

Comparison of the Metaheuristic Algorithms for Determining Optimal Arrhenius Coefficients in the Reduction of a Two-Step Methane Combustion Kinetic Mechanism

Alireza Eshaghi, Zeinab Pouransari^{1*}

Department of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

ABSTRACT

One of the significant challenges in simulating combustion processes is the accurate determination of the kinetic coefficients of the Arrhenius equation, as these coefficients directly affect the accuracy of reaction rate predictions. In this study, four metaheuristic algorithms, including the Genetic Algorithm, Grey Wolf Optimizer, hybrid Genetic-Particle Swarm Optimization algorithm, and Whale Optimization Algorithm, were employed to optimize the coefficients of the Arrhenius equation. To evaluate the performance of these algorithms, the reduction of a two-step methane combustion mechanism to a single-step mechanism was selected as a case study. The novelty of this study lies in the comparative and simultaneous evaluation of the performance of the aforementioned algorithms and the determination of the most suitable method based on two criteria: root mean square error and computational time. The results showed that the Whale Optimization Algorithm, with a root mean square error of 0.03325, achieved the highest accuracy in determining the Arrhenius coefficients, whereas the Grey Wolf Optimizer, with a computational time of 1.89 s, demonstrated the fastest performance. This comparison enables the selection of an appropriate algorithm based on the required accuracy and computational speed. The results indicate that, in addition to its application in reducing the methane combustion mechanism, the proposed approach can also be applied to determine Arrhenius coefficients for other chemical reactions.

KEYWORDS

Arrhenius equation, Genetic Algorithm, Whale Optimization Algorithm, Grey Wolf Optimization Algorithm, Genetic-Particle Swarm Optimization

* Corresponding Author Email: pouransari@iust.ac.ir

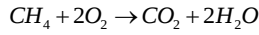
1. Introduction

Combustion modeling plays a key role in the design and analysis of thermal systems such as gas turbines and internal combustion engines, where accurate prediction of chemical reaction rates is essential for improving efficiency and reducing pollutant emissions [1]. For methane oxidation, global Arrhenius-type mechanisms are still widely used because they provide acceptable predictive capability at a much lower computational cost than detailed chemistry [2,3].

However, selecting appropriate Arrhenius parameters for a reduced single-step mechanism remains a challenging task, especially when the reduced model is expected to reproduce the behavior of a more detailed multi-step mechanism. In recent years, metaheuristic optimization methods have provided an efficient route for estimating such parameters [4]. In this work, four algorithms, including GA, WOA, GWO, and hybrid GA-PSO [5-7], were compared in terms of both prediction accuracy and computational runtime.

2. Methodology

The objective of the present methodology is to determine a set of global Arrhenius parameters for a reduced single-step methane oxidation model capable of reproducing the behavior of the reference two-step mechanism. The reduced model is based on the following overall reaction [2]:



The reaction rate is expressed as [1]:

$$\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = A e^{-E_a/(RT)} [\text{CH}_4]^a [\text{O}_2]^b \quad (2)$$

In this expression, A , a , b , and E_a are the unknown kinetic parameters to be optimized. To estimate these parameters, the reaction rates predicted by the reduced model were compared with the reference values reconstructed from the experimental methane oxidation data reported by Dryer and Glassman [8]. The optimization problem was therefore defined by minimizing the Root Mean Square Error (RMSE):

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (R_{\text{ref},i} - R_{\text{pred},i})^2} \quad (3)$$

where R_{ref} and R_{pred} denote the reference and predicted reaction rates, respectively, and N is the

number of data points. For a fair comparison, GA, WOA, GWO, and hybrid GA-PSO were all implemented within the same parameter bounds and under the same stopping criterion of 2000 iterations. Each algorithm was executed in 40 independent runs, and the resulting solutions were evaluated in terms of both prediction accuracy and computational runtime.

3. Results and Discussion

The performance of the investigated algorithms was evaluated from two perspectives: prediction accuracy and computational runtime. First, the error-based approach was used to compare the ability of the reduced single-step model to reproduce the reference methane reaction-rate profile. Figure 1 illustrates the reaction-rate distributions obtained by GA, WOA, GWO, and hybrid GA-PSO along the axial distance.

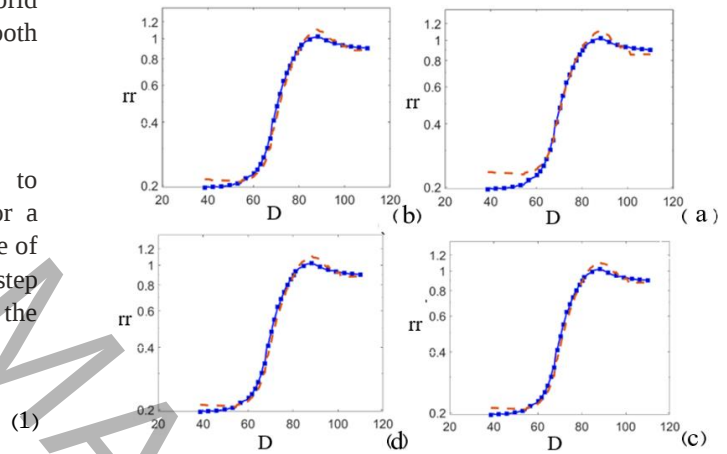


Figure1. Comparison of the methane reaction rate as a function of axial distance based on the runtime approach for the (a) Genetic, (b) Whale, (c) Grey Wolf, and (d) hybrid Genetic-Particle Swarm Optimization algorithms. The blue points represent the experimental data, while the red dashed lines indicate the values predicted by the models.

Figure 1 illustrates the methane reaction-rate profiles along the axial distance for the reference data and the values predicted by the investigated algorithms. It can be seen that, in the initial region between 40 and 60 and also in the final region at distances greater than 100, the Genetic Algorithm deviates noticeably from the reference data, while the other methods show better agreement. In the intermediate interval from 60 to 80, all algorithms successfully capture the rapid increase in the reaction rate. Nevertheless, in the range of 80 to 100, which corresponds to the maximum reaction-rate region, all methods tend to overpredict the results and thus introduce some error. The decrease in reaction rate at larger distances is related to fuel depletion, which is

also reproduced by the reduced models. For a more precise quantitative comparison, Table 1 summarizes the recommended algorithms and the corresponding

optimal Arrhenius parameters under the accuracy-based and runtime-based criteria.

Table 1. Summary of the recommended algorithms and optimal Arrhenius parameters under the two evaluation criteria

Criterion	Recommended algorithm	Main indicator	A_0	a	b	$-E_a/R$
Accuracy-based approach	WOA	RMSE= 0.03325	$e^{-2.5590}$	0.1754	1.1394	3541.65
Runtime-based approach	GWO	Run time=1.89 s	$e^{-0.5701}$	0.1758	1.0218	1037.4186

As reported in Table 1, WOA is selected as the preferred method under the accuracy-based approach because it yields the minimum RMSE of 0.03325. This result is consistent with Figure 1, where WOA follows the reference profile more closely than the other methods. In contrast, GWO is selected under the runtime-based approach because it requires only 1.89 s to complete the optimization, while still maintaining competitive agreement with the reference data. It is also worth noting that hybrid GA-PSO, although not selected as the best method under either of the two main criteria, produced the lowest standard deviation among the investigated methods and therefore showed the best repeatability. The results demonstrate that the final choice of algorithm depends on the practical objective of the simulation: WOA is more suitable when accuracy is prioritized, whereas GWO is more suitable when fast optimization is required.

