سومین کنفرانس سوخت و احتراق ایران
تهران - دانشگاه صنعتی امیرکبیر - اسفند ماه ۱۳۸۸
انجمن احتراق ایران
FCCI2010-1147
دانشگاه صنعتی امیرکبیر
دانشکده مهندسی هوافضا

شبیه سازی انتگرالگیری زمانی از معادلات حاکم بر سینتیک شیمیایی در یک مکانیزم کاهش یافته احتراق متان با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی

پیام سینایی[۱]، ناصر سراج مهدیزاده[۲]
دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی هوافضا (قطب علمی مهندسی هوافضای محاسباتی)، تهران، خیابان حافظ
نویسنده مخاطب: پیام سینایی sinaei@aut.ac.ir

چکیده

در تحقیق حاضر، از شبکه عصبی مصنوعی برای شبیه سازی انتگرالگیری از معادلات دیفرانسلی حاکم بر سینتیک شیمیایی غلظت گونه های شرکت کننده در مکانیزم کاهش یافته جونز برای احتراق متان- هوا استفاده شده است و مزایای این تکنیک نسبت به سایر روش های متداول در کد های شبیه ساز مکانیزمهای احتراقی مورد بحث قرار گرفته است. شبکه عصبی مورد استفاده در این تحقیق از نوع پیشخور چند لایه ای بوده و بوسیله الگوریتم خطای پس انتشار اصلاح شده آموزش دیده است. همچنین گام زمانی انتگرالگیری نیز به عنوان یکی از ورودی های شبکه عصبی در نظر گرفته شده است. مکانیزم شیمیایی چهار مرحله ای مورد استفاده دارای شش گونه شیمیایی فعال می باشد. در انتها مقایسه بین مدلسازی شبکه عصبی و حل معادلات با انتگرالگیری مستقیم و روش جستجوی مقادیر ارائه گردیده و مزایای روش شبکه های عصبی به لحاظ صرفه جویی در ترم های حافظه و زمان در مقایسه با این دو روش مورد بحث واقع شده است.

واژه‌های کلیدی: احتراق-شبکه عصبی مصنوعی-مکانیزم کاهش یافته-متان.

۱- مقدمه

به لحاظ تئوری برای مدلسازی یک سیستم لازم است که رابطه ریاضیاتی میان الگوهای ورودی- خروجی مشخص باشد. بدیهی است یافتن چنین مدلهای ریاضی بسیار مشکل و تقریباً غیر ممکن می باشد. از سوی دیگر تکنیکهای هوش مصنوعی و تواناییهای محاسبات نرم در مدلسازی و تحلیل پدیده های پیچیده توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. برای مدلسازی، پیش بینی و کنترل فرآیندهای احتراقی به طورمعمول کدهای تحلیلی کامپیوتری مورد استفاده قرار می گیرند. الگوریتمهای مورد استفاده در این کدها معمولاً پیچیده و شامل حل معادلات دیفرانسیلی ترکیبی می باشند. این برنامه های کامپیوتری قدرت محاسباتی بسیار بالایی از کامپیوتر طلب می کنند. از طرفی به جای این قوانین پیچیده و محاسبات ریاضیاتی، سیستمهای هوش مصنوعی توانایی فراگیری روند اطلاعات کلیدی در یک دامنه اطلاعاتی چند بعدی را دارا میباشند. همچنین سیستمهای مختلف هوش مصنوعی، مثلاً شبکه های عصبی مصنوعی، در برابر اغتشاشات ایمن هستند و در مقابل خطاها انعطاف پذیری خوبی از خود نشان می دهند.

---

[۱] دانشجوی دکتری، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی هوافضا
[۲] دانشیار، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی هوافضا

معادلات دیفرانسیلی حاکم بر تغییرات غلظت گونه ها در جریانهای واکنشی توابعی به شدت پیچیده و غیر خطی از نرخ واکنشها و غلظتها می باشند که خود هزینه بر بودن روشهای کلاسیک موجود مانند روش انتگرالگیری مستقیم و روش جدول جستجوی مقادیر [۱] را به لحاظ حافظه و زمان حل نشان می دهد. به طور کلی مکانیزمهای شیمیایی کاهش یافته به منظور اجتناب از پیچیدگیهای مکانیزمهای کامل در مسائل احتراقی مطرح میشوند. به عنوان نمونه در مکانیزم کامل احتراق متان ۳۰ گونه و در مکانیزم اسکلتی آن ۱۵ گونه فعال شیمیایی وجود دارد و از آنجا که زمان حل و میزان حافظه مصرفی به طور صعودی با افزایش تعداد گونه ها رشد می کند، دلیل لزوم استفاده از مکانیزمهای کاهش یافته مشخص می گردد.

