴۱۵۹۹	۴۸۷۲۱

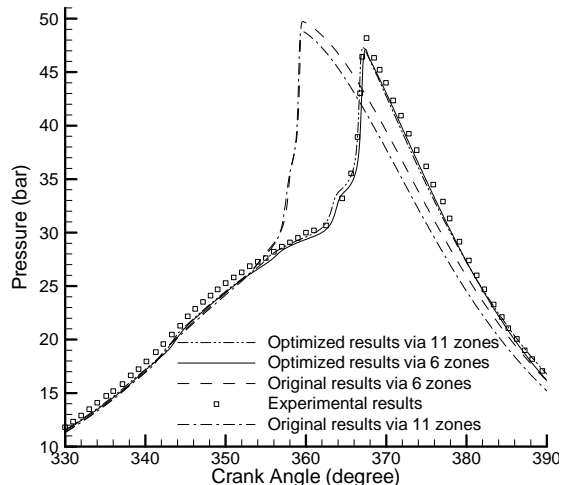
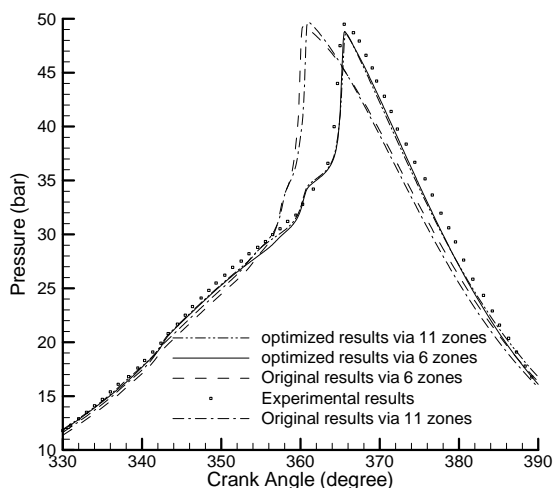
جدول ۲- شرایط عملکردی حالت‌های انتخاب شده

حالت	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷
نسبت هم‌ارزی (Φ)	۰/۴۵	۰/۴۳	۰/۶۲	۰/۴۳	۰/۶	۰/۳۷	۰/۴۱
درصد جرمی گاز طبیعی	۳۶/۵	۴۴/۶	۶۴	۸۵/۲	۴۴	۶۵	۷۲/۵
دمای مخلوط ورودی (کلوین)	۳۹۳	۳۹۳	۴۱۳	۴۱۳	۳۹۳	۴۱۳	۳۷۳
فشار مخلوط ورودی (بار)	۱/۰۱	۰/۹۳	۰/۹۵	۱/۰۷	۱/۰۵	۰/۹۹	۱/۰۳
درصد بازخورانی گازهای خروجی	۱۹/۲	۸/۱	۴۱/۶	۰	۲۴	۰	۱/۵
نسبت تراکم	۱۳/۸	۱۳/۸	۱۶	۱۶	۱۳/۸	۱۶	۱۶

بحث و نتایج

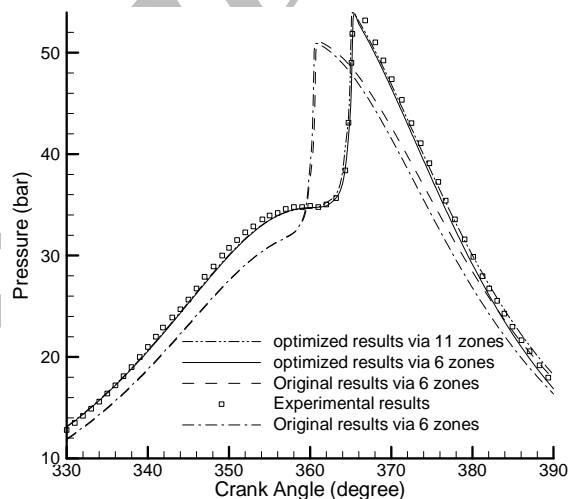
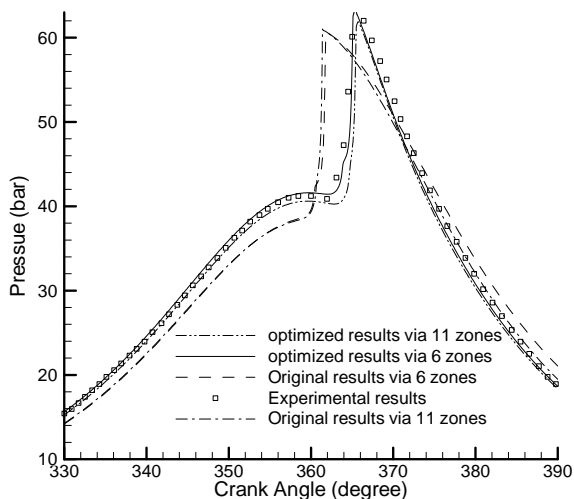
در این بخش به ارزیابی نتایج سازوکارهای بهینه شده برای دو پیکره‌بندی در پیش‌بینی متغیرهای احتراق، عملکرد و آلاینده‌گی موتور می‌پردازیم. برای مقایسه نتایج مدل‌ها از نتایج آزمایشگاهی موتور تحقیقاتی ذکر شده استفاده شده است. چهار حالت عملکردی مختلف یعنی حالت ۱ تا ۴ برای بررسی نتایج دو پیکره‌بندی انتخاب شده که در جدول (۲) نشان داده شده است. هر یک از این حالت‌ها به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که پوشش نسبتاً وسیعی از لحاظ نسبت هم‌ارزی، مقدار بازخورانی گازهای خروجی و درصد جرمی گاز طبیعی در مخلوط سوخت داشته باشند.