4. Conclusion

The main conclusions of this study are summarized as follows:

From the accuracy point of view, WOA achieved the best prediction performance with the minimum RMSE of 0.03325, whereas GA showed the weakest performance with an RMSE of 0.03876. In terms of repeatability, hybrid GA-PSO exhibited the lowest standard deviation among the investigated methods.

From the computational-cost point of view, GWO exhibited the fastest runtime of 1.89 s, while hybrid GA-PSO required the longest runtime of 25.57 s.

When maximum accuracy is the main objective, WOA is recommended, yielding the optimal parameters $A_0 = \exp(-2.5590)$, $a = 0.1754$, $b = 1.1394$, and $-E_a/R = 3541.65$.

When computational speed is more important than minimum error, GWO is the more suitable choice, yielding $A_0 = \exp(-0.5701)$, $a = 0.1758$, $b = 1.0218$, and $-E_a/R = 1037.4186$.

5. References

- [1] S.R. Turns, Introduction to combustion, McGraw-Hill Companies New York, NY, USA, 1996.
- [2] C.K. Westbrook, F.L. Dryer, Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, Combustion science and technology, 27(1-2) (1981) 31-43.
- [3] J. Bibrzycki, T. Poinot, Reduced chemical kinetic mechanisms for methane combustion in O₂/N₂ and O₂/CO₂ atmosphere, CERFACS Working Note ECCOMET WN/CFD/10/17, 2010.
- [4] A. Eshaghi, Z. Pouransari, Optimizing Arrhenius parameters for multi-step reactions via metaheuristic algorithms, Journal of Mathematical Chemistry, (2025) 1-28.
- [5] S. Mirjalili, A. Lewis, The whale optimization algorithm, Advances in engineering software, 95 (2016) 51-67.
- [6] S.N. Makhadmeh, M.A. Al-Betar, I.A. Doush, M.A. Awadallah, S. Kassaymeh, S. Mirjalili, R.A. Zitar, Recent advances in Grey Wolf Optimizer, its versions and applications, Ieee Access, 12 (2023) 22991-23028.
- [7] Y.-T. Kao, E. Zahara, A hybrid genetic algorithm and particle swarm optimization for multimodal functions, Applied soft computing, 8(2) (2008) 849-857.
- [8] F.L. Dryer, I. Glassman, High-temperature oxidation of CO and CH₄, in: Symposium (International) on combustion, Elsevier, 1973, pp. 987-1003.

مقایسه الگوریتم‌های فراابتکاری در تعیین ضرایب بهینه آرنیوس برای کاهش مکانیزم سینتیکی دومرحله‌ای احتراق متان

علیرضا اسحاقی، زینب پورانصاری*

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

* pouransari@iust.ac.ir

چکیده

یکی از چالش‌های مهم در شبیه‌سازی فرایندهای احتراق، تعیین دقیق ضرایب سینتیکی معادله آرنیوس است؛ زیرا این ضرایب تأثیر مستقیمی بر دقت پیش‌بینی نرخ واکنش دارند. در این پژوهش، چهار الگوریتم فراابتکاری شامل الگوریتم ژنتیک، الگوریتم گرگ خاکستری، الگوریتم ترکیبی ژنتیک-ازدحام ذرات و الگوریتم نهنگ برای بهینه‌سازی ضرایب معادله آرنیوس به کار گرفته شدند. به منظور ارزیابی عملکرد این الگوریتم‌ها، کاهش مکانیزم دومرحله‌ای احتراق متان به یک مکانیزم تک‌مرحله‌ای به عنوان مطالعه موردی انتخاب شد. نوآوری این پژوهش در ارزیابی تطبیقی و هم‌زمان عملکرد الگوریتم‌های مذکور و تعیین مناسب‌ترین روش بر اساس دو معیار ریشه میانگین مربعات خطا و زمان اجرا است. نتایج نشان داد که الگوریتم نهنگ با مقدار ریشه میانگین مربعات خطا برابر $0/03325$ دقیق‌ترین عملکرد را در تعیین ضرایب آرنیوس ارائه می‌دهد، درحالی‌که الگوریتم گرگ خاکستری با زمان اجرای $1/89$ ثانیه سریع‌ترین عملکرد را دارد. این مقایسه امکان انتخاب الگوریتم مناسب را بر اساس نیازهای دقت و سرعت محاسباتی فراهم می‌کند. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که روش پیشنهادی علاوه بر کاربرد در کاهش مکانیزم احتراق متان، قابلیت استفاده برای تعیین ضرایب آرنیوس در سایر واکنش‌های شیمیایی را نیز دارد.

کلمات کلیدی

معادله آرنیوس، الگوریتم ژنتیک، الگوریتم نهنگ، الگوریتم گرگ خاکستری، الگوریتم ژنتیک - ازدحام ذرات

احتراق به عنوان یکی از فرآیندهای بنیادین در علوم مهندسی، ماهیتی چندفیزیکی داشته و شامل اندرکنش پیچیده تلاطم جریان، انتقال حرارت، انتقال جرم و سینتیک شیمیایی است [۱]. کاربرد گسترده سیستم‌های تولید توان نظیر توربین‌های گازی و موتورهای احتراق داخلی، تحلیل دقیق این سیستم‌ها را با هدف افزایش راندمان حرارتی و کاهش انتشار آلاینده‌ها به اولویت پژوهشی تبدیل کرده است [۲]. جهت دستیابی به این اهداف، شبیه‌سازی عددی دقیق فرآیند احتراق امری ضروری است. در این میان معادله آرنیوس به عنوان مدل استاندارد برای توصیف سینتیک واکنش‌های شیمیایی، وابستگی نرخ واکنش به دما و غلظت واکنش‌دهنده‌ها را تعیین می‌کند [۳-۵].

بررسی متون علمی نشان می‌دهد که تعیین ضرایب دقیق برای معادله آرنیوس چالشی اساسی است. اگرچه مطالعات ارزشمندی توسط وستبروک و درایر [۶] و بیرژسکی و همکاران [۷] انجام شده و ضرایبی برای مکانیزم‌های تک‌مرحله‌ای و دو مرحله‌ای ارائه گردیده است، اما این ضرایب اغلب وابسته به شرایط عملکردی خاص هستند. استفاده از این ضرایب در خارج از محدوده‌های تعریف شده نظیر تغییر فشار یا نسبت هم‌ارزی، منجر به خطای قابل توجهی در شبیه‌سازی می‌شود [۸]. بنابراین برای شرایط عملکردی جدید، استخراج ضرایب بهینه با استفاده از الگوریتم‌های هوشمند و داده‌های تجربی، راهکاری کارآمد جهت کمی‌سازی اختلاف میان نتایج عددی و واقعیت فیزیکی است. در همین راستا مطالعاتی نظیر پژوهش اسحاقی و پورانصاری [۹] انجام شده است که با بهره‌گیری از الگوریتم‌های بهینه‌سازی، ضرایب آرنیوس را برای مکانیزم‌های چندمرحله‌ای احتراق متان و پروپان استخراج کرده‌اند.

