

## YANMA SİSTEMLERİNDE OLUŞAN KARBON PARTİKÜLLERİN HACİM ORANLARININ YAPAY SİNİR AĞLARI İLE MODELENMESİ

Fikret İNAL <sup>1(\*)</sup>, Gökmen TAYFUR <sup>2</sup>

<sup>1</sup> İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Kimya Mühendisliği Bölümü, Urla, 35430 İzmir

<sup>2</sup> İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, İnşaat Mühendisliği Bölümü, Urla, 35430 İzmir

### ÖZET

Yapay sinir ağları (YSA) yaklaşımı kullanılarak atmosferik basınç, yakıtça-zengin, ön karışımli metan, etan, propan ve butan alevlerinde oluşan karbon partiküllerin hacim oranları modellenmiştir. Çalışmada giriş, çıkış ve gizli katmandan oluşan üç katmanlı, ileri beslemeli YSA model kullanılmıştır. Modelde giriş ve gizli katmanda 7 hücre, çıkış katmanında ise 1 hücre bulunmaktadır. Giriş değişkenleri; yakıcı yüzeyinden olan uzaklık, alev sıcaklığı, eşdeğerlik oranı, C/H oranı, yakıt, oksijen ve argon akış hızlarıdır. Deneysel ölçümler ile model tahminleri arasında iyi uyum olduğu gözlenmiştir.

### ABSTRACT

Artificial neural network approach was used to predict the soot volume fractions in atmospheric pressure, fuel-rich, premixed flames of methane, ethane, propane and butane. Three-layer feed-forward type artificial neural network having 7 input and hidden neurons and 1 output neuron was applied in this study. The input variables used in the model were distance from the burner surface, flame temperature, equivalence ratio, C/H ratio, fuel flow rate, oxygen flow rate and argon flow rate. There was a good agreement between the experimental and predicted values.

### ANAHTAR SÖZCÜKLER

Yapay sinir ağları, Partikül hacim oranı, Önkarişımli yanma

### GİRİŞ

Karbon partiküller hidrokarbon yakıtların tam olarak yanmaması sonucu oluşan ve yaklaşık %90 karbon içeren maddelerdir. Bu partiküller bilinen ilk çevresel kanserojenlerdendir. Literatürdeki veriler havadaki karbon partikül konsantrasyonu ile bronşit hastalığı arasında kuvvetli ilişki olduğunu göstermektedir (Barfknecht, 1983). Karbon yüzeyler ayrıca atmosferde SO<sub>2</sub> nun SO<sub>4</sub><sup>-2</sup> ye ve NO nun NO<sub>2</sub> veya NO<sub>3</sub><sup>-</sup> ye dönüşümünde katalitik rol oynamaktadır (Haynes, 1991). En kapsamlı kimyasal kanserojen sınıfı olarak bilinen PAH (Polycyclic Aromatic Hydrocarbons) lar atmosferik koşullarda çoğunlukla partiküllere adsorplanmış olarak bulunurlar. Bu nedenle yanma sistemlerinden çevreye emisyonu gerçekleşen karbon partiküller, adsorplanmış PAH lar için taşınım mekanizması sağlamaktadır.

\* fikretinal@iyte.edu.tr

Çevre ve insan sağlığına olan olumsuz etkilerinden dolayı karbon partiküllerin yanma sistemlerinde oluşumu ve emisyonu birçok araştırmacı tarafından deneysel ve modelleme olarak çalışılmıştır (Wagner, 1978; Harris ve Weiner, 1985; Violi vd., 1999; Richter ve Howard, 2000). Modelleme çalışmalarında genellikle detaylı kimyasal kinetik mekanizmalar (DKKM) kullanılmaktadır (Frenklach vd., 1986; Senkan, 1992). Temel fiziksel ve kimyasal parametreler ile prosesin matematiksel modelinin bileşiminden oluşan bu detaylı kinetik mekanizmalar çok sayıda kimyasal bileşen ve reaksiyon içermektedir. Bu yöntemin başarısı önemli ölçüde modelde kullanılan bileşenlerin termodinamik verilerine ve oluşturulan reaksiyon mekanizmalarının kinetik verilerine bağlıdır. Ancak sözkonusu kinetik ve termodinamik verilere her zaman kolaylıkla ulaşılamamakta veya kullanılan veriler büyük hata oranı içerebilmektedir. DKKM den farklı olarak, Thermocouple Particle Densitometry (TPD) tekniği kullanılarak farklı laminer, önkarişimsız yanma sistemlerinde partikül hacim oranları da hesaplanmıştır (McEnally vd., 1997). Basit bir teknik olan TPD alev sıcaklıklarının ölçümüne dayanmaktadır. Son zamanlarda YSA yaklaşımı birçok toksik madde emisyon tahmini ve diğer çevresel problemlerde başarılı bir şekilde uygulanmıştır. Bu başarının nedeni YSA tekniğinin sahip olduğu paralellik, hata toleransı, öğrenilebilirlik ve gerçekleştirme kolaylığı gibi özelliklerinden kaynaklanmaktadır. Hao vd. (2001), öğütülmüş kömür yakan yakıcılarda  $NO_x$  emisyonunu farklı işletim koşulları ve kömür kaliteleri için YSA model kullanarak tahmin etmiştir. Dizel motorlardan PAH ve partikül emisyonu da yakıt parametrelerinin ve işletim koşullarının fonksiyonu olarak YSA model ile ayrı ayrı modellenmiştir (Duran vd., 2001; De Lucas vd., 2001).

Bu çalışmada önkarişimli, atmosferik basınç, laminer hidrokarbon yanma sistemlerinde oluşan karbon partiküllerin hacim oranları YSA tekniği kullanılarak dört farklı yakıt (metan, etan, propan ve butan) için tahmin edilmiştir. Modelde üç farklı yakıtça-zengin işletim koşulunda (eşdeğerlik oranı (equivalence ratio) =  $(Yakıt/O_2)_{deney} / (Yakıt/O_2)_{stokio.} = 2.4, 2.5$  ve  $2.6$ ) elde edilen deneysel veriler kullanılmıştır.