از سوی دیگر شبکه های عصبی مصنوعی به عنوان یک پردازشگر دینامیکی موازی روش قدرتمند و سریعی در مدلسازی سیستمهای دینامیکی پیچیده ارائه می دهند که یک سیستم واکنشی شیمیایی نمونه خوبی از چنین سیستمهای دینامیکی می باشد. مدلسازی بوسیله شبکه عصبی مصنوعی، آموزش دادن سیستم محاسباتی برای درک قوانین حاکم بر فیزیک مسئله و تولید یک مدل می باشد. در واقع هدف مدل، تولید یک نسخه تخمینی از سیستم واقعی می باشد که خصوصیات اصلی سیستم در آن حفظ شده باشد. در این تحقیق پس از معرفی مکانیزم مورد استفاده و بیان معادلات دیفرانسیلی حاکم، فضای ترموشیمیایی سیستم جهت آموزش شبکه عصبی مشخص می شود. دامنه فضای متغیرهای ورودی معرفی می گردد و پس از استحصال شبکه بهینه جواب های حاصل ارائه شده و در انتها با دو روش انتگرالگیری مستقیم و جستجوی مقادیر مورد مقایسه قرارمیگیرند.

۲- مکانیزم شیمیایی کاهش یافته و معادلات حاکم

مکانیزم شیمیایی مورد استفاده در تحقیق حاضر، مکانیزم کاهش یافته چهار واکنشی جونز (Jones) و لینشتت (Lindstedt) میباشد [۲]. جونز و لینشتت نشان دادند که این مکانیزم برای هر دو حالت احتراق پیش مخلوط و پس مخلوط به طور عملی قابل استفاده میباشد و خصوصیات اساسی شعله حاصل از احتراق متان- هوا را به لحاظ ساختاری و همچنین حدود شعله وری حفظ میکند. همچنین پارامترهایی مانند سرعت سوختن، دما و توزیع گونه ها در شعله به شکل مطلوبی با اندازه گیریها تطابق دارد. به طور کلی مبنای روند کاهش تعداد واکنشها برای استحصال یک مکانیزم کاهش یافته در مورد سوختهای هیدروکربنی و بطور خاص متان، کاهش بر مبنای زنجیره C_1 برای اکسیداسیون می باشد که با اندازه گیری مقدار گونه های میانی در مخلوط، تعدادی از گونه ها در حالت یکنواخت فرض میشوند و همچنین با در نظر گرفتن سرعت انجام واکنشها، برخی از آنها در حالت تعادل جزئی در نظر گرفته می شوند. مکانیزم کاهش یافته جونز و لینشتت با در نظر گرفتن ضرایب استوکیومتریک با شش گونه فعال CH_4، O_2، H_2O، H_2، CO و CO_2 به صورت زیر ارائه میگردد:

$$
\begin{aligned}
&R1: \quad CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2 \\
&R2: \quad CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2 \\
&R3: \quad H_2 + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow H_2O \\
&R4: \quad CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2
\end{aligned}
\qquad (۱)
$$

با در نظر گرفتن این سیستم واکنشی، معادلات دیفرانسیلی حاکم بر تغییرات گونه ها به صورت زیر میباشد:

$$\frac{d[CH_4]}{dt} = -AT^d[CH_4]^a[H_2O]^b \exp(-\frac{E}{RT})$$
$$\frac{d[O_2]}{dt} = -AT^d[CH_4]^a[O_2]^b \exp(-\frac{E}{RT})$$
$$\frac{d[H_2]}{dt} = -AT^d[H_2]^a[O_2]^b \exp(-\frac{E}{RT}) \quad (۲)$$
$$\frac{d[CO]}{dt} = -AT^d[CO]^a[H_2O]^b \exp(-\frac{E}{RT})$$

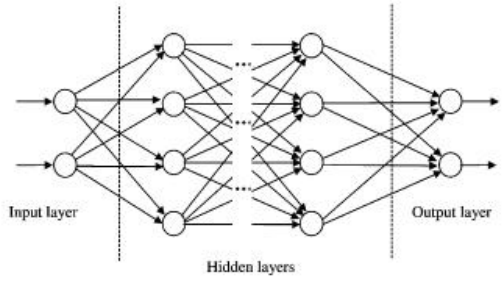
که در آن غلظت مولی گونه ها بر حسب mol/cm^3 میباشد. ثابت های نرخ واکنش برای هر یک از واکنشهای بالا در جدول (۱) ارائه شده است. این مقادیر، روابطی پیچیده و غیر خطی از غلظت گونه ها و نرخ واکنشهای مربوطه در مکانیزم اسکلتی سوختن متان می باشند [۳].

جدول ۱ – مقادیر عددی ثابتهای نرخ واکنش در مکانیزم جونز

Reaction	A	d	A	b	E (cal/mol)
R1	0.30e09	0	1.00	1.00	30’000
R2	0.44e12	0	0.50	1.25	30’000
R3	0.68e16	-1	0.25	1.50	40’000
R4	0.275e10	0	1.00	1.00	20’000

۳- ساختار شبکه عصبی و الگوریتم آموزشی

شکل (۱) شمای کلی یک شبکه عصبی پیشخور چند لایه [۴] را نشان می دهد که شامل لایه ورودی، لایه های پنهان و لایه خروجی می باشد. شبکه عصبی، یک سیستم پردازشگر موازی می باشد که از تعدادی نرون های (Neuron) به هم مرتبط تشکیل شده است.