شکل (۵) نمودار فشار داخل سیلندر را برای هر یک از چهار حالت منتخب نشان می‌دهد. همان‌طور که از این شکل دیده می‌شود هر یک از دو سازوکار بهینه ارائه شده، فشار داخل سیلندر را در مراحل تراکم، احتراق و انبساط به خوبی پیش‌بینی می‌کنند و هر دو مدل توافق خوبی با نتایج آزمایشگاهی در بازه وسیعی از نسبت‌های مختلف گاز طبیعی و هیتان نرمال دارند. همچنین نتایج پیش‌بینی شده توسط سازوکارهای بهینه نشده در هر دو مدل احتراق چند منطقه‌ای، اختلاف زیادی با نتایج آزمایشگاهی دارند. این موضوع نیاز به بهینه‌سازی ضرایب سینتیکی سازوکارهای ترکیبی ارائه شده را آشکار می‌سازد.



حالت ۲

حالت ۱



حالت ۴

حالت ۳

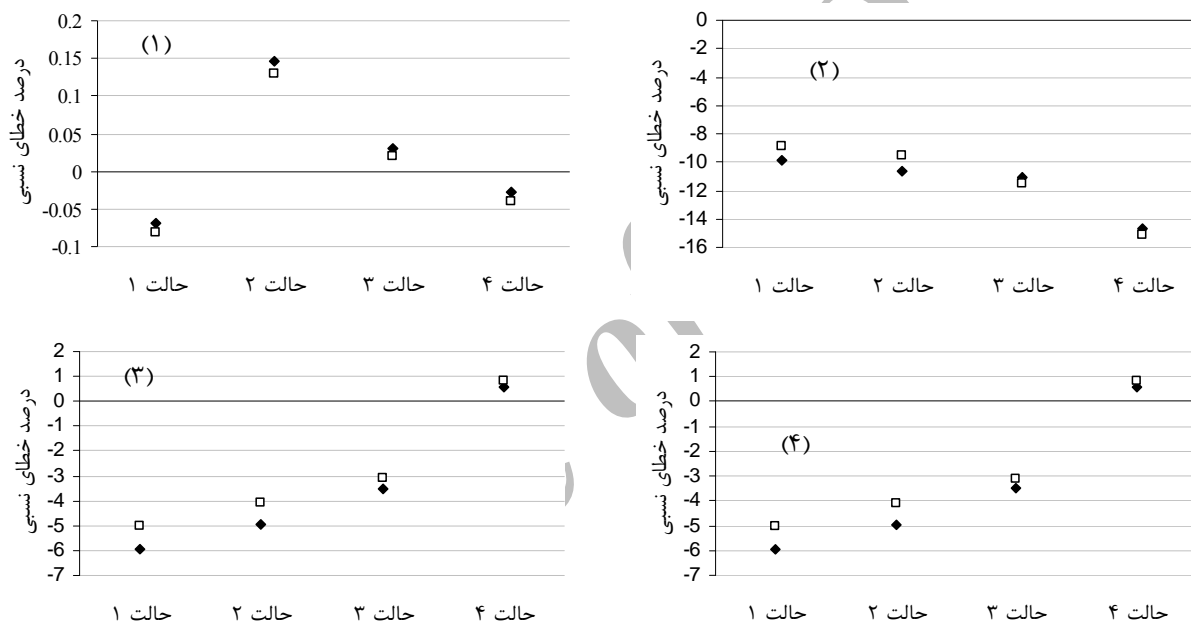
شکل ۵- مقایسه نمودار فشار برای هر دو پیکره بندی با نتایج آزمایشگاهی

جدول (۳) مقادیر پیش بینی شده و آزمایشگاهی مونوکسیدکربن و هیدروکربن های نسوخته را در لحظه باز شدن سوپاپ خروجی نشان می دهد. همان طور که از جدول مشخص است هر دو مدل مذکور میزان هر دو آلاینده را به صورت مناسبی پیش بینی کرده اند.