اگرچه مکانیزم‌های چندمرحله‌ای قادر به پیش‌بینی دقیق‌تر رفتار شیمیایی هستند، اما تعداد زیاد واکنش‌ها و گونه‌های شیمیایی موجب افزایش قابل توجه هزینه محاسباتی می‌شود. از این رو در بسیاری از شبیه‌سازی‌های مهندسی از مکانیزم‌های تک‌مرحله‌ای استفاده می‌شود؛ بنابراین توسعه روشی برای تعیین ضرایب بهینه یک مکانیزم تک‌مرحله‌ای اهمیت عملی بالایی دارد. باوجود مطالعات پیشین، هدف اصلی پژوهش حاضر ارائه رویکردی دقیق برای کاهش مکانیزم دو مرحله‌ای احتراق متان به یک مدل تک‌مرحله‌ای کلی و کارآمد است. نوآوری این تحقیق در ارزیابی تطبیقی و هم‌زمان چهار الگوریتم فراابتکاری شامل الگوریتم ژنتیک، گرگ خاکستری، روش ترکیبی ژنتیک با ازدحام ذرات و الگوریتم نهنگ است. اگرچه الگوریتم نهنگ در پژوهش‌های پیشین کارآمد معرفی شده است، اما در این مطالعه عملکرد آن در کنار الگوریتم نوین گرگ خاکستری و سایر روش‌ها، به طور خاص برای مسئله کاهش مکانیزم مورد سنجش قرار می‌گیرد. در نهایت الگوریتم‌های مذکور بر اساس دو معیار ریشه میانگین مربعات خطا^۱ و زمان محاسباتی مقایسه شده تا مناسب‌ترین روش برای بهینه‌سازی ضرایب آرنیوس معرفی گردد.

ساختار مقاله بدین صورت سازمان‌دهی شده است که در بخش ۲ معادلات حاکم بر مسئله ارائه شده و در بخش ۳ مکانیزم‌های احتراق متان تشریح می‌گردد. بخش ۴ به معرفی الگوریتم‌های بهینه‌سازی مورد استفاده اختصاص دارد. در بخش ۵ نتایج شبیه‌سازی و مقایسه الگوریتم‌ها بحث شده و در پایان، نتیجه‌گیری نهایی ارائه می‌شود.

۲- معادلات حاکم

۲-۱- مدل آرنیوس برای واکنش احتراق متان تک مرحله‌ای

واکنش تک‌مرحله‌ای احتراق متان به صورت معادله (۱) نوشته می‌شود [۱۰]



که سرعت واکنش را می‌توان از معادله (۲) یافت. [۱۰]

^۱ Root Mean Square Error (RMSE)

$$\frac{d[CH_4]}{dt} = Ae^{-E_a/(RT)}[CH_4]^a[O_2]^b \quad (2)$$

در این رابطه A ضریب پیش‌نمایی، E_a انرژی فعال‌سازی بر حسب $J/kmol$ و R ثابت جهانی گازها است. همچنین $[CH_4]$ و $[O_2]$ بیانگر غلظت گونه‌ها با واحد $kmol/m^3$ بوده و پارامترهای a و b به ترتیب ضرایب نمایی برای غلظت برای متان و اکسیژن هستند.

۲-۲- مدل آرنیوس برای واکنش دو مرحله‌ای احتراق متان

مکانیسم دومرحله‌ای برای احتراق واکنش متان با معادله (۳) نشان داده شده است [۱۱].



رابطه نرخ آرنیوس برای مرحله اول و دوم واکنش با معادله (۴) بیان می‌شود [۱۱].

$$\begin{aligned} \frac{d[CH_4]}{dt} &= Ae^{-\frac{E_a}{RT}}[CH_4]^a[O_2]^b \\ \frac{d[CO]}{dt} &= Ae^{-\frac{E_a}{RT}}[CO]^c[O_2]^d \end{aligned} \quad (4)$$

که در آن a, b, c و d به ترتیب ضرایب نمایی برای غلظت گازهای متان، اکسیژن، مونوکسید کربن و اکسیژن هستند.

۳- مکانیسم‌های احتراق متان

متان به عنوان پرکاربردترین سوخت هیدروکربنی، موضوع پژوهش‌های گسترده‌ای در زمینه احتراق بوده و مدل‌های سینتیکی متنوعی برای توصیف واکنش آن با هوا توسعه یافته است. از جمله شاخص‌ترین این موارد می‌توان به مکانیسم تک‌مرحله‌ای وستبروک و درایر [۶] و مدل دو مرحله‌ای بیژسکی و همکاران [۷] اشاره کرد.

۳-۱- مکانیسم تک مرحله‌ای وستبروک و درایر

مکانیسم وستبروک و درایر به عنوان پرکاربردترین مدل جهانی تک‌مرحله‌ای، باهدف پیش‌بینی دقیق نرخ واکنش شیمیایی توسعه یافته است. لازم به ذکر است که در این پژوهش منظور از نرخ واکنش شیمیایی، نرخ مصرف متان محاسبه‌شده بر اساس معادله آرنیوس است و این اصطلاح نباید با مفاهیمی نظیر سرعت شعله یا سرعت انتشار جبهه شعله اشتباه گرفته شود. در این پژوهش، پنج مجموعه از ضرایب سینتیکی برای واکنش اکسیداسیون متان ارائه گردیده که جزئیات آن به همراه معادله واکنش در جدول ۱ گزارش شده است.

جدول ۱. مشخصات و ضرایب مکانیسم تک‌مرحله‌ای $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$ وستبروک و درایر [۶]

Table 1. Specifications and coefficients of the single-step Westbrook and Dryer mechanism [6],
 $CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$.

مرتبه واکنش	T_a	B	A
$[\text{CH}_4]^{1/3}[\text{O}_2]^{-1/3}$	$2/44 \times 10^4$	•	$1/3 \times 10^9$
$[\text{CH}_4]^{1/3}[\text{O}_2]^{-1/3}$	$1/51 \times 10^4$	•	$8/3 \times 10^6$
$[\text{CH}_4]^{1/3}[\text{O}_2]^{-1/2}$	$2/44 \times 10^4$	•	$6/7 \times 10^{12}$
$[\text{CH}_4]^{1/8}[\text{O}_2]^{-1/2}$	$2/44 \times 10^4$	•	1×10^{13}
$[\text{CH}_4]^{-1}[\text{O}_2]^{-1}$	$2/44 \times 10^4$	•	$2/4 \times 10^{16}$

که در آن A ، B و T_a به ترتیب به ضرایب پیش نمایی و ضریب دما اشاره دارند.

۲-۳- مکانیسم دو مرحله‌ای بیرژسکی و همکاران

مکانیزم پیشنهادی بیرژسکی و همکاران، مدلی دومرحله‌ای است که باهدف پیش‌بینی نرخ واکنش شیمیایی متان مطابق رابطه (۲) توسعه یافته است. ضرایب آرنیوس مربوط به این واکنش‌ها در جدول ۲ گزارش شده است.

جدول ۲. ضرایب سینتیکی و معادلات واکنش در مکانیزم دو مرحله‌ای بیرژسکی [۷]

Table 2. Kinetic coefficients and reaction equations of the two-step Bibrzycki mechanism [7].

واکنش	A	B	E_a	T_a	مرتبه واکنش
$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2\text{O}$	2×10^{15}	•	۳۵۰۰۰	$1/76 \times 10^4$	$[\text{CH}_4]^{1/3}[\text{O}_2]^{-1/3}$
$\text{CO} + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$	2×10^9	•	۱۲۰۰۰	$6/04 \times 10^3$	$[\text{CO}][\text{O}_2]^{1/2}$
$\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + 1/2\text{O}_2$	$8/11 \times 10^{10}$	•	۷۷۱۹۴	$3/88 \times 10^4$	$[\text{CO}_2]$

که در آن A و B نشان‌دهنده ضرایب پیش‌نمایی، T_a دمای فعال‌سازی و E_a انرژی فعال‌سازی هستند.