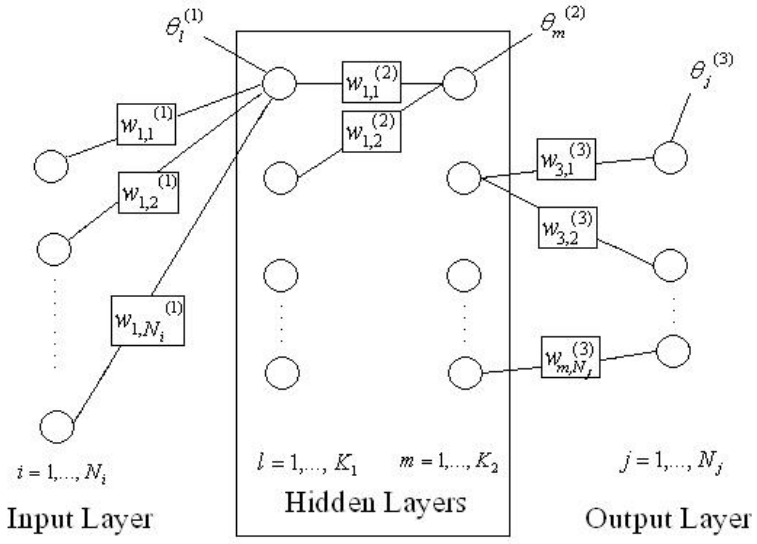


شکل ۱- شمای کلی یک شبکه عصبی پیشخور چند لایه

در شبکه های عصبی پیشخور چند لایه، ورودی در امتداد شبکه انتشار می یابد و خروجی هر نرون با رابطه زیر محاسبه میگردد:

$$y^n{}_i = f(\sum_{j=1}^{K_{n-1}} w_{ij}{}^n y_j{}^{n-1} + \theta_i{}^n)_{i=1,\ldots,K_n \& n=1,\ldots,N} \quad (۳)$$

که y_i^n خروجی نرون i ام از لایه n ام می باشد. w_{ij}^n ضریب وزنی سیناپسی ارتباط نرون j ام از لایه (n-1) ام به نرون i ام از لایه n ام می باشد. θ_i^n یک مقدار بایاس برای نرون i ام از لایه n ام می باشد. تابع غیر خطی $f(.)$ نیز تابع محرک نامیده می شود و باید در تمام نقاط پیوسته بوده و دارای مشتق اول مثبت باشد [۳]. در این تحقیق تابع محرک $f(.)$ در تمامی لایه ها از نوع تانژانت هیپربولیک اختیار شده است. شکل (۲) نشان دهنده این جزئیات در شبکه عصبی می باشد.



شکل ۲- ضرایب وزنی و بایاس مرتبط با نرونها

ساختار شبکه عصبی اعمال شده در این تحقیق در شکل (۳) نشان داده شده است. این شبکه دارای ۵ ورودی و ۴ خروجی میباشد. ورودی های شبکه شامل کسر مخلوط f، مقیاس زمان انتگرالگیری Δt و سه نسبت مولی برای متان، اکسیژن و مونوکسید کربن میباشد. خروجیها نیز به ترتیب تغییرات نسبت مولی چهار گونه واکنشی متان، اکسیژن، آب و مونوکسید کربن را در بازه زمانی مورد نظر نشان می دهد.

الگوریتم آموزشی مورد استفاده، الگوریتم خطای پس انتشار اصلاح شده میباشد که به طور موفقیت آمیزی برای این مدلسازی مورد استفاده قرار گرفته است. الگوریتم آموزشی خطای پس انتشار، یک روش کاهش گرادیانی برای تنظیم ضرایب وزنی شبکه میباشد. این الگوریتم و الگوریتمهای بهینه سازی شده حاصل از این الگوریتم، مشهورترین روش آموزشی برای شبکه های عصبی می باشد. این روش بر مبنای یافتن نقطه کمینه برای یک تابع هدف که در اینجا تابع خطا نامیده می شود [۴، ۵] بنا گردیده است. حرکت به سمت نقطه کمینه در خلال روند آموزش دیدن شبکه با اصلاح ضرایب وزنی انجام می گیرد. تابع خطا، E، به صورت زیر تعریف می گردد:

$$E = \sum_{m}^{q}\sum_{i}^{p}(y_{i,m}{}^{tar} - y_{i,m}{}^{ANN})^2 \quad (۴)$$

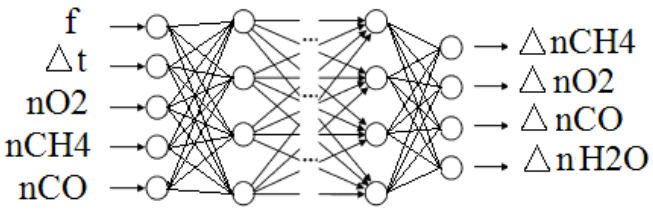
p و q به ترتیب، تعداد الگوها و خروجیها هستند و توابع محرک کلیه لایه ها از نوع تانژانت هیپربولیک هستند. y^{tar} و y^{ANN} به ترتیب نشان دهنده خروجی مطلوب و خروجی شبکه عصبی می باشند. الگوریتم خطای پس انتشار ضرایب وزنی را مطابق رابطه زیر اصلاح می کند:

$$w_{ij}{}^{n}(t+1) = w_{ij}{}^{n}(t) + \eta\delta_j\hat{y}_i + \alpha[w_{ij}{}^{n}(t) - w_{ij}{}^{n}(t-1)] \quad (۵)$$

به طوریکه t شماره تکرار است و η و α به ترتیب نرخ آموزش (Learning rate) و ضریب ممنتم (Momentum coefficient) نامیده می شوند [۵]. انتخاب صحیح این دو مقدار نقش مهمی در همگرایی و همچنین سرعت همگرایی شبکه دارا می باشد. بطوریکه انتخاب صحیح این دو مقدار می تواند از قرارگرفتن شبکه در یک نقطه کمینه موضعی غیر واقعی جلوگیری نماید. لازم به ذکر است در پروسه آموزش شبکه های عصبی یکی از مشکلات، عدم ارائه خروجی مناسب از سوی شبکه برای داده های دیده نشده می باشد (Overfitting) [۶]. برای اجتناب از این مشکل کارایی شبکه در حین انجام فرآیند آموزش با نمونه های داده های دیگری غیر از داده های دیده شده (Training set) در آموزش محاسبه می شود. به این الگوها، الگوهای آزمایشی (Test set) اطلاق می شود [۷]. برای یافتن شبکه عصبی بهینه با کمترین مقدار خطا، چهار شبکه مختلف مورد آزمون قرار گرفت و میزان خطاهای ارائه شده از هر یک مورد بررسی واقع شد. این چهار شبکه به ترتیب سبکه هایی با یک لایه پنهان پنج نرونی، یک لایه پنهان هفت نرونی، یک لایه پنهان نه نرونی و دو لایه پنهان هشت نرونی بودند. زمان آموزش یک شبکه عصبی با دو لایه پنهان به مراتب و به شکل قابل توجهی از یک شبکه با یک لایه پنهان بیشتر است ولی میزان خطای آن نیز بطور قابل توجهی کوچکتر میباشد. در جدول (۲) خطاهای الگوهای آموزشی و آزمایشی به صورت تابعی از تعداد نرونهای پنهان نمایش داده شده است. بنابراین شبکه عصبی با دو لایه پنهان هشت نرونی به عنوان شبکه عصبی بهینه با خطای قابل قبول مورد استفاده واقع گردیده است.

جدول ۲- خطای الگوی آموزشی و خطای الگوی آزمایشی به صورت تابعی از تعداد نرونهای پنهان

	Hidden Neurons			
	5	7	9	2×8
Training Set Error	0.072	0.051	0.037	0.013
Test Set Error	0.108	0.077	0.059	0.032



شکل ۳- ساختار شبکه عصبی مصنوعی اعمال شده

۴- حالت ترموشیمیایی سیستم و استحصال الگوهای آموزشی

برای تولید نمونه های ورودی-خروجی آموزشی شبکه عصبی از دامنه های مجاز [۸] از ۳ اسکالر برای مشخص کردن سیستم استفاده شده است. برای مقادیر مشخص کننده حالت ترموشیمیایی سیستم که به صورت سه تایی مرتب (f, n_{CH_4}, n_{CO}) نمایش داده میشود در فاصله $0 < f < 0.30$ نمونه انتخاب گردیده است زیرا فاصله $0.30 < f < 1.00$ عملاً از حدود اشتعال پذیری دور خواهد بود. همچنین در مجاورت نقطه استوکیومتریک احتراق متان - هوا $(f_{st} = 0.0552)$ به علت حساسیت بیشتر و شدت غیر خطی بودن خروجی ها فاصله های انتخابی کوچکتر اختیار می شوند. بنابراین با در نظر گرفتن دامنه ذکر شده برای کسر مخلوط $(0 < f < 0.30)$ و دامنه های مجاز برای دو اسکالر دیگر از یک فضای (۹،۱۰، ۲۵) برای نمونه های آموزشی استفاده شده است. روش تولید الگوهای آموزشی به اینصورت می باشد که در مکانیزم شیمیایی مورد استفاده، تعداد اسکالرها برابر ۹ می باشد که شامل ۶ گونه فعال شیمیایی، دما، دانسیته و فشار می باشد. برای مشخص کردن حالت ترموشیمیایی سیستم با استفاده از مفهوم کسر مخلوط، f، که بیانگر نسبت جرمی نرمالیزه شده جریان سوخت میباشد، میتوان تعداد اسکالرهای مشخص کننده حالت سیستم را به ۳ کاهش داد. به اینصورت که با در دست داشتن کسر مخلوط، سه رابطه برای بقای جرم اجزای فعال و یک رابطه برای انتالپی مخلوط حاصل می گردد. همچنین با در نظر گرفتن فرض فشار ثابت برای محفظه و رابطه گاز ایده آل دو رابطه دیگر حاصل می شود. بنابراین با ۶ رابطه حاصل شده فقط به ۳ اسکالر دیگر برای مشخص کردن حالت ترموشیمیایی سیستم نیاز میباشد. این ۳ اسکالر به صورت (f, n_{CH_4}, n_{CO}) اختیار می شوند که در آن n_i نسبت مولی گونه i در واحد جرم مخلوط می باشد. برای تولید الگوهای آموزشی بازه $0 < f < 0.3$ که حدود اشتعال پذیری می باشد به ۲۵ قسمت تقسیم گردیده است که در محدوده کسر مخلوط استوکیومتریک احتراق متان، $f_{st} = 0.0552$، این تقسیم بندی فشرده تر می باشد. فرآیند آموزش در یک فضای (۹، ۱۰، ۲۵) قسمتی از سه تایی مرتب مشخص کننده سیستم حاصل شده است.