جدول ۳- مقادیر تجربی و پیش بینی شده مونوکسیدکربن و هیدروکربن های نسوخته

	حالت ۱		حالت ۲		حالت ۳		حالت ۴	
	تجربی (مول)	محاسبه شده (مول)	تجربی (مول)	محاسبه شده (مول)	تجربی (مول)	محاسبه شده (مول)	تجربی (مول)	محاسبه شده (مول)
پیکره بندی شش منطقه ای								
مونوکسیدکربن	$1/84 \times 10^{-5}$	$1/67 \times 10^{-5}$	$1/91 \times 10^{-5}$	$2/21 \times 10^{-5}$	$1/66 \times 10^{-5}$	$1/38 \times 10^{-5}$	$1/29 \times 10^{-5}$	$1/05 \times 10^{-5}$
هیدروکربن های نسوخته	$6/05 \times 10^{-6}$	$5/39 \times 10^{-6}$	$4/61 \times 10^{-6}$	$4/35 \times 10^{-6}$	$5/57 \times 10^{-6}$	$6/27 \times 10^{-6}$	$7/01 \times 10^{-6}$	$5/81 \times 10^{-6}$
پیکره بندی یازده منطقه ای								
مونوکسیدکربن	$1/84 \times 10^{-5}$	$1/70 \times 10^{-5}$	$1/91 \times 10^{-5}$	$2/25 \times 10^{-5}$	$1/66 \times 10^{-5}$	$1/41 \times 10^{-5}$	$1/29 \times 10^{-5}$	$1/07 \times 10^{-5}$
هیدروکربن های نسوخته	$6/05 \times 10^{-6}$	$4/61 \times 10^{-6}$	$4/61 \times 10^{-6}$	$4/39 \times 10^{-6}$	$5/57 \times 10^{-6}$	$6/33 \times 10^{-6}$	$7/01 \times 10^{-6}$	$5/96 \times 10^{-6}$

علاوه بر بررسی فشار داخل سیلندر چهار متغیر عملکردی موتور یعنی شروع زمان احتراق، مدت زمان احتراق، فشار متوسط میانگین و بازده گرمایی نیز توسط دو سازوکار بهینه شده پیش‌بینی شده و با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده‌اند. شکل (۶) درصد خطای نسبی بین نتایج به دست آمده توسط دو مدل و نتایج آزمایشگاهی برای متغیرهای عملکردی مذکور را نشان می‌دهد. شروع زمان احتراق وابستگی زیادی به سازوکار سینتیک شیمیایی دارد و همان‌طور که از شکل مشخص است هر دو مدل در چهار حالت منتخب این متغیر را به خوبی پیش‌بینی کرده‌اند. مدت زمان احتراق نیز وابستگی زیادی به سازوکار سینتیک شیمیایی و ویژگی‌های ترمودینامیکی مخلوط اولیه دارد. برای تمام حالت‌ها، هر دو مدل این متغیر را بیشتر از مقدار آزمایشگاهی پیش‌بینی کرده‌اند. دلیل این امر مشکل بودن اندازه‌گیری این متغیر برای مخلوط سوخت‌های دارای عدد اکتان بالاست. به دلیل وابستگی مستقیم دو متغیر فشار موثر متوسط و بازده گرمایی به نمودار فشار و پیش‌بینی خوب این نمودار برای هر یک از حالت‌ها توسط هر دو مدل، این دو متغیر نیز به صورت مناسبی پیش‌بینی شده‌اند.



شکل ۶- مقایسه نتایج مدل‌ها با نتایج آزمایشگاهی: (۱) شروع زمان احتراق (۲) مدت زمان احتراق (۳) فشار موثر متوسط (۴) بازده گرمایی (♦: مطابق مدل شش منطقه‌ای، □: مطابق مدل یازده منطقه‌ای)

با مقایسه نتایج پیش‌بینی شده توسط هر دو پیکره‌بندی ذکر شده با استفاده از مدل احتراق چندمنطقه‌ای می‌توان نتیجه‌گیری کرد که افزایش تعداد مناطق نه تنها باعث بهبود نتایج نشده، بلکه باعث افزایش زمان محاسباتی لازم و پیچیدگی مسئله می‌شود.