## MATERYAL VE METOD

### Deneyel Çalışma

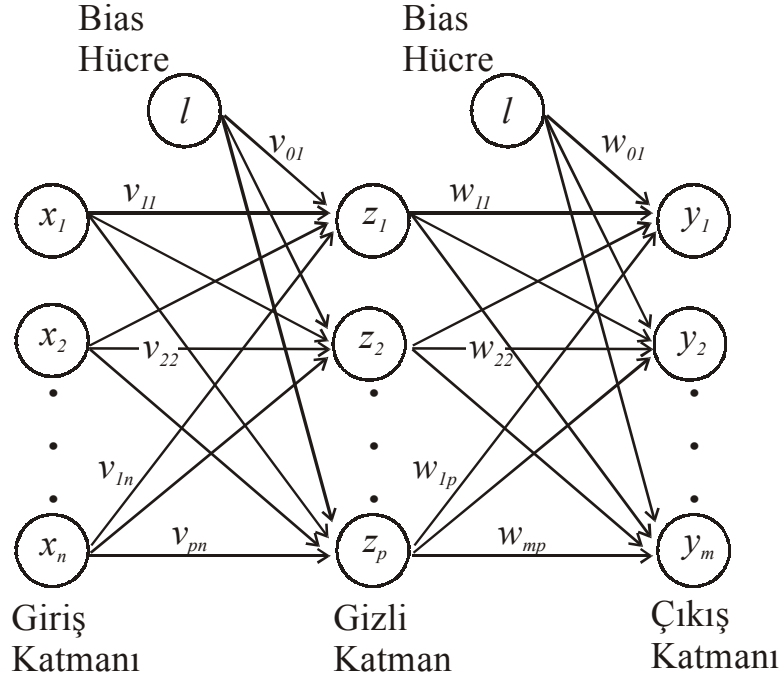
Deney sistemi daha önce detaylı olarak anlatıldığından burada sadece özet bilgi verilecektir (Inal vd., 2001). Atmosferik basınç, laminer, ön karışimli yakıt/ $O_2$ /Ar alevleri 50 mm çaplı gözenekli bronz yakıcı üzerinde stabilize edilmiştir. Yakıcı üzerinde stabilize olan alevi ortamdan korumak için alev etrafından argon gönderilmiştir. Karbon partikül karakterizasyonu için deneysel veriler klasik lazer ışık saçılımı ve kayıp hesaplamaları tekniği kullanılarak elde edilmiştir. Işık kaynağı olarak 514.5 nm dalga boyunda ve 1 W gücünde argon iyon lazer kullanılmıştır.

Alev sıcaklıkları 0.15 mm Pt-13%Rh/Pt ısılıçift kullanılarak ölçülmüş ve her bir ölçümden sonra ısılıçift alevden çekilerek üzerinde biriken partiküller yakılmıştır. Bu çalışmada sunulan alev sıcaklıkları direkt ısılıçift okumalarıdır ve radyasyon kayıpları için düzeltmeleri içermemektedir.

Sıcaklık ve hacim oranı ölçümlerinde, yakıcı dikey yönde aşağı-yukarı hareket ettirilerek yakıcı yüzeyinden olan uzaklıkla değişimler elde edilmiştir. Bu ölçümlerde dikey konumla ilgili hassasiyetin  $\pm 0.2$  mm olduğu hesaplanmıştır.

### YSA Model

Karbon partikül hacim oranları tahmininde giriş, çıkış ve bir tek gizli katmandan oluşan üç katmanlı ve ileri beslemeli YSA model kullanılmıştır (Şekil 1). İleri beslemeli ağlarda giriş



Şekil 1. Üç katmanlı ileri beslemeli YSA

bilgileri giriş katmanındaki hücelere beslenmekte ve daha sonra bu bilgiler bağlantı ağırlıkları ile çarpıldıktan sonra gizli katmandaki hücelere gönderilmektedir. Gizli katmanda bulunan hücelerde, her bir giriş hücresinden gönderilen ağırlıklı bilgilerin toplamı bias hücreden gelen ağırlıklı bilgilerle birleştirildikten sonra (Eşitlik 1) bir aktivasyon fonksiyonundan geçirilerek hücrenin çıktı değeri ( $y$ ) bulunur (Eşitlik 2).

$$net_j = \sum x_i v_{ij} \quad (1)$$

$$y = f(net_j) \quad (2)$$

YSA da giriş ve çıkış bilgileri arasındaki tasvir, aktivasyon fonksiyonu ile yapılmaktadır. Bu çalışmada sigmoid fonksiyonu (Eşitlik 3) aktivasyon fonksiyonu olarak kullanılmıştır. Matematiksel olarak

$$f(net_j) = \frac{1}{1 + e^{-net_j}} \quad (3)$$

şeklinde ifade edilen sigmoid fonksiyonu  $[0, 1]$  aralığında çıkışlar verir. Sürekli bir fonksiyon olan sigmoid özellikle doğrusal olmayan tasvirlerde en çok kullanılan aktivasyon fonksiyonudur.

YSA, herhangi bir probleme uygulanmadan önce eğitilir. YSA'nın eğitiminde, çıkış katmanında bulunan her bir hücrenin hedeflenen çıktıları YSA model çıktıları ile karşılaştırılır, hata veya aradaki fark bağlantı ağırlıklarının ve biasların ayarlanması ile en aza indirilmeye çalışılır. Bağlantı ağırlıklarının değiştirilmesinde geriye yayılma algoritması kullanılmıştır. Geriye yayılma algoritması gizli katman içeren çok katmanlı YSA larda sıklıkla kullanılan bir öğrenme algoritmasıdır. Bu algoritmada iki temel akış vardır: ağırlar üzerinden ileri doğru olan bilgi akışı ve geriye doğru olan hatanın yayılması. İleri doğru akışta o anki bağlantı ağırlıkları kullanılarak model girdilerine karşılık gelen çıktılar elde edilir. Geriye doğru akışta ise

gerçek çıktılar ve öngörülen çıktı değerleri ile hesaplanan hata (Eşitlik 4) geriye doğru yayılarak bağlantı ağırlıkları değiştirilir.

$$E = \sum_P \sum_p (o_i - t_i)^2 \quad (4)$$

Burada  $o_i$ , YSA çıktılarını içeren  $\mathbf{O}$  ( $\mathbf{O} = (o_1, o_2, \dots, o_p)$ ) vektörünün bir bileşenini;  $t_i$ , gerçek çıktılarını içeren  $\mathbf{T}$  ( $\mathbf{T} = (t_1, t_2, \dots, t_p)$ ) vektörünün bir bileşenini;  $p$ , çıktı hücrelerinin sayısını;  $P$  ise eğitime sayısını göstermektedir.