۴- الگوریتم‌های بهینه‌سازی منتخب

در این پژوهش، تمامی الگوریتم‌های فراابتکاری باهدف تعیین مقادیر بهینه ضرایب معادله آرنیوس شامل A_0 ، a ، b و E_a/R به کار گرفته شدند. تابع هدف، کمینه‌سازی مقدار ریشه میانگین مربعات خطا بین نرخ واکنش محاسبه‌شده توسط مدل و داده‌های مرجع تجربی است. در فرایند بهینه‌سازی، هر الگوریتم در فضای جستجوی تعریف‌شده برای ضرایب آرنیوس به دنبال مجموعه‌ای از پارامترها است که کمترین مقدار تابع هدف را ایجاد کند. همچنین، برای جلوگیری از تولید پاسخ‌های غیرواقعی، جستجوی الگوریتم‌ها به بازه‌های مجاز تعیین‌شده برای هر یک از ضرایب محدود شده است.

۴-۱- تابع هدف

به‌منظور ارزیابی عملکرد الگوریتم‌های بهینه‌سازی، تابع هدف به‌صورت ریشه میانگین مربعات خطا بین نرخ واکنش محاسبه‌شده توسط مدل تک‌مرحله‌ای و داده‌های مرجع مکانیزم دومرحله‌ای تعریف شده است. این تابع به‌صورت رابطه ۵ نوشته می‌شود.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (RR_{ref,i} - RR_{pred,i})^2} \quad (5)$$

که در معادله (۵)، N تعداد نقاط داده، RR_{ref} نرخ واکنش مرجع حاصل از مکانیزم دومرحله‌ای و RR_{pred} نرخ واکنش پیش‌بینی‌شده توسط مدل تک‌مرحله‌ای است [۱۲]. در هر تکرار، الگوریتم با تولید مجموعه‌ای جدید از ضرایب آرنیوس ($A_0, a, b, E_a/R$)، نرخ واکنش را محاسبه کرده و مقدار ریشه میانگین مربعات خطا را به‌عنوان تابع هدف ارزیابی می‌کند. فرایند بهینه‌سازی تا دستیابی به کمترین مقدار این تابع ادامه می‌یابد [۱۳].

۲-۴- روش حداقل مربعات

به منظور تعیین مقادیر اولیه ضرایب معادله آرنیوس در معادله (۴)، از روش برازش حداقل مربعات خطی استفاده شد. بدین منظور، با اعمال لگاریتم طبیعی بر طرفین این رابطه، فرم خطی شده آن مطابق معادله (۶) به دست آمد. ضرایب حاصل از این روش به عنوان تخمین اولیه مورد استفاده قرار گرفتند و بر اساس آن‌ها، محدوده جستجوی مناسب برای الگوریتم‌های بهینه‌سازی تعریف شد. این محدوده‌ها برای تمامی الگوریتم‌ها به صورت یکسان اعمال شدند تا مقایسه عملکرد روش‌ها تحت شرایط یکسان و به دور از هرگونه سوگیری انجام شود.

$$\ln \frac{d[CH_4]}{dt} = \ln A + a \ln[CH_4] + b \ln[O_2] - E_a / (RT) \quad (6)$$

معادله (۶) با اعمال روش برازش کمترین مربعات خطی بر روی مجموعه مناسبی از داده‌های تجربی حل خواهد شد. لازم به ذکر است که از نتایج این روش تنها برای تعیین محدوده تغییرات ضرایب آرنیوس استفاده می‌شود تا بتوان از الگوریتم‌های موجود بهترین بهره را برد [۱۴].

۳-۴- الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک یک روش جستجوی هوشمند در حوزه محاسبات تکاملی است که برای حل مسائل بهینه‌سازی پیچیده و تقریب راه‌حل‌های سراسری در فضاهای جستجوی بزرگ به کار می‌رود. این الگوریتم با الهام از اصول انتخاب طبیعی و مکانیزم‌های بیولوژیکی نظیر وراثت، جهش و تقاطع، به دنبال استخراج بهینه‌ترین ساختار یا مجموعه پارامترها در مدل‌های پیش‌بینی و تطبیق الگو است. به دلیل توانایی بالا در جستجوی غیرخطی، الگوریتم ژنتیک گزینه‌ای کارآمد برای حل مسائل رگرسیون محسوب می‌شود. برآیند این الگوریتم با تولید تصادفی جمعیتی از راه‌حل‌های اولیه آغاز شده و با ارزیابی شایستگی هر عضو توسط تابع هدف و اعمال عملگرهای تکاملی، تا زمان ارضای شرط توقف ادامه می‌یابد [۱۵].

۴-۴- الگوریتم نهنگ

الگوریتم بهینه‌سازی نهنگ، یک روش فراابتکاری نوین و مبتنی بر جمعیت است که با الهام از راهبرد هوشمندانه شکار در نهنگ‌های کوهان‌دار توسعه یافته است. هسته اصلی این الگوریتم بر مدل‌سازی ریاضی رفتار تغذیه‌ای خاص این گونه، موسوم به روش تور حباب استوار است. فرایند بهینه‌سازی در این روش از طریق سه مکانیزم اصلی شامل محاصره طعمه، مانور مارپیچی جهت حمله و جستجوی تصادفی برای طعمه هدایت می‌شود. این الگوریتم به دلیل ساختار منعطف، توانایی بالا در برقراری تعادل میان جستجوی سراسری و محلی و همچنین سرعت همگرایی مطلوب، کارایی قابل توجهی در حل مسائل پیچیده بهینه‌سازی پیوسته و گسسته از خود نشان داده است [۱۶].

۵-۴- الگوریتم گرگ خاکستری

الگوریتم بهینه‌سازی گرگ خاکستری یک روش فراابتکاری هوشمند است که با الهام از ساختار اجتماعی سلسله‌مراتبی و رفتار گروهی گرگ‌ها در طبیعت طراحی شده است. هدف اصلی این الگوریتم حل مسائل پیچیده بهینه‌سازی از طریق مدل‌سازی ریاضی مکانیزم شکار و رهبری در گله است. فرایند جستجو با تشکیل جمعیتی تصادفی از گرگ‌ها آغاز می‌شود که در آن هر عضو نماینده یک راه‌حل بالقوه برای مسئله است. در ادامه موقعیت گرگ‌ها طی چرخه‌های متوالی و بر اساس معادلات ریاضی که بیانگر تعاملات اجتماعی و تاکتیک‌های محاصره طعمه هستند، به‌روزرسانی می‌شود. این معادلات با ایجاد تعادل میان دو مفهوم کلیدی اکتشاف و

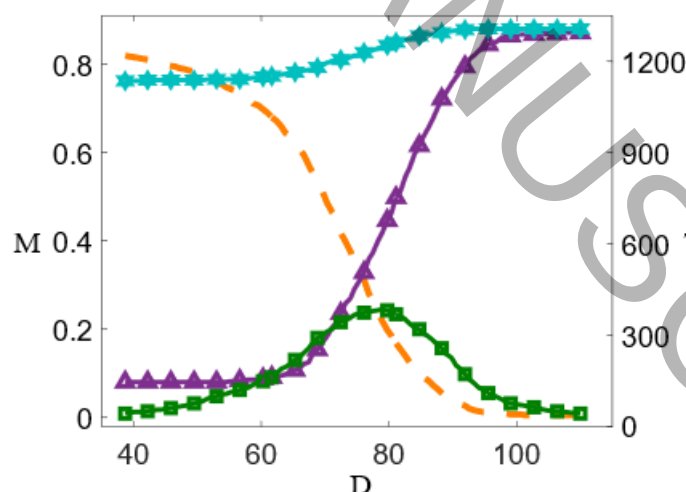
بهره‌برداری، از افتادن در دام بهینه‌های محلی جلوگیری کرده و جستجوی سراسری را تسهیل می‌کنند. نتایج پژوهش‌ها نشان‌دهنده کارایی بالای این الگوریتم در همگرایی سریع و ارائه پاسخ‌های باکیفیت در مسائل مهندسی و ریاضی است [۱۷].