نتیجه‌گیری

در کار حاضر سازوکار سینتیک شیمیایی ترکیبی جدیدی شامل ۷۶ گونه شیمیایی و ۴۶۴ واکنش برای احتراق مخلوط گاز طبیعی و هپتان نرمال در موتورهای مخلوط همگن اشتعال تراکمی با بهینه‌سازی ضرایب سینتیکی ارائه شده است. در این راستا، برای ارزیابی سازوکار ارائه شده از مدل احتراق چند منطقه‌ای با در نظر گرفتن دو پیکره‌بندی مختلف شامل شش و یازده منطقه استفاده شده است. پس از بررسی و مقایسه نتایج نمودارهای فشار و متغیرهای عملکردی و همچنین نتایج آلاینده‌های خروجی با نتایج آزمایشگاهی مشخص شد که نتایج مدل شش منطقه‌ای نزدیک به نتایج مدل یازده منطقه‌ای است. بنابراین در این مورد افزایش تعداد مناطق نه تنها باعث بهبود پیش‌بینی نتایج نشده، بلکه باعث افزایش زمان محاسباتی لازم و پیچیدگی مسئله شده است.

تشکر و قدردانی

نویسندگان این مقاله از آقای دکتر چکل از دانشگاه آلبرتای کانادا به دلیل فراهم نمودن امکانات تحقیقاتی موتور برای آزمایش‌های انجام شده تقدیر و تشکر می‌کنند.

ضمیمه الف: سازوکار ترکیبی گاز طبیعی و هپتان نرمال

گونه‌های شیمیایی در نظر گرفته شده:

C7H16, O2, N2, CO, CO2, H, H2, O, H2O, OH, HO2, H2O2, CH4, CH3, CH3O, CH2CO, CH2, CH2O, CH3O2, CH4O2, HCO, HCCO, C7H15-1, C7H15-2, C7H15O2, C7H14O2H, C7H14O2HO2, C7KET21, C6H12, C5H11CHO, C5H11CO, C5H11, C4H9, C4H, C4H2, C4H3, C3H7, C3H6, C3H5, C3H4, C3H3, C3H2, C2H, C2H2, C2H3, C2H4, C2H5, C2H6, N2O, NO,N, C3H8, CH2CHO, CH3CHO, CH3CO, CH2OH, C, CH, HCCOH, CH3OH, CH2(S), NH, NH2, NH3, NNH, NO2, HNO, CN, HCN, H2CN, HCNN, HCNO, HOCN, HNCO, NCO, AR.

شماره واکنش	واکنش	شماره واکنش	واکنش
۳۲۶	$C7H16+O2=C7H15-1+HO2$	۳۲۷	$C7H16+O2=C7H15-2+HO2$
۳۲۸	$C7H16+H=C7H15-1+H2$	۳۲۹	$C7H16+H=C7H15-2+H2$
۳۳۰	$C7H16+OH=C7H15-1+H2O$	۳۳۱	$C7H16+OH=C7H15-2+H2O$
۳۳۲	$C7H16+HO2=C7H15-1+H2O2$	۳۳۳	$C7H16+HO2=C7H15-2+H2O2$
۳۳۴	$C7H16+CH3=C7H15-1+CH4$	۳۳۵	$C7H16+CH3=C7H15-2+CH4$
۳۳۶	$C7H16=C7H15-1+H$	۳۳۷	$C7H16=C7H15-2+H$
۳۳۸	$C7H16=C4H9+C3H7$	۳۳۹	$C7H15-1+O2=C7H15O2$
۳۴۰	$C7H15-2+O2=C7H15O2$	۳۴۱	$C7H15O2=C7H14O2H$
۳۴۲	$C7H14O2H+O2=C7H14O2HO2$	۳۴۳	$C7H14O2HO2=C7KET21+OH$
۳۴۴	$C7KET21=C5H11CO+CH2O+OH$	۳۴۵	$C5H11CHO+O2=C5H11CO+HO2$
۳۴۶	$C5H11CHO+OH=C5H11CO+H2O$	۳۴۷	$C5H11CHO+H=C5H11CO+H2$
۳۴۸	$C5H11CHO+O=C5H11CO+OH$	۳۴۹	$C5H11CHO+HO2=C5H11CO+H2O2$
۳۵۰	$C5H11CHO+CH3=C5H11CO+CH4$	۳۵۱	$C5H11CHO+CH3O2=C5H11CO+CH4O2$
۳۵۲	$C5H11CO=C5H11+CO$	۳۵۳	$C5H11=C2H5+C3H6$
۳۵۴	$C7H15-1=C2H4+C5H11$	۳۵۵	$C7H15-2=CH3+C6H12$
۳۵۶	$C6H12=C3H7+C3H5$	۳۵۷	$C7H15-2=C4H9+C3H6$
۳۵۸	$C7H15-1=C7H15-2$	۳۵۹	$C4H9=C3H6+CH3$
۳۶۰	$C4H9=C2H5+C2H4$	۳۶۱	$C3H7=C2H4+CH3$
۳۶۲	$C3H7=C3H6+H$	۳۶۳	$C3H7+O2=C3H6+HO2$
۳۶۴	$C3H6=C2H3+CH3$	۳۶۵	$C3H6+H=C3H5+H2$
۳۶۶	$C3H6+CH3=C3H5+CH4$	۳۶۷	$C3H6+O2=C3H5+HO2$
۳۶۸	$C3H6+OH=CH3CHO+CH3$	۳۶۹	$C3H5=C3H4+H$
۳۷۰	$C3H5+H=C3H4+H2$	۳۷۱	$C3H5+O2=C3H4+HO2$
۳۷۲	$C3H4+OH=C2H3+CH2O$	۳۷۳	$C3H4+OH=C2H4+HCO$
۳۷۴	$C3H4+O2=C3H3+HO2$	۳۷۵	$C2H4+HO2=CH3CHO+OH$
۳۷۶	$C2H4+CH3O=CH3CHO+CH3$	۳۷۷	$C2H4+CH3O2=CH3CHO+CH3O$
۳۷۸	$CH3CHO=CH3+HCO$	۳۷۹	$CH3CO+M=CH3+CO+M$
۳۸۰	$CH3CHO+O2=CH3CO+HO2$	۳۸۱	$CH3CHO+H=CH3CO+H2$
۳۸۲	$CH3CHO+OH=CH3CO+H2O$	۳۸۳	$CH3CHO+O=CH3CO+OH$