Bağlantı ağırlıklarının hesaplanan hata değeri sonucu güncellenmesinde ise delta öğrenme kuralı (Eşitlik 5) kullanılmıştır.

$$v_{ij}^{\text{yeni}} = v_{ij}^{\text{önceki}} - \delta \frac{\partial E}{\partial v_{ij}} \quad (5)$$

Burada  $\delta$ , öğrenme oranını göstermektedir ve bağlantı ağırlıklarındaki değişme oranını kontrol eder.  $\delta$  için genellikle 0 ile 1 arasında bir değer atanır.

## SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRİLMESİ

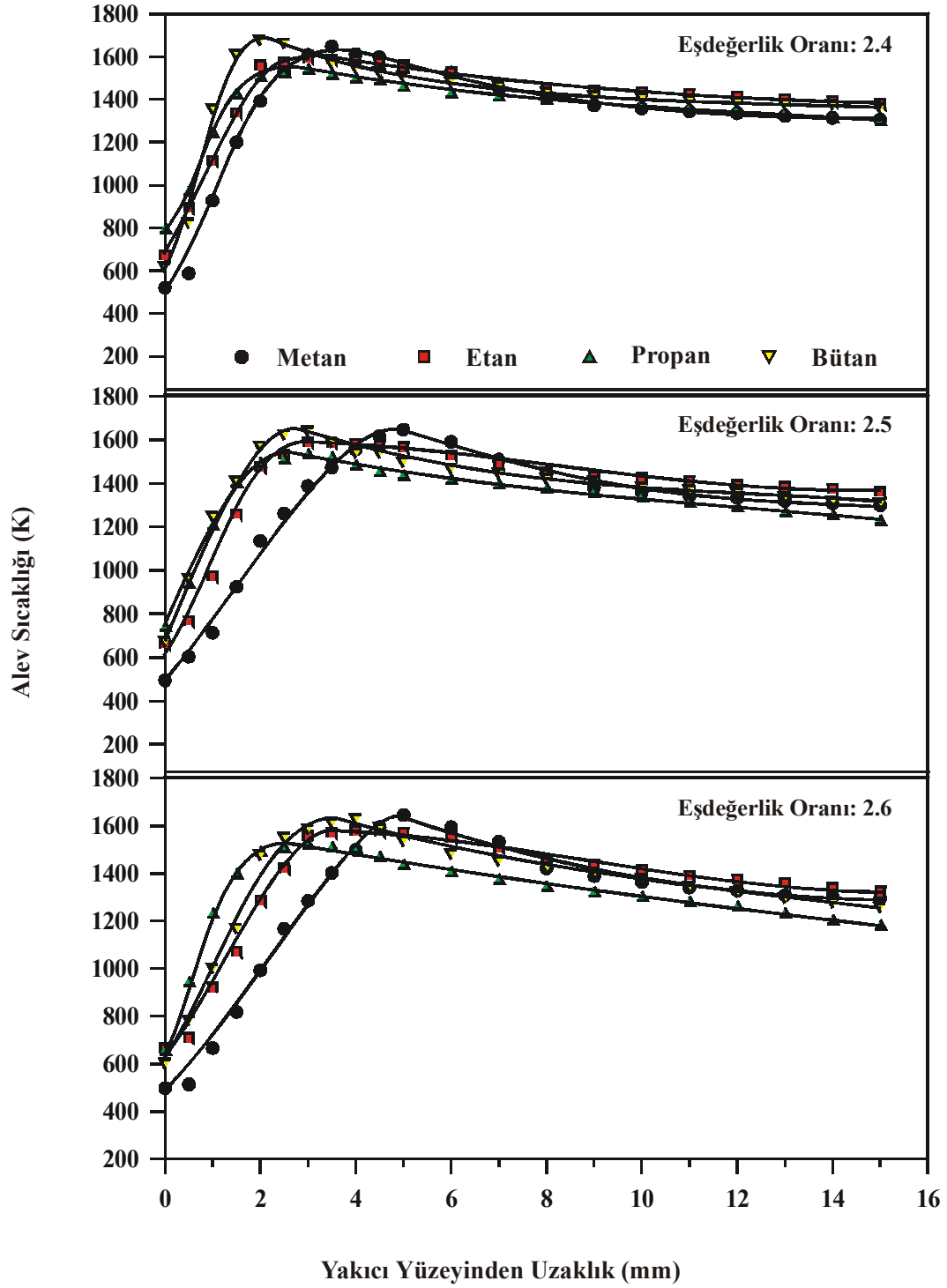
Bu çalışmada incelenen 12 alevin yanma öncesi bileşimleri Tablo 1 de verilmiştir. Kararlı bir alev ve yeterli miktarda partikül oluşumu için bu tabloda sunulan koşullar seçilmiştir.

Alev sıcaklıklarının gözenekli yakıcı yüzeyinden olan uzaklık ile değişimi Şekil 2 de gösterilmiştir. Burada noktalar deneysel verileri çizgiler ise eğilimleri göstermektedir. Herbir yakıt için düşük eşdeğerlik oranına sahip alevler, yüksek yanma hızlarından dolayı yakıcı yüzeyine daha yakın konumdadırlar. Buna karşılık eşdeğerlik oranı 2.6 olan alevler ise düşük yanma hızlarından dolayı yakıcı yüzeyinden uzaktadırlar. Karbon partikül oluşumunun gözlemlendiği yakıtça-zengin alevlerde sıcaklık ölçümünde karşılaşılan en önemli problemlerden biri ısılcıft üzerinde partikül birikmesidir. Hernekadar sıcaklık ölçümleri sırasında ısılcıft