۴-۶- الگوریتم ژنتیک - ازدحام ذرات

الگوریتم ترکیبی ژنتیک و بهینه‌سازی ازدحام ذرات، رویکردی کارآمد در محاسبات تکاملی است که باهدف هم‌افزایی قابلیت‌های متمایز این دو روش برای حل مسائل پیچیده بهینه‌سازی توسعه‌یافته است. در این ساختار ترکیبی، الگوریتم ژنتیک با بهره‌گیری از اصول انتخاب طبیعی و اعمال عملگرهای تکاملی نظیر جهش و تقاطع، وظیفه جستجوی سراسری و حفظ تنوع در جمعیت را بر عهده دارد که این امر موجب تقویت قابلیت اکتشاف در فضای جستجو می‌شود. ازسوی دیگر، الگوریتم ازدحام ذرات که بر مبنای هوش جمعی و رفتار اجتماعی ذرات استوار است، با هدایت جمعیت به سمت بهترین موقعیت‌های یافت شده فردی و گروهی، بر فرایند بهره‌برداری و استخراج دقیق نواحی امیدبخش تمرکز می‌کند. ادغام هوشمندانه این دو راهبرد موجب ایجاد تعادلی پایدار میان گستردگی جستجو و همگرایی دقیق گردیده و ضمن پوشش محدودیت‌های ذاتی هر روش به‌صورت مجزا، سرعت دستیابی به پاسخ نهایی و کیفیت بهینه آن را به طرز قابل‌توجهی ارتقا می‌بخشد. لازم به ذکر است که نحوه پیاده‌سازی این ساختار ترکیبی می‌تواند متناسب با ماهیت مسئله و اهداف پژوهش تغییر یابد [۱۸].

۵- نتایج

به‌منظور سنجش کارایی و دقت چهار الگوریتم مورد مطالعه در تخمین ضرایب بهینه معادله آرنیوس، دو شاخص کلیدی شامل زمان محاسباتی و ریشه میانگین مربعات خطا مبنای ارزیابی قرار گرفته است. در این فرایند مکانیسم دومرحله‌ای احتراق متان به یک مدل تک‌مرحله‌ای تقلیل‌یافته و پارامترهای سینتیکی آن طی فرایند بهینه‌سازی تنظیم شده‌اند. در این پژوهش جهت اعتبارسنجی مدل و بررسی صحت رفتار سینتیکی اکسیداسیون هیدروکربن، از داده‌های تجربی و معتبر درایر و گلاسمن [۱۹] بهره گرفته شده است تا در نهایت بر اساس معیارهای یاد شده، کارآمدترین الگوریتم شناسایی و معرفی گردد.



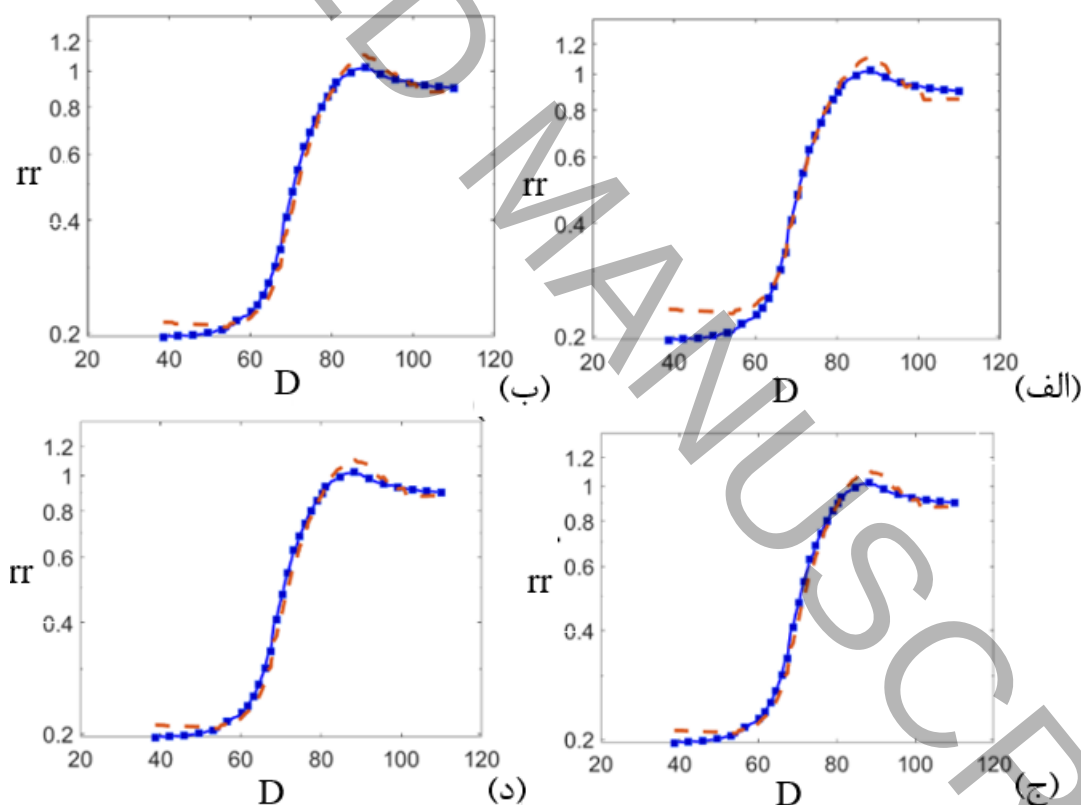
شکل ۱. پروفیل دما (T) و کسر مولی گونه‌ها (M) نسبت به فاصله محوری (D). نمادهای ستاره آبی، مثلث بنفش، مربع سبز و خط چین نارنجی به ترتیب بیانگر دما، CO_2 ، CO و CH_4 هستند که بر مبنای داده‌های مرجع [۱۹] بازسازی شده‌اند.

Figure 1. Temperature (T) profile and mole fractions (M) of the species as a function of the axial distance (D). The blue star, purple triangle, green square, and orange dashed line symbols represent temperature, CO_2 , CO, and CH_4 , respectively, reproduced based on the data reported in reference [19].

شکل ۱ نتایج تجربی واکنش اکسیداسیون متان را نمایش می‌دهد که در آن توزیع گونه‌ها و دما در طول رآکتور ترسیم شده است. در این نمودار ستاره‌های آبی بیانگر روند صعودی دما هستند و خط چین نارنجی سیر نزولی و مصرف سوخت متان را نشان می‌دهد. همچنین تشکیل محصولات نیز قابل تفکیک است؛ بدین صورت که مثلث‌های بنفش نمایانگر افزایش پیوسته غلظت CO_2 هستند و مربع‌های سبز رفتار گونه میانی CO را به تصویر می‌کشند که غلظت آن ابتدا افزایش یافته و سپس کاهش می‌یابد. جزئیات دقیق‌تر این آزمایش در پژوهش درایر و گلاسمن [۱۹] موجود است.