۳۸۴	$\text{CH}_3\text{CHO}+\text{CH}_3=\text{CH}_3\text{CO}+\text{CH}_4$	۳۸۵	$\text{CH}_3\text{CHO}+\text{CH}_2=\text{CH}_3\text{CO}+\text{CH}_3$
۳۸۶	$\text{CH}_3\text{CHO}+\text{HO}_2=\text{CH}_3\text{CO}+\text{H}_2\text{O}_2$	۳۸۷	$\text{CH}_3\text{CHO}+\text{CH}_3\text{O}_2=\text{CH}_3\text{CO}+\text{CH}_4\text{O}_2$
۳۸۸	$\text{CH}_3\text{CO}+\text{O}=\text{CH}_3+\text{CO}_2$	۳۸۹	$\text{CH}_3\text{CO}+\text{H}=\text{CH}_3+\text{HCO}$
۳۹۰	$\text{CH}_3\text{CO}+\text{OH}=\text{CH}_3+\text{CO}+\text{OH}$	۳۹۱	$\text{CH}_3\text{CO}+\text{HO}_2=\text{CH}_3+\text{CO}_2+\text{OH}$
۳۹۲	$\text{CH}_3\text{CO}+\text{CH}_3=\text{C}_2\text{H}_6+\text{CO}$	۳۹۳	$\text{CH}_3\text{O}+\text{CO}=\text{CH}_3+\text{CO}_2$
۳۹۴	$\text{CH}_3+\text{O}_2=\text{CH}_3\text{O}_2$	۳۹۵	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{HO}_2=\text{CH}_4\text{O}_2+\text{O}_2$
۳۹۶	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{CH}_4=\text{CH}_4\text{O}_2+\text{CH}_3$	۳۹۷	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{CH}_3=\text{CH}_3\text{O}+\text{CH}_3\text{O}$
۳۹۸	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{O}=\text{CH}_3\text{O}+\text{O}_2$	۳۹۹	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{H}=\text{CH}_3\text{O}+\text{OH}$
۴۰۰	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{CH}_2\text{O}=\text{CH}_4\text{O}_2+\text{HCO}$	۴۰۱	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{C}_2\text{H}_6=\text{CH}_4\text{O}_2+\text{C}_2\text{H}_5$
۴۰۲	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{CH}_3\text{O}_2=\text{CH}_3\text{O}+\text{CH}_3\text{O}+\text{O}_2$	۴۰۳	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{H}_2\text{O}_2=\text{CH}_4\text{O}_2+\text{HO}_2$
۴۰۴	$\text{CH}_4\text{O}_2=\text{CH}_3\text{O}+\text{OH}$	۴۰۵	$\text{CH}_3\text{O}_2+\text{C}_2\text{H}_4=\text{C}_2\text{H}_3+\text{CH}_4\text{O}_2$
۴۰۶	$\text{CH}_4\text{O}_2+\text{OH}=\text{CH}_3\text{O}_2+\text{H}_2\text{O}$	۴۰۷	$\text{CH}_4\text{O}_2+\text{O}=\text{CH}_3\text{O}_2+\text{OH}$
۴۰۸	$\text{H}_2+\text{O}_2=\text{OH}+\text{OH}$	۴۰۹	$\text{O}+\text{OH}+\text{M}=\text{HO}_2+\text{M}$
۴۱۰	$\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$	۴۱۱	$\text{H}_2+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}+\text{OH}$
۴۱۲	$\text{HCO}+\text{HCO}=\text{CH}_2\text{O}+\text{CO}$	۴۱۳	$\text{HCO}+\text{HO}_2=\text{CO}_2+\text{OH}+\text{H}$
۴۱۴	$\text{CH}_3+\text{H}=\text{CH}_4$	۴۱۵	$\text{CH}_3+\text{CH}_3\text{O}=\text{CH}_4+\text{CH}_2\text{O}$
۴۱۶	$\text{CH}_2+\text{O}_2=\text{HCO}+\text{OH}$	۴۱۷	$\text{CH}_2+\text{O}_2=\text{CO}_2+\text{H}_2$
۴۱۸	$\text{CH}_2+\text{O}_2=\text{CO}+\text{H}_2\text{O}$	۴۱۹	$\text{CH}_2+\text{CO}_2=\text{CH}_2\text{O}+\text{CO}$
۴۲۰	$\text{CH}_3+\text{HCO}=\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_2$	۴۲۱	$\text{CH}_3+\text{CH}_3=\text{C}_2\text{H}_4+\text{H}_2$
۴۲۲	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{O}=\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_2$	۴۲۳	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{O}=\text{C}_2\text{H}_3+\text{OH}$
۴۲۴	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{OH}=\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_3$	۴۲۵	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{HO}_2=\text{C}_2\text{H}_3+\text{H}_2\text{O}_2$