**Tablo 1.** Çalışmada incelenen 12 alevin yanma öncesi bileşimleri \*

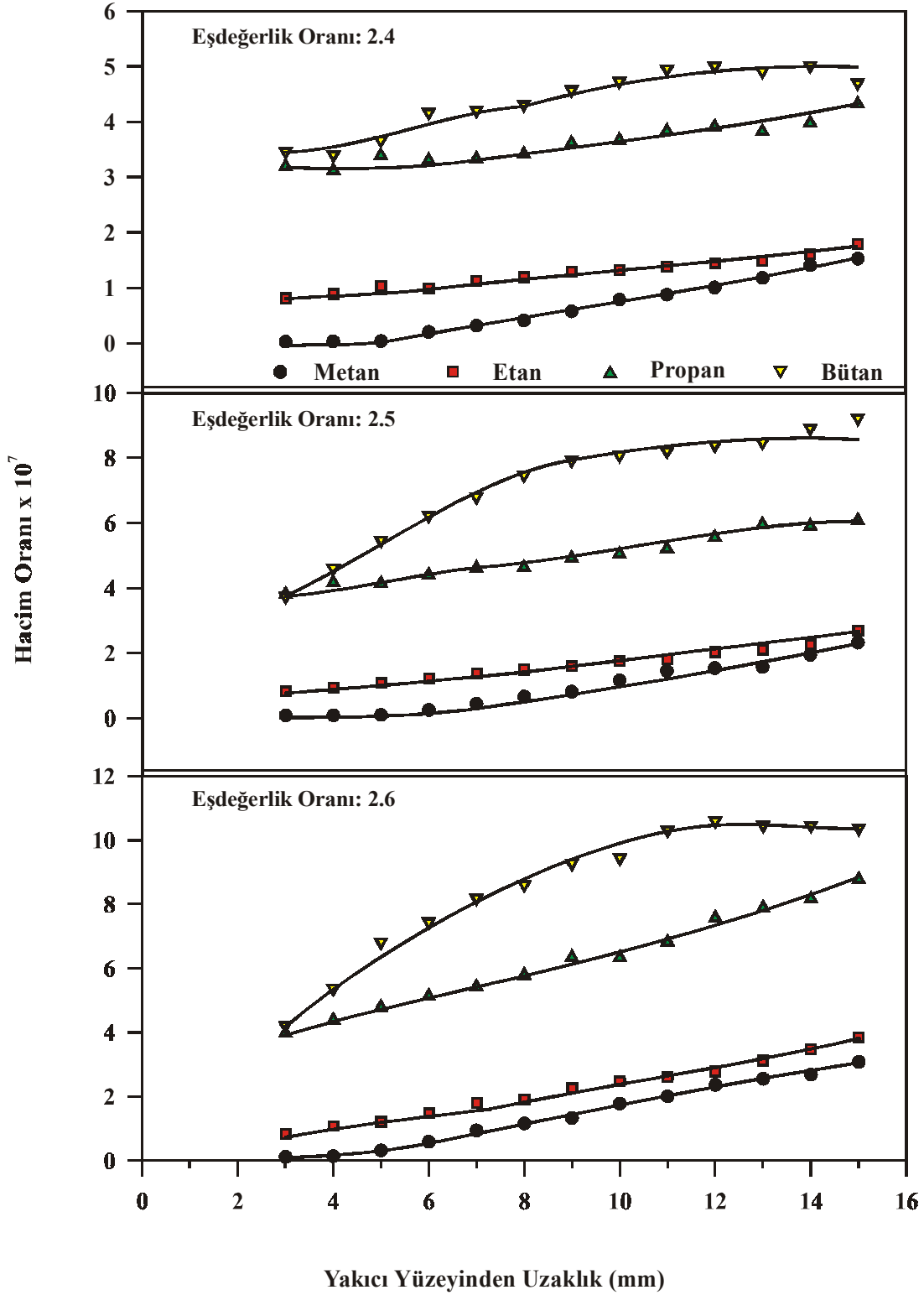
	Metan	Etan	Propan	Bütan
<b>Eşdeğerlik oranı: 2.4</b>				
Yakıt (% mol)	29.98	22.38	17.83	14.82
Oksijen (% mol)	25.04	32.59	37.15	40.17
Ar (% mol)	44.98	45.03	45.02	45.01
Toplam akış hızı (l/dak.)	6.27	7.64	6.73	7.22
<b>Eşdeğerlik oranı: 2.5</b>				
Yakıt (% mol)	30.57	22.92	18.32	15.29
Oksijen (% mol)	24.39	32.04	36.64	39.71
Ar (% mol)	45.04	45.04	45.04	45.00
Toplam akış hızı (l/dak.)	6.15	7.46	6.55	7.00
<b>Eşdeğerlik oranı: 2.6</b>				
Yakıt (% mol)	31.07	23.46	18.81	15.71
Oksijen (% mol)	23.97	31.55	36.21	39.35
Ar (% mol)	44.96	44.99	44.98	44.93
Toplam akış hızı (l/dak.)	6.05	7.29	6.38	6.81

\* 25 C ve 1 atm de hesaplanmıştır.



Şekil 2. Alev sıcaklıkları

temizlenmeye çalışıldı ise de yakıcı yüzeyinden yüksek uzaklıklarda partikül birikimi kaçınılmaz olmuştur. Önceki çalışmalar ısıçift üzerinde oluşan bu birikimin daha düşük sıcaklık okumalarına (50 C a kadar) neden olduğunu göstermiştir (Castaldi vd., 1995). Karbon partikül hacim oranları Rayleigh saçılımı yaklaşımı kullanılarak hesaplanmıştır. Bu yaklaşımda partiküllerin küresel ve büyüklüklerinin kullanılan ışığın dalga boyundan daha küçük olduğu kabul edilmektedir. Rayleigh yaklaşımının hacim oranının belirlenmesinde ihmal edilebilir hata verdiği daha önceki çalışmalarda gösterilmiştir (Koylu, 1996). Karbon



Şekil 3. Deneysel karbon partikül hacim oranları

partikül hacim oranlarının yakıcı yüzeyinden olan uzaklık ile değişimi Şekil 3 de verilmiştir. Şekilden de görüleceği üzere herbir yakıt için hacim oranları veya partikül miktarları yakıcı yüzeyinden olan uzaklıkla artmaktadır. Eşdeğerlik oranı 2.6 alevleri için hacim oranları metan, etan, propan ve bütan alevlerinde sırası ile  $3.08 \times 10^{-7}$ ,  $3.84 \times 10^{-7}$ ,  $8.78 \times 10^{-7}$  ve