۵-۱- رویکرد خطا

در این پژوهش، به منظور ارزیابی عملکرد الگوریتم‌های بهینه‌سازی، تمامی روش‌ها تحت شرایط اولیه یکسان و در ۴۰ اجرای مستقل مورد بررسی قرار گرفتند. در هر اجرا، مجموعه‌ای از ضرایب توسط الگوریتم تولید و در مدل سینتیکی تک‌مرحله‌ای اعمال شد. سپس نرخ واکنش حاصل از مدل در تمامی نقاط با داده‌های مرجع مقایسه گردید و مقدار ریشه میانگین مربعات خطا بر اساس اختلاف بین مقادیر پیش‌بینی شده و داده‌های مرجع محاسبه شد. مقدار ریشه میانگین مربعات خطا به عنوان تابع هدف در فرایند بهینه‌سازی در نظر گرفته شد و معیار اصلی مقایسه عملکرد الگوریتم‌ها بود. همچنین برای ترسیم نمودارها و مقایسه نتایج مربوط به الگوریتم نهنگ، از داده‌های گزارش شده در مقاله اسحاقی و پورانصاری [۹] استفاده شده است.



شکل ۲. مقایسه نرخ واکنش متان بر حسب فاصله بر اساس رویکرد خطا برای الگوریتم‌های (الف) ژنتیک، (ب) نهنگ، (ج) گرگ خاکستری و (د) ترکیبی ژنتیک- ازدحام ذرات که در آن‌ها نقاط آبی بیانگر داده‌های تجربی و خط چین قرمز نشان‌دهنده مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل هستند

Figure 2. Comparison of the methane reaction rate as a function of axial distance based on the error-based approach for the (a) Genetic, (b) Whale, (c) Grey Wolf, and (d) hybrid Genetic-Particle Swarm Optimization

algorithms. The blue points represent the experimental data, while the red dashed lines indicate the values predicted by the models.

شکل ۲ روند تغییرات نرخ واکنش متان بر حسب فاصله را برای داده‌های مرجع و مقادیر پیش‌بینی شده نمایش می‌دهد. بررسی نمودارها حاکی از آن است که در نواحی ابتدایی یعنی بازه ۴۰ تا ۶۰ و همچنین ناحیه انتهایی در فواصل بزرگ‌تر از ۱۰۰ الگوریتم ژنتیک دارای انحراف آشکاری از داده‌های مرجع است در حالی که سایر الگوریتم‌ها انطباق مناسبی را نشان داده‌اند. در بازه میانی ۶۰ تا ۸۰ تمامی روش‌ها روند شتاب‌گیری واکنش را با دقت بالا دنبال می‌کنند؛ اما در محدوده ۸۰ تا ۱۰۰ که متناظر با نقطه بیشینه نرخ واکنش است تمامی الگوریتم‌ها دچار پدیده بیش‌برآورد شده و با مقداری خطا همراه هستند. کاهش مجدد نرخ واکنش در فواصل انتهایی ناشی از اتمام غلظت سوخت است که مدل‌ها نیز آن را پیش‌بینی کرده‌اند. جهت بررسی کمی و مقایسه دقیق‌تر عملکرد روش‌ها جدول ۳ ضرایب بهینه آرنیوس و مقادیر ریشه میانگین مربعات خطا را ارائه می‌دهد.

جدول ۳. ضرایب بهینه آرنیوس و مقادیر خطا حاصل از الگوریتم‌های نهنگ، ژنتیک، گرگ خاکستری و ترکیبی ژنتیک - ازدحام ذرات

Table 3. Optimized Arrhenius coefficients and error values obtained using the Whale, Genetic, Grey Wolf, and hybrid Genetic-Particle Swarm Optimization algorithms.

روش	A	a	b	$-E_a/R$	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف معیار
نهنگ	$e^{-2/5590}$	۰/۱۷۵۴	۱/۱۳۹۴	۳۵۴۱/۶۵	۰/۰۳۳۲۵	۱/۹۷e-۰۴
ژنتیک	$e^{-1/7208}$	۰/۱۸۵۳	۱/۰۵۷۹	۲۵۳۹/۶۳	۰/۰۳۸۷۶	۰/۰۰۲۹
گرگ خاکستری	$e^{-1/5701}$	۰/۱۷۵۸	۱/۰۲۱۸	۱۰۳۷/۴۲	۰/۰۳۵۸۹	۲/۶۷e-۰۴
ژنتیک - ازدحام ذرات	$e^{-1/1213}$	۰/۱۷۸۳	۰/۹۸۱۴	۱۷۶/۴۰	۰/۰۳۶۴۵	۴/۵۳e-۰۵

جدول ۳ مقادیر بهینه پارامترهای سینتیکی استخراج شده توسط چهار الگوریتم مختلف را به همراه میزان خطای و انحراف معیار هر روش نمایش می‌دهد. در این جدول، پارامتر A_0 بیانگر ضریب پیش‌نمایی، متغیرهای a و b به ترتیب نشان‌دهنده مرتبه واکنش نسبت به غلظت متان و اکسیژن، و $-E_a/R$ معرف نسبت انرژی فعال‌سازی به ثابت جهانی گازها است. همچنین، معیار ریشه میانگین مربعات خطا جهت سنجش دقت برازش مدل‌ها گزارش شده است.

با بررسی مقادیر ریشه میانگین مربعات خطا و انحراف معیار نتایج در جدول ۳، مشاهده می‌شود که الگوریتم نهنگ با کمترین مقدار ریشه میانگین مربعات خطا برابر با ۰/۰۳۳۲۵، دقیق‌ترین عملکرد را در میان روش‌های مورد بررسی ارائه کرده است. این نتیجه با یافته‌های پژوهش اسحاقی و پورانصاری [۹] که بر کارایی بالای این الگوریتم تأکید داشته‌اند، همخوانی دارد. از سوی دیگر، الگوریتم ژنتیک با ریشه میانگین مربعات خطا برابر با ۰/۰۳۸۷۶ و همچنین بیشترین انحراف معیار (۰/۰۰۲۹)، ضعیف‌ترین عملکرد و کمترین پایداری را در بین الگوریتم‌های بررسی‌شده نشان داد. همچنین، الگوریتم گرگ خاکستری با ریشه میانگین مربعات خطا برابر با ۰/۰۳۵۸۹ و انحراف معیار ۰/۰۰۲۶۷، عملکردی مناسب و رقابتی از خود نشان داد و با اختلاف اندکی نسبت به الگوریتم نهنگ توانست داده‌های مرجع را پیش‌بینی کند. از سوی دیگر، اگرچه الگوریتم ترکیبی ژنتیک-ازدحام ذرات از نظر مقدار ریشه میانگین مربعات خطا پس از الگوریتم گرگ خاکستری قرار گرفت، اما با کمترین انحراف معیار پایدارترین عملکرد را در میان تمامی روش‌های مورد بررسی از خود نشان داد. این نتایج بیانگر آن است که الگوریتم نهنگ از نظر دقت برتری دارد، در حالی که الگوریتم ترکیبی ژنتیک-ازدحام ذرات از نظر پایداری نتایج عملکرد مطلوب‌تری ارائه می‌دهد. در نهایت با توجه به برتری الگوریتم نهنگ، ضرایب بهینه

استخراج شده توسط این روش شامل مقادیر $A_0 = \exp(-2/5590)$ و $a = 0.1754$ و $b = 1/1394$ و $-E_a/R = 3541/65$ به عنوان دقیق ترین پارامترها برای توصیف سینتیک این واکنش پیشنهاد می شوند.