۴۲۶	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{H}=\text{C}_2\text{H}_5$	۴۲۷	$\text{C}_2\text{H}_6+\text{O}_2=\text{C}_2\text{H}_5+\text{HO}_2$
۴۲۸	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{O}_2=\text{C}_2\text{H}_3+\text{HO}_2$	۴۲۹	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{C}_2\text{H}_4=\text{C}_2\text{H}_5+\text{C}_2\text{H}_3$
۴۳۰	$\text{C}_2\text{H}_5+\text{HO}_2=\text{C}_2\text{H}_4+\text{H}_2\text{O}_2$	۴۳۱	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{O}_2=\text{HCO}+\text{HCO}$
۴۳۲	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{CH}_2=\text{C}_2\text{H}_2+\text{CH}_3$	۴۳۳	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{HCO}=\text{C}_2\text{H}_4+\text{CO}$
۴۳۴	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{C}_2\text{H}_3=\text{C}_2\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}_4$	۴۳۵	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{O}=\text{C}_2\text{H}_2+\text{OH}$
۴۳۶	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{CH}_2=\text{C}_3\text{H}_3+\text{H}$	۴۳۷	$\text{C}_3\text{H}_3+\text{OH}=\text{C}_3\text{H}_2+\text{H}_2\text{O}$
۴۳۸	$\text{C}_3\text{H}_3+\text{O}=\text{CH}_2\text{O}+\text{C}_2\text{H}$	۴۳۹	$\text{C}_2\text{H}_3=\text{C}_2\text{H}_2+\text{H}$
۴۴۰	$\text{C}_2\text{H}_2=\text{C}_2\text{H}+\text{H}$	۴۴۱	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}=\text{C}_4\text{H}_2+\text{H}$
۴۴۲	$\text{C}_3\text{H}_4+\text{O}=\text{C}_2\text{H}_3+\text{HCO}$	۴۴۳	$\text{C}_3\text{H}_4+\text{O}=\text{C}_2\text{H}_4+\text{CO}$
۴۴۴	$\text{C}_3\text{H}_4+\text{O}=\text{HCCO}+\text{CH}_3$	۴۴۵	$\text{C}_4\text{H}+\text{H}_2=\text{H}+\text{C}_4\text{H}_2$
۴۴۶	$\text{C}_4\text{H}_2+\text{OH}=\text{C}_4\text{H}+\text{H}_2\text{O}$	۴۴۷	$\text{C}_4\text{H}_2+\text{O}=\text{C}_3\text{H}_2+\text{CO}$
۴۴۸	$\text{C}_3\text{H}_2+\text{O}=\text{C}_2\text{H}_2+\text{CO}$	۴۴۹	$\text{C}_3\text{H}_2+\text{OH}=\text{HCO}+\text{C}_2\text{H}_2$
۴۵۰	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}=\text{C}_4\text{H}_3$	۴۵۱	$\text{C}_3\text{H}_2+\text{CH}_2=\text{C}_4\text{H}_3+\text{H}$
۴۵۲	$\text{C}_4\text{H}_2+\text{H}=\text{C}_4\text{H}_3$	۴۵۳	$\text{C}_4\text{H}_3+\text{H}=\text{C}_2\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}_2$
۴۵۴	$\text{C}_4\text{H}_3+\text{H}=\text{C}_4\text{H}_2+\text{H}_2$	۴۵۵	$\text{C}_4\text{H}_3+\text{OH}=\text{C}_4\text{H}_2+\text{H}_2\text{O}$
۴۵۶	$\text{C}_2\text{H}_2+\text{HCCO}=\text{C}_3\text{H}_3+\text{CO}$	۴۵۷	$\text{C}_3\text{H}_2+\text{O}_2=\text{HCCO}+\text{CO}+\text{H}$
۴۵۸	$\text{C}_3\text{H}_3+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{CO}+\text{HCO}$	۴۵۹	$\text{C}_4\text{H}_3+\text{O}_2=\text{HCCO}+\text{CH}_2\text{CO}$
۴۶۰	$\text{C}_3\text{H}_8+\text{C}_2\text{H}_5=\text{C}_3\text{H}_7+\text{C}_2\text{H}_6$	۴۶۱	$\text{C}_3\text{H}_8+\text{C}_2\text{H}_3=\text{C}_3\text{H}_7+\text{C}_2\text{H}_4$
۴۶۲	$\text{C}_3\text{H}_7+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{CH}_4+\text{C}_3\text{H}_6$	۴۶۳	$\text{C}_3\text{H}_6+\text{C}_2\text{H}_5=\text{C}_3\text{H}_5+\text{C}_2\text{H}_6$
۴۶۴	$\text{C}_3\text{H}_6+\text{O}=\text{CH}_3+\text{CH}_3\text{CO}$		