$10.36 \times 10^{-7}$  olarak bulunmuştur. Alev sıcaklıklarının etkisi nedeni ile düşük eşdeğerlik oranlarında daha az karbon partikül oluşumu gözlenmiştir. Sıcaklık, önkarişimli alevlerde iki prosesi etkilemektedir: partikül oluşumuna neden olan bileşikler oluşturarak yakıt ara ürünlerinin piroliz hızı ve bu bileşiklerin oksidasyon (genelde OH radikalleri ile) hızı (Glassman, 1988). Bu her iki prosesinde hızı sıcaklıkla artmaktadır. Ancak partikül oluşturarak bileşiklerin oksidasyon hızındaki artış daha fazladır. Bu nedenle yüksek alev sıcaklıklarında daha az partikül oluşumu gerçekleşmektedir. Ayrıca, beklenildiği gibi, incelenen yakıtlarda C/H oranındaki artış partikül hacim oranlarını artırmıştır.

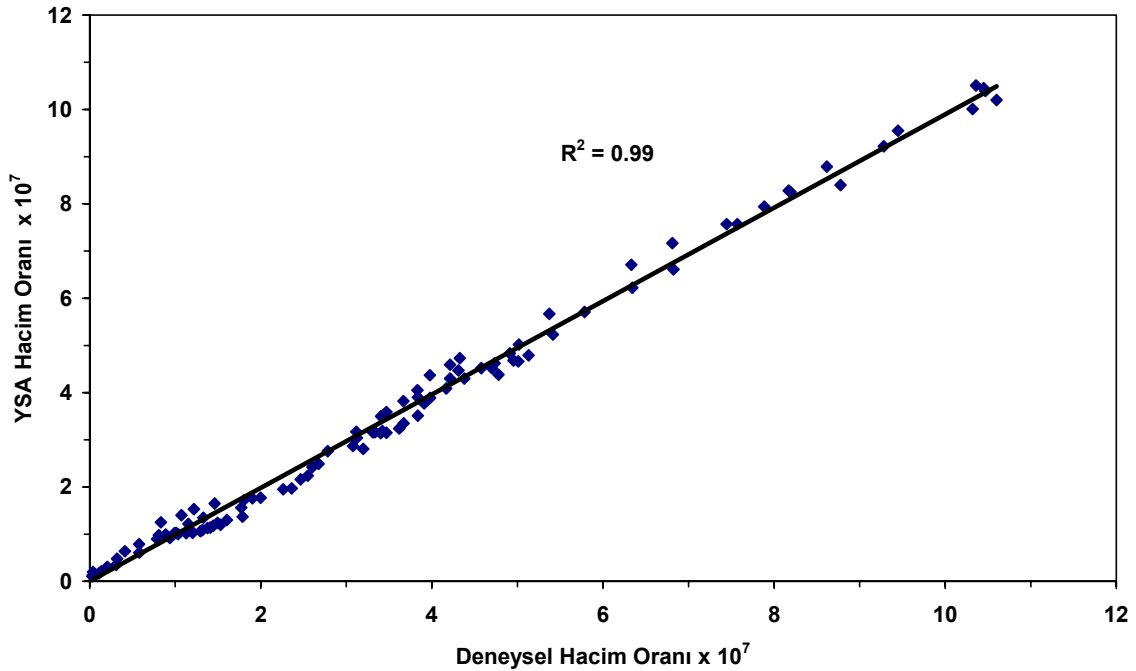
YSA ile modellemede giriş ve çıkış katmanlarındaki hücre sayıları üzerinde çalışılan problemin yapısına bağlıdır. Bu nedenle giriş katmanında, yakıcı yüzeyinden olan uzaklık, alev sıcaklığı, eşdeğerlik oranı, C/H oranı, yakıt, oksijen ve argon akış hızları için 7 hücre, çıkış katmanında ise partikül hacim oranı için birtek hücre kullanılmıştır. Gizli katmandaki hücre sayısı genelde istenilen doğruluk derecesine bağlı olduğundan yapılan denemelerden bu sayı en iyi sonucu vermesi nedeni ile 7 olarak belirlenmiştir.

Geliştirilen YSA modelin performansı iki farklı koşul için araştırılmıştır:

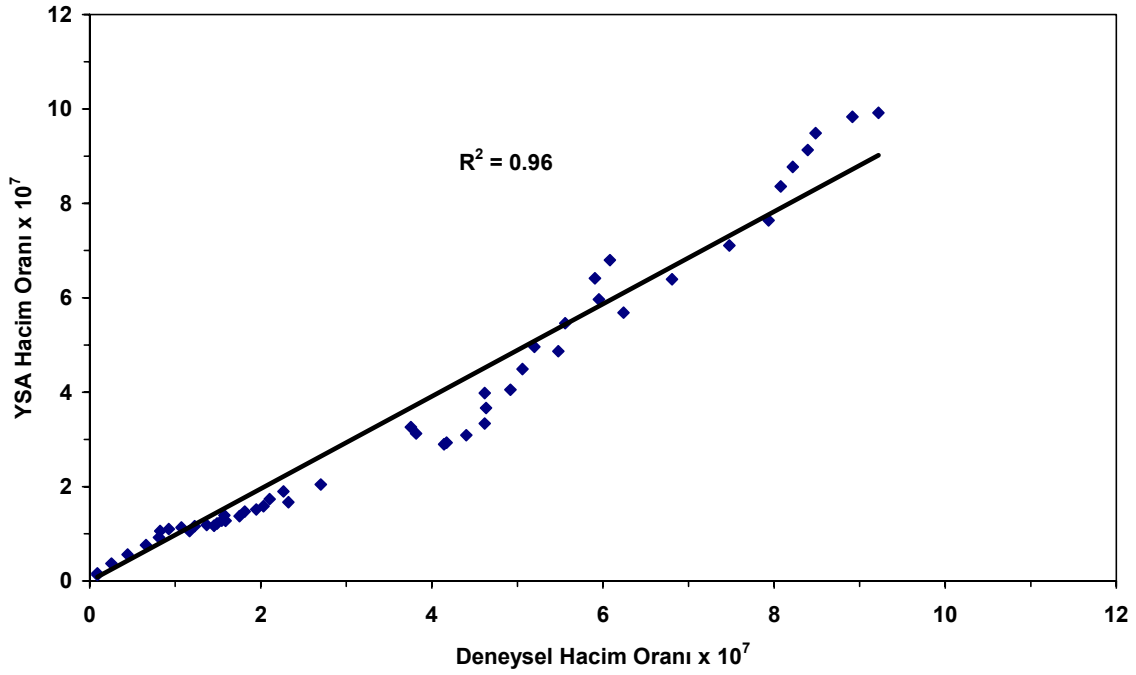
- (1) Metan, etan, propan ve bütan alevlerinin 2.4 ve 2.6 eşdeğerlik oranları için ölçülen deneysel verileri kullanılarak bu alevlerde eşdeğerlik oranı 2.5 için partikül hacim oranları tahmin edilmiştir.
- (2) Metan, etan ve propan alevlerinin eşdeğerlik oranı 2.4, 2.5 ve 2.6 için ölçülen deneysel verileri kullanılarak bütan alevinin aynı eşdeğerlik oranlarındaki partikül hacim oranları tahmin edilmiştir.