شکل ۳. روند همگرایی الگوریتم های نهنگ (الف) ژنتیک، (ب) نهنگ، (ج) گرگ خاکستری و (د) ترکیبی ژنتیک- ازدحام ذرات بر اساس تغییرات ریشه میانگین مربعات خطا بر حسب تعداد تکرار

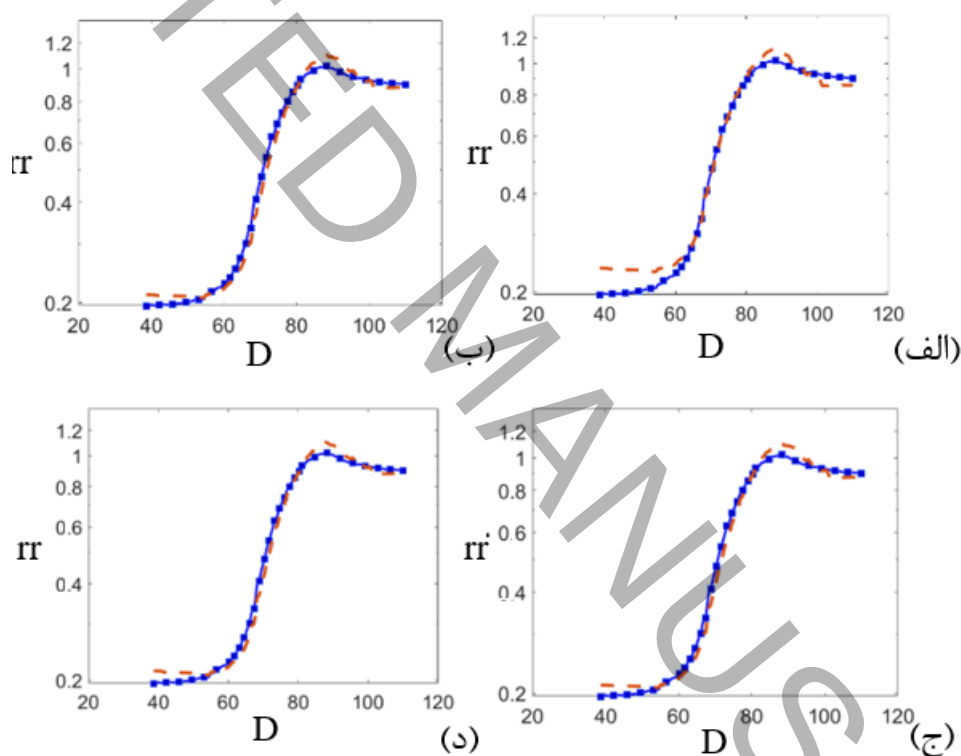
Figure 3. Convergence trends of the (a) Genetic, (b) Whale, (c) Grey Wolf, and (d) hybrid Genetic-Particle Swarm Optimization algorithms based on the variation of the root mean square error with the number of iterations.

به منظور بررسی ادعای همگرایی الگوریتم ها و ارزیابی کفایت تعداد تکرارهای در نظر گرفته شده، روند تغییرات مقدار ریشه میانگین مربعات خطا بر حسب تعداد تکرار برای هر یک از الگوریتم ها در شکل ۳ ارائه شده است. همان گونه که مشاهده می شود، مقدار ریشه میانگین مربعات خطا در تمامی الگوریتم ها در تکرارهای ابتدایی با شیب قابل توجهی کاهش یافته و پس از آن روندی تقریباً ثابت پیدا کرده است. این موضوع نشان می دهد که تمامی الگوریتم ها پیش از رسیدن به ۲۰۰۰ تکرار به همگرایی رسیده اند و افزایش تعداد

تکرارها پس از آن تأثیر محسوسی بر مقدار تابع هدف نداشته است. بنابراین، انتخاب ۲۰۰۰ تکرار با هدف اطمینان از دستیابی به پاسخ همگرا و ایجاد شرایط یکسان برای مقایسه عملکرد الگوریتم‌ها انجام شده است.

۲-۵- رویکرد زمان اجرا

برای تکمیل ارزیابی عملکرد روش‌ها، علاوه بر دقت، زمان اجرای الگوریتم‌ها نیز مورد بررسی قرار گرفت. تمامی الگوریتم‌ها با هدف تعیین ضرایب بهینه آرنیوس از طریق کمینه‌سازی مقدار ریشه میانگین مربعات خطا اجرا شدند. بر اساس بررسی روند همگرایی، تعداد ۲۰۰۰ تکرار برای تمامی الگوریتم‌ها انتخاب شد؛ زیرا پس از این تعداد تکرار، مقدار تابع هدف در تمامی الگوریتم‌ها تقریباً ثابت شده و تغییرات آن ناچیز است. در این پژوهش، این وضعیت به‌عنوان پایداری الگوریتم در نظر گرفته شده است؛ به این معنا که افزایش تعداد تکرارها تأثیر قابل‌توجهی بر بهبود پاسخ نهایی ندارد؛ بنابراین، زمان موردنیاز برای انجام ۲۰۰۰ تکرار به‌عنوان معیار مقایسه هزینه محاسباتی الگوریتم‌ها اندازه‌گیری و گزارش شده است.



شکل ۴. مقایسه نرخ واکنش متان بر حسب فاصله بر اساس رویکرد زمان اجرا برای الگوریتم‌های (الف) ژنتیک، (ب) نهنگ، (ج) گرگ خاکستری و (د) ترکیبی ژنتیک- ازدحام ذرات که در آن‌ها نقاط آبی بیانگر داده‌های تجربی و خط چین قرمز نشان‌دهنده مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل هستند.

Figure 4. Comparison of the methane reaction rate as a function of axial distance based on the runtime approach for the (a) Genetic, (b) Whale, (c) Grey Wolf, and (d) hybrid Genetic-Particle Swarm Optimization algorithms. The blue points represent the experimental data, while the red dashed lines indicate the values predicted by the models.

شکل ۴ مقادیر تجربی و پیش‌بینی‌شده نرخ واکنش متان را بر حسب فاصله نمایش می‌دهد. همان‌طور که در نمودارها مشهود است، تعداد تکرارها به‌نحوی تنظیم شده است که تمامی الگوریتم‌ها به همگرایی مطلوبی دست یابند و نرخ واکنش را با دقتی تقریباً یکسان نسبت به داده‌های تجربی شبیه‌سازی کنند. این یکسانی در دقت برازش، امکان ارزیابی و مقایسه عملکرد الگوریتم‌ها را بر اساس زمان اجرا فراهم می‌سازد. در همین راستا، جهت تحلیل کمی و دقیق‌تر، جدول ۴ ارائه می‌شود که در آن ضرایب بهینه سینتیکی به همراه زمان اجرای هر الگوریتم گزارش شده است.

جدول ۴. ضرایب بهینه آرنیوس و زمان اجرای حاصل از الگوریتم‌های نهنگ، ژنتیک، گرگ خاکستری و ترکیبی ژنتیک - ازدحام ذرات

Table 4. Optimized Arrhenius coefficients and run time obtained using the Whale, Genetic, Grey Wolf, and hybrid Genetic-Particle Swarm Optimization algorithms.