مراجع

1. Thring, R. H., "Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines," SAE paper 892068, 1989.
2. Fiveland, S. B., and Assanis, D. N., "A Four-Stroke Homogeneous Charge Compression Ignition Engine Simulation for Combustion and Performance Studies," SAE 2000-01-0332, 2000.
3. Noda, T., and Foster, D. E., "A Numerical Study to Control Combustion Duration of Hydrogen-Fueled HCCI by Using Multi-Zone Chemical Kinetics Simulation," SAE Paper 2001-01-0250, 2001.
4. Onishi, S., Jo, S. H., Shoda, K., Jo, P. D., and Kato, S., "Active Thermo-Atmosphere Combustion (ATAC)- A New Combustion Process for Internal Combustion Engines," SAE 7 501, 1979.
5. Najt, P. M., and Foster, D. E., "Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion," SAE paper 830264, 1983.
6. Atkins, M. J., and Koch, C. R., "The Effect of Fuel Octane and Diluent on Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion," Proc. IMechE. Part D: J. Automobile Engineering, 219, pp. 665-675, 2005.
7. Olsson, J. O., Tunestal, P., and Johansson, B., "Boosting for High Load HCCI," SAE Paper, 2004-01-0940, 2004.
8. Strandh, P., Bengtsson, J., Johansson, R., Tunestal, P., and Johansson, B., "Cycle-to-Cycle Control of a Dual-Fuel HCCI Engine," SAE Paper, 2004-01-0941, 2004.
9. Tominaga, R., Morimoto, S., Kawabata, Y., Matsuo, S., and Amano, T., "Effects of Heterogeneous EGR on the Natural Gas-Fueled HCCI Engine using Experiments, CFD and Detailed Kinetics," SAE Paper, 2004-01-0945, 2004.
10. Fiveland, S. B., and Assanis, D. N., "Development of a Two-Zone HCCI Combustion Model counting for Boundary Layer Effects," SAE Paper 2001-01-1028, 2001.
11. Komninos, N. P., Hountalas, D. T., and Kouremenos, D. A., "Description of in-Cylinder Combustion Processes in HCCI Engines using a Multi-Zone Model," SAE paper 2005-01-0171, 2005.
12. Kongsereparp, P., and Checkel, M. D., "Novel Method of Setting Initial Conditions for Multi-Zone HCCI Combustion Modeling," SAE07PFL-640, 2007.
13. Aceves, S. M., Flowers, D. L., Westbrook, C. K., Smith, J. R., Pitz, W., Dibble, R., Christensen, M., and Johansson, B., "A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emissions," SAE paper 2000-01-0327, 2000.
14. Amano, T., Morimoto, S. S., and Kawabata, Y., "Modeling of the Effect of Air/Fuel Ratio and Temperature Distribution on HCCI Engines," SAE Paper 2001-01-1024, 2001.
15. Easley, W. L., Agarwal, A., and Lavoie, G. A., "Modeling of HCCI Combustion and Emissions Using Detailed Chemistry," SAE paper 2001-01-1029, 2001.
16. Harris, S. D., Elliott, L., Ingham, D. B., Mera, N. S., Pourkashanian, M., and Wilson, C. W., "The Optimisation of Reaction Rate Parameters for Chemical Kinetic Modelling of Combustion using Genetic Algorithms," Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., 190, pp. 1065-1090, 2000.
17. Kongsereparp, P., and Checkel, M. D., "Study of Reformer Gas Effects on n-Heptane HCCI Combustion using a Chemical Kinetic Mechanism Optimized by Genetic Algorithm," SAE Paper 2008-01-0039, 2008.
18. Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner, W. C., Lissianski, V. V., and Qin, Z., GRI-mech3.0 data, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 2006.