۵- مقیاس بندی

مقیاس بندی یکی از بخشهای مهم در به دست آوردن مدل دقیقتر و همگرایی بهتر در شبکه های عصبی است. مقیاس بندی به معنی انتقال ورودیها و خروجیهای شبکه به دامنه کاری بهینه می باشد. این دامنه برای شبکه های عصبی با تابع محرک تانژانت هیپربولیک بازه [+۱, -۱] می باشد. بدین منظور از روابط انتقالی ذیل استفاده شده است:

$$x'_j = \frac{x_j - \bar{x}_j}{\sigma_{x_j}} \qquad (۶)$$

که x_j مقدار ورودی یا خروجی j ام می باشد. $\bar{x}_j$ و σ_{x_j} به ترتیب انحراف معیار متوسط و استاندارد مقادیر ورودی یا خروجی می باشند. تبدیل نهایی برای انتقال داده ها به دامنه کاری مطلوب [۱+ ,۱-] از رابطه زیر به دست می آید:

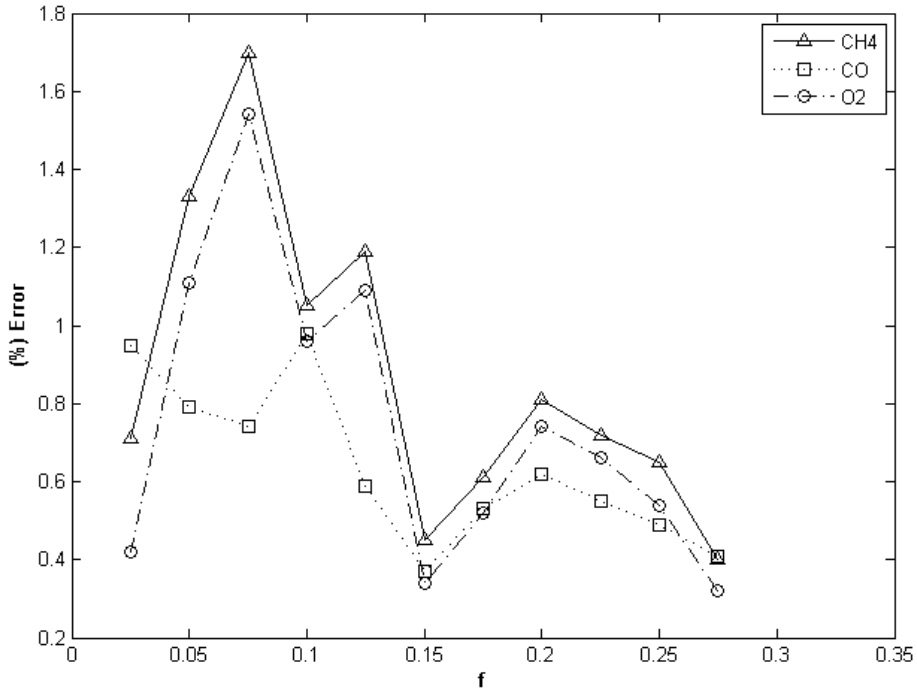
$$x''_j = 2\frac{x'_j - \min\{x'_j\}}{\max\{x'_j\} - \min\{x'_j\}} - 1 \qquad (۷)$$

که مقدار x''_j مقدار مورد نظر در دامنه مطلوب می باشد.