روش	A_0	a	B	$-E_a/R$	زمان مورد نیاز (ثانیه)
نهنگ	$e^{-1/2524}$	۰/۱۷۷۳	۱/۰۶۳۹	۱۹۲۷/۵۰	۲/۰۷
ژنتیک	$e^{-1/1836}$	۰/۲۰۱۳	۱/۱۰۱۸	۱۹۱۶/۳۵	۱۵/۴۹
گرگ خاکستری	$e^{-0/5701}$	۰/۱۷۵۸	۱/۰۲۱۸	۱۰۳۷/۴۲	۱/۸۹
ژنتیک - ازدحام ذرات	$e^{-0/1202}$	۰/۱۷۸۳	۰/۹۸۱۴	۱۷۷/۷۵	۲۵/۵۷

باتوجه به نتایج ارائه‌شده در جدول ۴، مشاهده می‌شود که الگوریتم گرگ خاکستری با ثبت زمان ۱/۸۹ ثانیه، سریع‌ترین عملکرد را داشته است. عملکرد مناسب الگوریتم گرگ خاکستری از نظر سرعت همگرایی با نتایج گزارش‌شده در مرجع [۱۳] نیز سازگار است. در مقابل، الگوریتم ترکیبی ژنتیک-ازدحام ذرات با زمان ۲۵/۵۷ ثانیه، بیشترین هزینه محاسباتی را به خود اختصاص داد. همچنین الگوریتم نهنگ با زمان ۲/۰۷ ثانیه، عملکردی بسیار نزدیک به الگوریتم گرگ خاکستری از خود نشان داد. از این‌رو، در شرایطی که سرعت محاسبات نسبت به دقت اولویت داشته باشد، الگوریتم گرگ خاکستری انتخاب مناسبی خواهد بود که منجر به تعیین ضرایب سینتیکی شامل $A_0 = \exp(-0/5701)$ ، $a = 0/1758$ ، $b = 1/0218$ و $-E_a/R = 1037/42$ می‌گردد.

۶- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، چهار الگوریتم بهینه‌سازی فراابتکاری جهت برآورد ضرایب سینتیکی مکانیزم تک‌مرحله‌ای احتراق متان و کاهش مکانیزم دومرحله‌ای به کار گرفته شد. مقایسه عملکرد روش‌ها بر اساس دو معیار ریشه میانگین مربعات خطا و زمان اجرا صورت پذیرفت. نتایج به‌صورت تیتروار در ادامه آورده شده است.

۱- از نظر دقت، الگوریتم نهنگ با مقدار خطای ۰/۰۳۳۲۵ دقیق‌ترین عملکرد و الگوریتم ژنتیک با مقدار ۰/۰۳۸۷۶ ضعیف‌ترین عملکرد را ثبت کردند.

۲- از نظر هزینه محاسباتی، الگوریتم گرگ خاکستری با زمان ۱/۸۹ ثانیه سریع‌ترین همگرایی را داشت، درحالی‌که روش ترکیبی ژنتیک - ازدحام ذرات با ۲۵/۵۷ ثانیه، بیشترین زمان را صرف نمود.

۳- در صورتی‌که حداکثر دقت در تعیین ضرایب سینتیکی مدنظر باشد، استفاده از الگوریتم نهنگ توصیه می‌شود که منجر به تعیین ضرایب $A_0 = \exp(-2/5590)$ و $a = 0/1754$ و $b = 1/1394$ و $-E_a/R = 3541/65$ می‌گردد.

۴- در کاربردهایی که اولویت با سرعت پردازش و کاهش هزینه محاسباتی باشد، الگوریتم گرگ خاکستری گزینه مناسب‌تری است که ضرایب سینتیکی شامل $A_0 = \exp(-0/5701)$ ، $a = 0/1758$ ، $b = 1/0218$ و $-E_a/R = 1037/4186$ را ارائه می‌دهد.

باوجود نتایج مطلوب به‌دست‌آمده، این پژوهش دارای محدودیت‌هایی نیز است. ارزیابی الگوریتم‌ها تنها برای کاهش مکانیزم دومرحله‌ای احتراق متان به مکانیزم تک‌مرحله‌ای انجام شده است؛ ازاین‌رو، تعمیم نتایج به سایر مکانیزم‌های واکنشی مستلزم انجام مطالعات تکمیلی است. همچنین، اگرچه عملکرد الگوریتم‌ها بر اساس ۴۰ اجرای مستقل، انحراف معیار و نمودارهای همگرایی مورد بررسی قرار گرفت، تحلیل حساسیت نسبت به پارامترهای اولیه الگوریتم‌ها و مقایسه با روش‌های کلاسیک بهینه‌سازی در دامنه پژوهش حاضر قرار نداشت و می‌تواند به‌عنوان موضوعی برای تحقیقات آینده مورد بررسی قرار گیرد.

علائم انگلیسی

E_a	انرژی فعال‌سازی واکنش شیمیایی
T	دما
B	فاکتور دما
A	ضریب پیش‌نمایی
$[CH_4]$	غلظت گونه CH_4
$[O_2]$	غلظت گونه O_2
$[CO]$	غلظت گونه CO

منابع و مراجع

- [1] H.K. Versteeg, An introduction to computational fluid dynamics the finite volume method, 2/E, Pearson Education India, 2007.
- [2] N. Sullivan, A. Jensen, P. Glarborg, M.S. Day, J.F. Graciar, J.B. Bell, C.J. Pope, R.J. Kee, Ammonia conversion and NOx formation in laminar coflowing nonpremixed methane-air flames, Combustion and Flame, 131(3) (2002) 285-298.
- [3] S. Logan, The origin and status of the Arrhenius equation, Journal of Chemical Education, 59(4) (1982) 279.
- [4] R. Edelman, O. 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, in: 7th Aerospace Sciences Meeting, 1969, pp. 86.
- [5] I.V. Novoselov, Eight-step global kinetic mechanism on methane oxidation with nitric oxide formation for lean-premixed combustion turbines, University of Washington, 2002.

- [6] C.K. Westbrook, F.L. Dryer, Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, *Combustion science and technology*, 27(1-2) (1981) 31-43.
- [7] J. Bibrzycki, T. Poinso, Reduced chemical kinetic mechanisms for methane combustion in O₂/N₂ and O₂/CO₂ atmosphere, *Work. note ECCOMET WN/CFD/10/17*, CERFACS, (2010).
- [8] D. Nicol, P. Malte, A. Hamer, R. Roby, R. Steele, Development of a five-step global methane oxidation-NO formation mechanism for lean-premixed gas turbine combustion, (1999).
- [9] A. Eshaghi, Z. Pouransari, Optimizing Arrhenius parameters for multi-step reactions via metaheuristic algorithms, *Journal of Mathematical Chemistry*, (2025) 1-28.
- [10] S.R. Turns, *Introduction to combustion*, McGraw-Hill Companies New York, NY, USA, 1996.
- [11] I. Glassman, R.A. Yetter, N.G. Glumac, *Combustion*, Academic press, 2014.
- [12] T. Chai, R.R. Draxler, Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)?–Arguments against avoiding RMSE in the literature, *Geoscientific model development*, 7(3) (2014) 1247-1250.
- [13] C.J. Willmott, K. Matsuura, Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance, *Climate research*, 30(1) (2005) 79-82.
- [14] G. Chen, Z. Ren, H. Sun, Curve fitting in least-square method and its realization with Matlab, *Ordinance industry automation*, 3 (2005) 063.
- [15] C.R. Houck, J. Joines, M.G. Kay, A genetic algorithm for function optimization: a Matlab implementation, *Ncsu-ie tr*, 95(09) (1995) 1-10.
- [16] S. Mirjalili, A. Lewis, The whale optimization algorithm, *Advances in engineering software*, 95 (2016) 51-67.
- [17] S.N. Makhadmeh, M.A. Al-Betar, I.A. Doush, M.A. Awadallah, S. Kassaymeh, S. Mirjalili, R.A. Zitar, Recent advances in Grey Wolf Optimizer, its versions and applications, *Ieee Access*, 12 (2023) 22991-23028.
- [18] Y.-T. Kao, E. Zahara, A hybrid genetic algorithm and particle swarm optimization for multimodal functions, *Applied soft computing*, 8(2) (2008) 849-857.
- [19] F.L. Dryer, I. Glassman, High-temperature oxidation of CO and CH₄, in: *Symposium (International) on combustion*, Elsevier, 1973, pp. 987-1003.