Toplam 156 veri seti YSA modelin eğitiminde ve test edilmesinde kullanılmak üzere iki guruba ayrılmıştır. Birinci koşulda eğitim ve test işlemlerinde sırası ile 104 ve 52 set bulunurken ikinci koşulda 117 ve 39 veri seti kullanılmıştır.

YSA modelin tahmin ettiği hacim oranları ile deneysel veriler Şekil 4 de birinci koşul için gösterilmiştir. Deneysel verilerle YSA model tahminleri arasındaki saçınma değerleri ( $R^2$ ) eğitim ve test setleri için sırası ile 0.99 ve 0.96 olarak bulunmuştur. Ayrıca test seti için ortalama mutlak hata %17.36 olarak hesaplanmıştır.

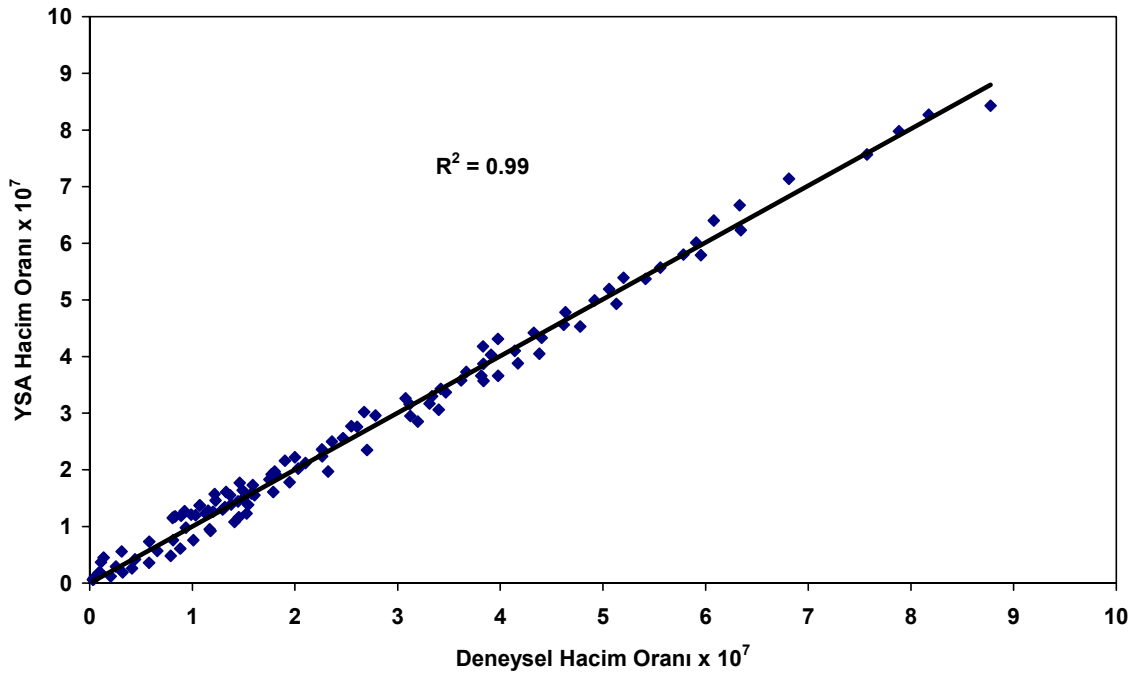


Şekil 4. (a) Birinci koşul için deneysel ve YSA hacim oranları - Eğitim seti



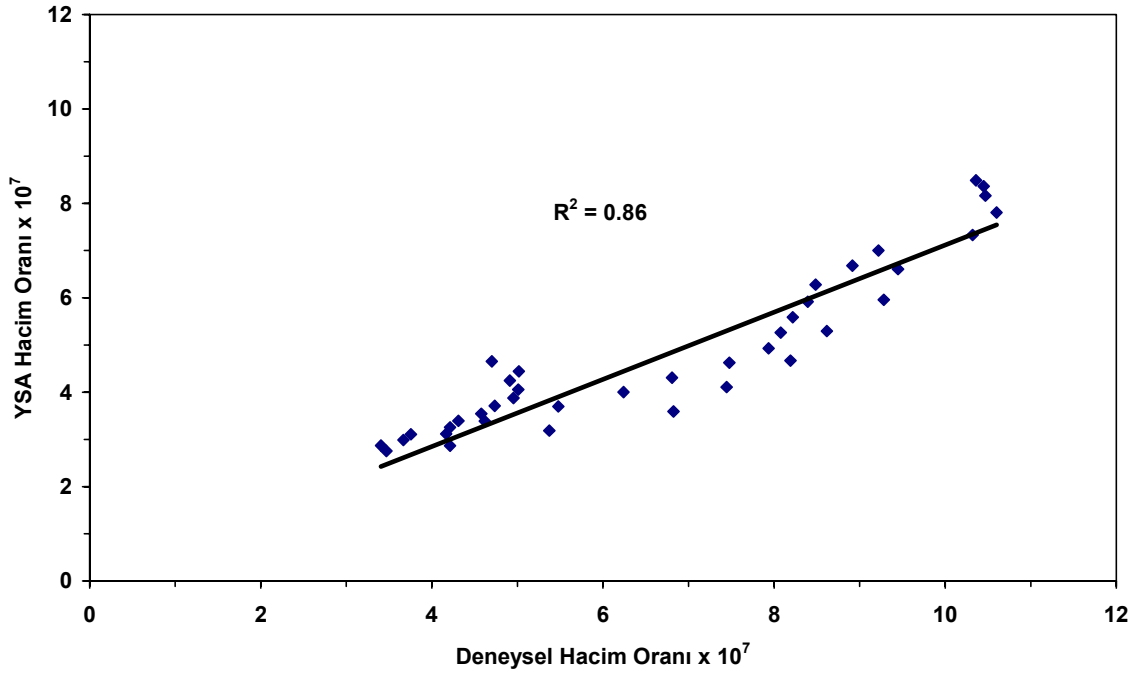
Şekil 4. (b) Birinci koşul için deneysel ve YSA hacim oranları - Test seti