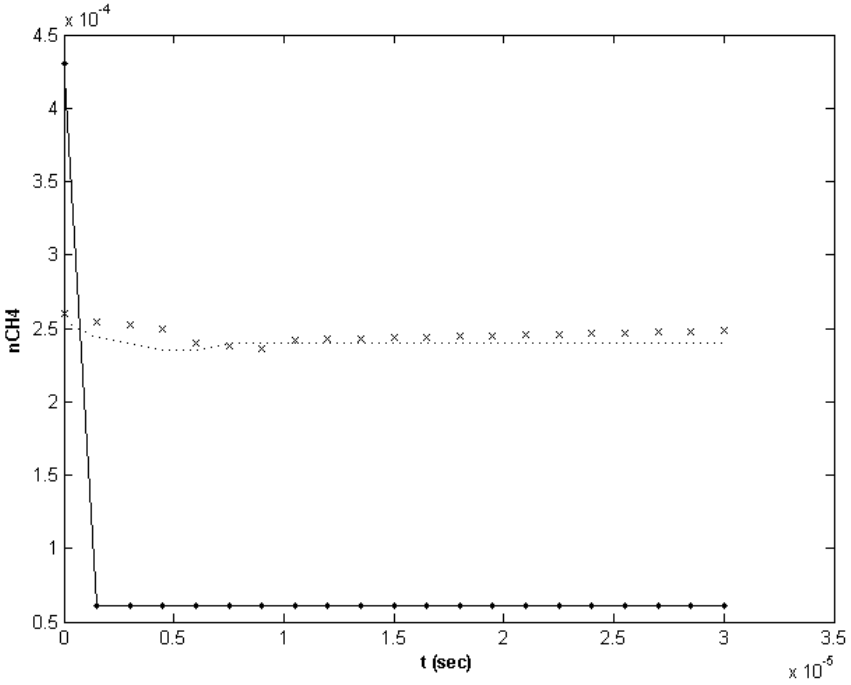
۶- نتایج و بازدهی شبکه عصبی

در شکل (۴) سه گونه متان، اکسیژن و مونوکسید کربن انتخاب شده اند و میزان خطای شبکه برای هر یک به ازای کسر مخلوط نمایش داده شده است. همانطور که ملاحظه میشود، شبکه برای دو گونه متان و اکسیژن بیشترین مقدار خطای خود را در حول و حوش نقطه استوکیومتریک نشان میدهد ولی برای گونه میانی مونوکسید کربن این بیشینه خطا در نقطه دیگری اتفاق می افتد.

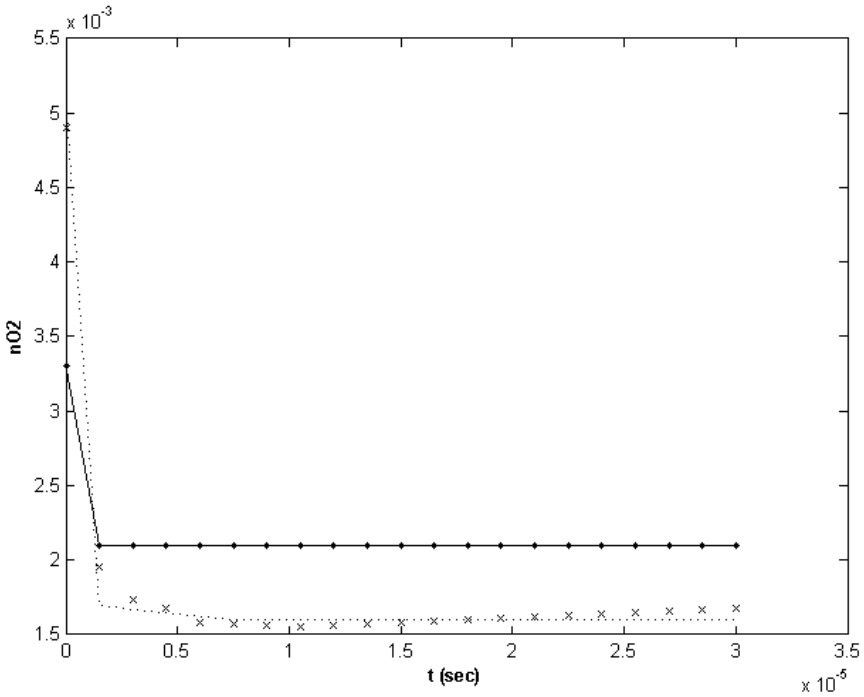
اشکال (۵) و (۶) به ترتیب تغییرات نسبت مولی متان و اکسیژن را که همان انتگرال معادلات دیفرانسیلی حاکم میباشد، نشان میدهند. دو حالت مختلف شعله ناشی از احتراق استوکیومتریک و شعله ناشی از احتراق غنی (Rich) با ازای $(f = 0.055)$ و $(f = 0.230)$ نمایش داده شده است. همچنین حل مستقیم یا انتگرالگیری مستقیم معادلات دیفرانسیلی که معیارهای اصلی برای آموزش شبکه بودند به صورت خط و نقطه چین نشان داده شده اند. همانطور که ملاحظه میگردد شبکه عصبی در احتراق استوکیومتریک دقت کامل را در پیش بینی انتگرالگیری سینتیک سیمیایی داراست و در احتراق غنی نیز با دقت قابل قبولی این انتگرالگیری مدل مینماید.