19. Golovitchev, V. I., N-Heptane Mechanism, <http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/MECH.html>, 2006.
20. Baumgarten, C., Mixture Formation in Internal Combustion Engines, Springer-Verlag, 2005.
21. Heywood, J. B., Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw Hill, New York, 1988.
22. Chang, J., Guralp, O., Filipi, Z., and Assanis, D. N., "New Heat Transfer Correlation for an HCCI Engine Derived from Measurements of Instantaneous Surface Heat Flux," SAE Paper 2004-01-2996, 2004.
23. Stone, R., Introduction to Internal Combustion Engines, Warrendale PA, USA: SAE International, 1999.
24. Yang, J., and Martin, J. K., "Approximate Solution-One-Dimensional Energy Equation for Transient, Compressible, Low Mach Number Turbulent Boundary Layer Flows," Journal of Heat Transfer, 111, pp. 619-624, 1989.
25. Huang, Z., Shiga, S., Ueda, T., Jingu, N., Nakamura, H., Ishima, T., Obokata, T., Tsue, M., and Kono, M., "Feasibility of CNG DI Stratified Combustion Using a Spark-Ignited Rapid Compression Machine," The Fifth International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA 2001), Nagoya, 2001.
26. Goldberg, D. E., Genetic Algorithms in Search, Optimization and machine Learning, Addison-Wesley Longman, 1989.

English Abstract

A Comparison of two Different Configurations of Multi-Zone Combustion Model for Natural Gas/n-Heptane Blend in HCCI Combustion Engines

A. Rahimi Mamaghani¹, R. Khoshbakhti Saray² and E. Fatehifar¹

1- Department of Chemical Engineering, Sahand University of Technology, Tabriz

2- Department of Mechanical Engineering, Sahand University of Technology, Tabriz

In this work, a detailed combined chemical kinetics mechanism (76 chemical species, 464 reactions) for a mixture of natural gas and n-heptane with arbitrary mass fractions of natural gas between 36 and 85 percent was developed from the combination of the detailed reaction schemes for natural gas and n-heptane fuels. Then, essential reactions were determined through performing a sensitivity analysis on the combined mechanism. In addition, genetic algorithm was applied to optimize the Arrhenius rate coefficients of the specified reactions by means of sensitivity analysis. Finally, accuracy of the presented mechanism was investigated through two different zone configurations (6 zones and 11 ones) of a multi-zone combustion model as well as available laboratory results. Also, the results of the two considered zone configurations from the multi-zone combustion model were compared, whereby it was found that the two zone configurations considered could properly predict combustion, performance parameters (i.e. start of combustion), burn duration, indicated mean effective pressure, indicated thermal efficiency as well as important HCCI engine emissions (i.e. unburned HC and CO emissions) in good accord with the experimental data. Also, it was discovered that the results of the 6 zone combustion model were closer to the results of the 11 zone combustion model. But the required computational time for the 11 zone combustion model was approximately twice that of the 6 zone combustion model.

Keywords: HCCI Combustion, Sensitivity Analysis, Chemical Kinetics Mechanism, Multi-Zone Combustion Model, Genetic Algorithm.