İkinci koşulda saçınma değerleri eğitim ve test setleri için sırası ile 0.99 ve 0.86 olarak bulunmuştur (Şekil 5). Ortalama mutlak hata bu koşulda bir öncekine göre daha yüksek hesaplanmıştır (%27.15). Bu yüksek hata oranının ikinci koşulda tahmin edilen bütan değerlerinin YSA model eğitiminde kullanılan veri seti aralığının dışında olması nedeninden kaynaklandığı düşünülmektedir.



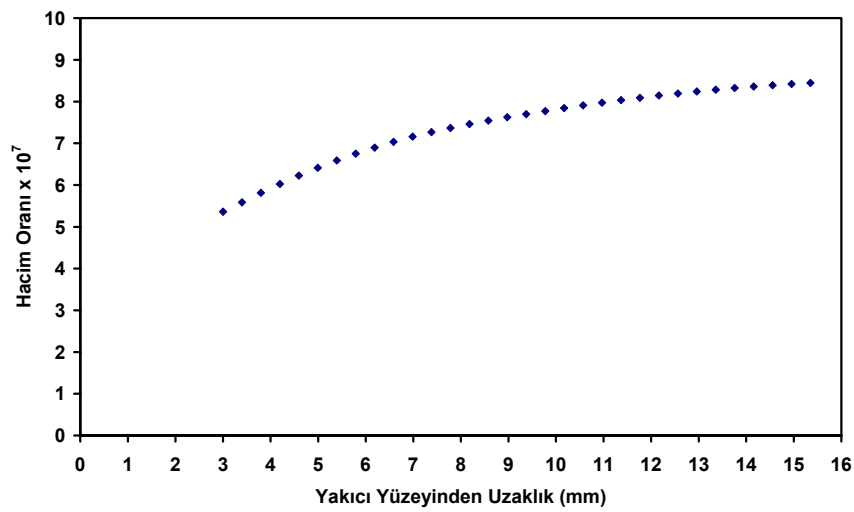
Şekil 5. (a) İkinci koşul için deneysel ve YSA hacim oranları - Eğitim seti



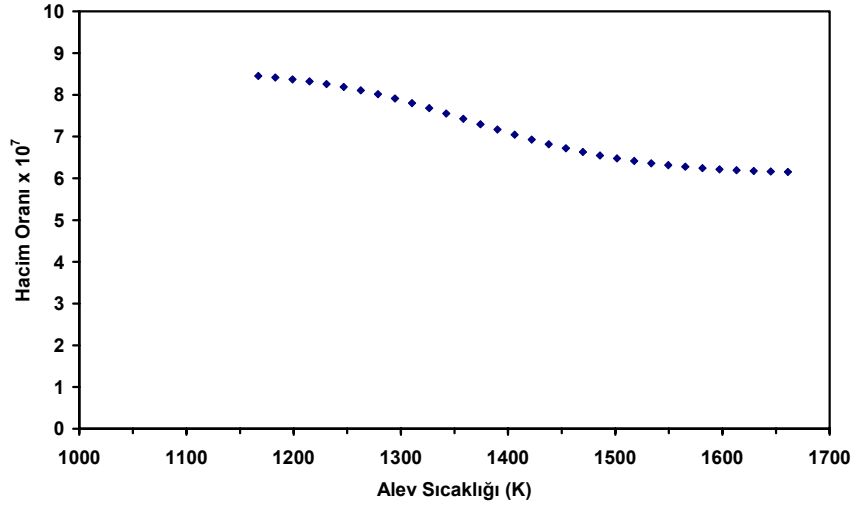


Şekil 5. (b) İkinci koşul için deneysel ve YSA hacim oranları - Test seti

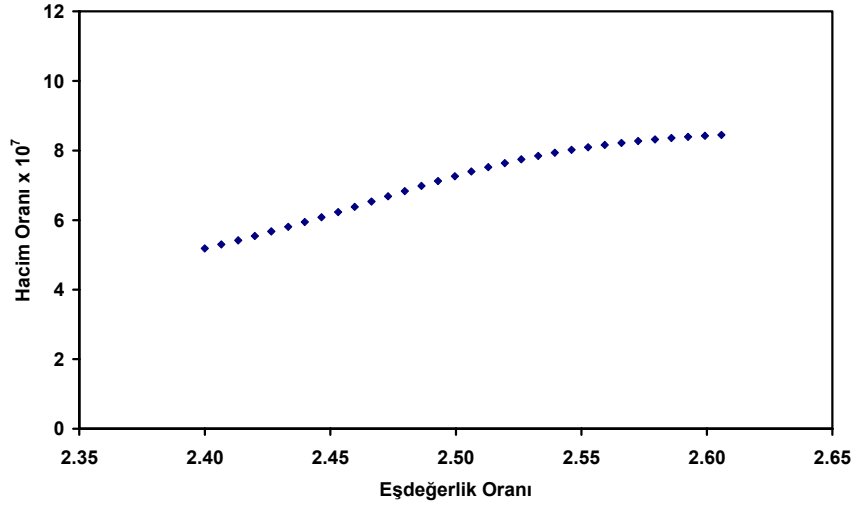
Bu çalışmada ayrıca YSA modelde kullanılan her bir giriş değişkeninin çıkış değişkeni olan partikül hacim oranı üzerine etkileri de incelenmiştir. Sonuçlar, çıkış değişkeni üzerinde en çok etkiye sahip giriş değişkenlerinin yakıcı yüzeyinden olan uzaklık, alev sıcaklığı, eşdeğerlik oranı ve C/H oranı olduğunu göstermiştir (Şekil 6 – Şekil 9). Gözenekli yakıcı yüzeyinden olan uzaklığın artması ile partikül hacim oranının arttığı (Şekil 6) alev sıcaklığındaki artmanın ise daha önce açıklandığı üzere hacim oranını veya partikül miktarını azalttığı gözlenmiştir (Şekil 7). Eşdeğerlik ve C/H oranlarındaki artışlar partikül hacim oranlarını artırmıştır (Şekil 8, Şekil 9).