شکل ۴- خطا بر مبنای الگوی آموزشی برای سه گونه
متان، اکسیژن و مونوکسید کربن بر حسب ۱۱ مقدار مختلف از کسر مخلوط

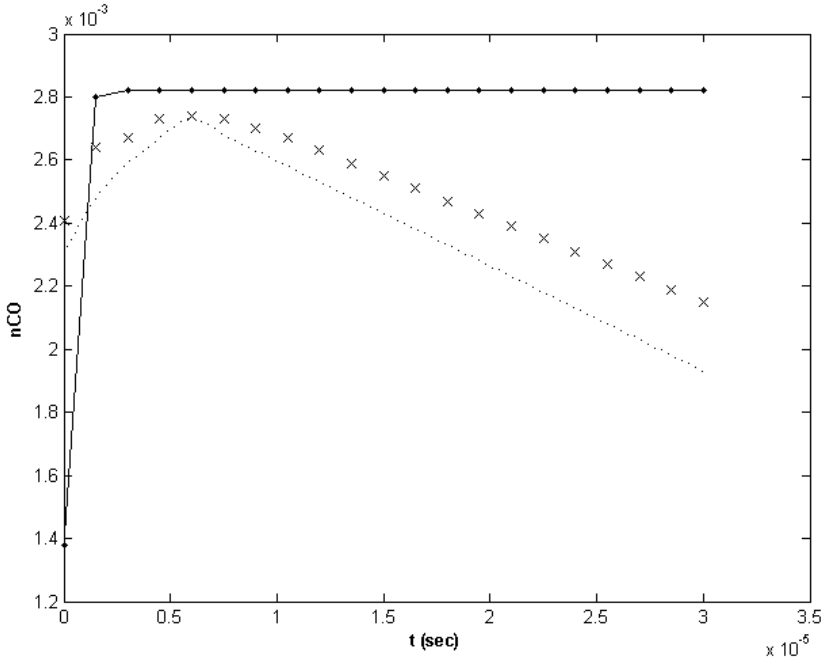


شکل ۵- نمودار پیش بینی شبکه عصبی برای نسبت مولی متان (kmol/kg) بر حسب زمان خط و نقطه چین حل حاصل از انتگرالگیری مستقیم و دایره و ضربدر تخمین های شبکه عصبی هستند خط و دایره برای کسر مخلوط استوکیومتریک ($f = 0.055$) و نقطه چین و ضربدر برای ($f = 0.230$)



شکل۶- نمودار پیش بینی شبکه عصبی برای نسبت مولی اکسیژن (kmol/kg) بر حسب زمان خط و نقطه چین حل حاصل از انتگرالگیری مستقیم و دایره و ضربدر تخمین های شبکه عصبی هستند خط و دایره برای کسر مخلوط استوکیومتریک ($f = 0.055$) و نقطه چین و ضربدر برای ($f = 0.230$)

شکل (۷) تغییرات نسبت مولی گونه میانی مونوکسید کربن را نشان میدهند. دو حالت مختلف شعله ناشی از احتراق استوکیومتریک و شعله ناشی از احتراق ضعیف (Lean) به ترتیب با ازای ($f = 0.055$) و ($f = 0.015$) بهمراه حل مستقیم یا انتگرالگیری مستقیم معادلات دیفرانسیلی نشان داده شده اند. همانطور که ملاحظه میگردد بازهم شبکه عصبی برای حالت استوکیومتریک بسیار عالی عمل میکند ولی برای گونه میانی مونوکسید کربن در مدلسازی انتگرالگیری کمی مقادیر را بیشتر تخمین میزند.



شکل ۷- نمودار پیش بینی شبکه عصبی برای نسبت مولی مونوکسید کربن (kmol/kg) **بر حسب زمان**
خط و نقطه چین حل حاصل از انتگرالگیری مستقیم و دایره و ضربدر تخمین های شبکه عصبی هستند
خط و دایره برای کسر مخلوط استوکیومتریک ($f = 0.055$) و نقطه چین و ضربدر برای ($f = 0.015$)

در مقایسه کارآیی شبکه های عصبی با روشهای موجود انتگرالگیری مستقیم و روش جستجوی مقادیر میتوان گفت که به طور کلی هزینه های محاسباتی به دو گروه مهم تقسیم بندی می شوند. یکی هزینه ها به لحاظ ترمهای حافظه مصرفی و دیگری هزینه های زمانی پروسه حل میباشد. شبکه های عصبی نسبت به دو روش انتگرالگیری مستقیم و همینطور روش جستجوی مقادیر مزایای فوق العاده ای را از خود نشان میدهند.

از آنجاییکه در روش جستجوی مقادیر نیاز به ذخیره حجم عظیمی از اطلاعات و تغییرات آنها در بانک اطلاعاتی میباشد، شبکه های عصبی میتوانند تا ۱۰۰۰ برابر به لحاظ حافظه مصرفی بهتر از روش جستجوی مقادیر عمل کنند. دلیل این امر اینست که روش جدول جستجوی مقادیر مجبور به ذخیره کردن تغییرات کسر جرمی در هر نقطه فضای محاسباتی می باشد. به عنوان مثال با در نظر گرفتن سه اسکالر (f, n_{CH_4}, n_{CO}) برای مشخص نمودن حالت سیستم، ابعاد (۹، ۱۰، ۲۵) نمونه برای هر جزء در نظر گرفته شده است. با در نظر گرفتن تعداد تغییرات مولی برای هر نقطه و اختصاص دادن ۸ بایت برای هر مقدار ذخیره شده می توان حافظه اشغال شده را برای جدول جستجوی مقادیر محاسبه نمود. در مقایسه با روش انتگرالگیری مستقیم نیز، از آنجاییکه زمان حافظه مصرفی مورد نیاز برای شبکه عصبی به اندازه گام زمانی روش حل و همچنین سفتی (Stiffness) سیستم معادلات وابسته نیست، شبکه های عصبی نسبت به حل انتگرالگیری مستقیم در زمینه زمان حل بسیار کارآمدتر میباشند.

۷- جمع بندی

همانطور که ملاحظه شد، شبکه های عصبی مصنوعی به عنوان یک ابزار قدرتمند پردازشگر اطلاعات میتوانند به شکل موفقیت آمیزی برای تحلیل و مدلسازی سیستمهای دینامیکی که سینتیک شیمیایی احتراق مثال خوبی از آنهاست بکار گرفته

شوند. در این تحقیق نشان داده شد که یک شبکه عصبی پس از طی پروسه آموزش میتواند با مزایای بهتری نسبت به روشهای رایج موجود که انتگرال گیری مستقیم و روش جستجوی مقادیر میباشند به لحاظ هزینه های حافظه مصرفی و سرعت، تخمین دقیقی از نحوه تغییرات گونه های شیمیایی در مکانیزم کاهش یافته جونز ارائه نمایند. این تخمین شامل کلیه داده های دیده نشده در پروسه آموزش می باشد و کلیه ترکیبات حاصل از سه متغیر مشخص کننده حالت ترموشیمیایی سیستم احتراقی را در حدود شعله وری پوشش میدهد. در راستای تکمیل این تحقیق، هدف بر بهینه سازی شبکه عصبی بکار گرفته شده با الگوریتمهای آموزشی دینامیکی و همچنین اعمال این مدلسازی برای سایر مدلهای احتراقی کاهش یافته و در صورت امکان، مکانیزم اسکلتی و مقایسه تغییرات گونه های موجود در هر مکانیزم با سایر مکانیزمها میباشد.

مراجع

1- Pope S. B., "*Computationally Efficient Implementation of Combustion Chemistry Using In Situ Adaptive Tabulation"*. Sibley School of Mechanical & Aerospace Eng. Report No. FDA 96-02, 1996.

2- Jones, W.P., Lindstedt, R.P., *"The Calculation of the structure of laminar counterflow diffusion flames using a global reaction mechanism"*, Comb. Science and Tech., Vol: 61, Pages: 31 – 49 (1988).

3- Magel, H. C., Schnell, U. and Hein, K. R. G., in 3rd Workshop of Modelling of Chemical Reaction Systems, Heidelberg, 1996.

4- Limin Fu, *Neural Network in Computer Intelligence*, McGraw-Hill, International Editions (1994).

5- Karayiannis N. B., and Venetsanopoules A. N., *Artificial Neural Networks*, Kluwer Academic Publishers, 1993.

6- Blasco J. A., Fueyo N., Dopazo C., and Ballester, J., "*Modelling the temporal evolution of a reduced combustion chemical system with artificial neural network"*, Comb. And Flame 113(1/2), 38-52.

7- Moller, M., Neural Networks 6:525 (1993).

8- Chen, J. Y., Kollmann, W., and Dibble, R. W., "*PDF modelling of turbulent non-primexed methane jet flames"*, Comb. Science and Tech. 64, 315-346 (1989).

9- Moller, M., "*A Scaled Conjugated Gradient Algorithm for Fast Supervised Learning*". Neural Networks 6 (4), 525-533 (1993).

10 Peters, N., "*In Numerical Simulation of Combustion Phenomena"*, Lecture Notes in Physics 241, Springer Verlag, 1985, p. 90.

11- Christo, F. C., Masri, A. R., Nebot, E. M., "*Artificial Neural Network Implementation of Chemistry Simulation of H2/CO2 Flames"*, Combustion and Flame 106:406-427 (1996).

12- Haykin, S., Neural Networks: *A Comprehensive Foundation*. Macmillan College Pub. Comp., New York, 1994.