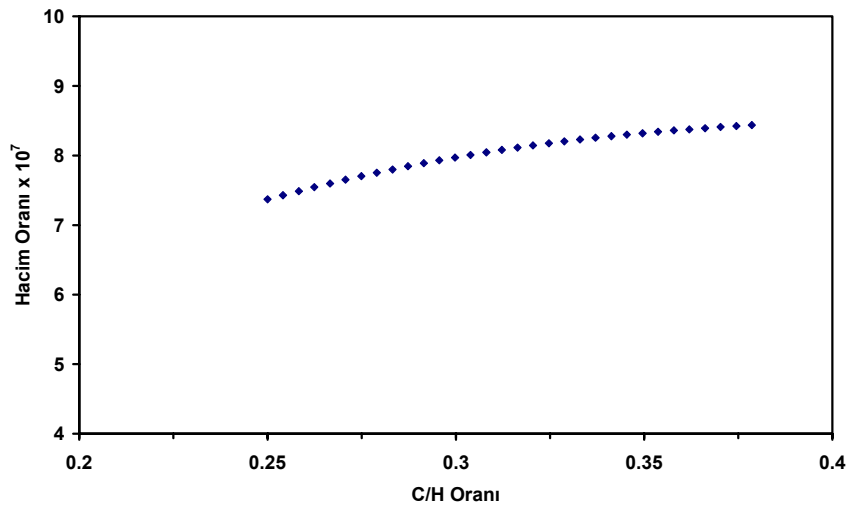
Şekil 6. Hacim oranının yakıcı yüzeyinden uzaklıkla değişimi



Şekil 7. Hacim oranının alev sıcaklığı ile değişimi



Şekil 8. Hacim oranının eşdeğerlik oranı ile değişimi



Şekil 9. Hacim oranının C/H oranı ile değişimi

Sonuç olarak, YSA yaklaşımı yanma sistemlerinde oluşan karbon partiküllerin hacim oranlarının tahmininde başarılı bir şekilde uygulanmıştır. Deneysel ölçümlerle YSA model tahminlerinin uyumlu olduğu gözlenmiştir. Geliştirilen model, duyarlık (sensitivity) analizi sayesinde model giriş değişkenlerinin çıkış değişkenini nasıl etkilediğini de göstermiştir.

## KAYNAKLAR

- Barfknecht, T.R. Toxicology of soot, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 9, 199, 1983.
- Baumgartner, L., Hesse, D., Jander, H., Wagner, H.G.G. Rate of soot growth in atmospheric premixed laminar flames, *Proc. Combust. Inst.*, 20, 959, 1984.
- Castaldi, M.J., Vincitore, A.M., Senkan, S.M. Micro-structures of premixed hydrocarbon flames: methane, *Combust. Sci. and Tech.*, 107, 1-19, 1995.
- De Lucas, A., Duran, A., Carmona, R., Lapuerta, M. Modeling diesel particulate emissions with neural networks, *Fuel*, 80, 539, 2001.
- Duran, A., De Lucas, A., Carmona, M., Ballesteros, R. Simulation of atmospheric PAH emissions from diesel engines, *Chemosphere*, 44, 921, 2001.
- Frenklach, M., Clary, D.W., Gardiner, W.C., Stein, S.E. Effect of Fuel structure on pathways to soot, *Proc. Combust. Inst.*, 21, 1067-1076, 1986.
- Glassman, I. Soot formation in combustion processes, *Proc. Combust. Inst.*, 22, 295-311, 1988.
- Hao, Z., Kefa, C., Jianbo, M. Combining neural network and genetic algorithms to optimize low NO<sub>x</sub> pulverized coal combustion, *Fuel*, 80, 2163, 2001.
- Harris, S.J., Weiner, A.M. Chemical kinetics of soot particle growth, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 36, 31, 1985.
- Haynes, B.S. Soot and hydrocarbons in combustion. *Fossil Fuel Combustion*, ed. W. Bartok, A.F. Sarofim, 261-327, Wiley Interscience, New York, 1991.
- Inal, F., Melton, T.R., Senkan, S.M. Effects of fuel type and equivalence ratio on soot formation in premixed hydrocarbon flames, *Proc. of the Second Int. Symp. on Air Quality Management at Urban, Regional, and Global Scales*, 263-269, 25-28 September 2001, Istanbul, Turkey.
- Koylu, U.O. Quantitative analysis of in situ optical diagnostics for inferring particle/aggregate parameters in flames: implications for soot surface growth and total emissivity, *Combust. Flame*, 109, 488-500, 1996.
- McEnally, C.S., Koylu, U.O., Pfefferle, L.D., Rosner, D.E. Soot volume fraction and temperature measurements in laminar nonpremixed flames using thermocouples, *Combust. Flame*, 109, 701, 1997.
- Richter, H., Howard, J.B. Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and their growth to soot-A review of chemical reaction pathways, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 26, 565, 2000.
- Senkan, S.M. Detailed chemical kinetic modeling: Chemical reaction engineering of the future, *Advances in Chemical Engineering*, 18, 95, 1992.
- Violi, A., D'Anna, A., D'Alessio, A. Modeling of particulate formation in combustion and pyrolysis, *Chemical Engineering Science*, 54, 3433, 1999.
- Wagner, H.G.G. Soot formation in combustion, *Proc. Combust. Inst.*, 17, 3, 1978.