**基于机器学习的二甲醚层流燃烧速度预测研究**

许凡1，陈朝阳1，李昭1，李倩倩2

(1.长安大学汽车学院，西安，710064；2. 西安交通大学能源与动力工程学院，西安，710049)

摘要：为了明确二甲醚层流燃烧速度与混合气初始条件（温度、压力、当量比）之间的关系，基于大量的实验及数值模拟数据，利用机器学习多变量回归算法，建立了二甲醚/空气预混层流燃烧速度随初始条件的拟合关系式。通过与文献及数值模拟结果的对比，发现所建立的函数关系式能够在0.8-1.4当量比、298 K-373 K初始温度和0.1 MPa-1.0 MPa初始压力范围内得到准确的二甲醚层流燃烧速度预测结果。二甲醚层流燃烧速度随初始压力呈负指数关系，随初始温度呈正指数关系，化学当量比时，压力和温度指数的绝对值较小，随混合气变浓或变稀，压力和温度指数的绝对值增大，表明二甲醚层流燃烧速度随初始压力的增大而减小，随初始温度的升高而增大，且在较浓或者较稀的混合气条件下，层流燃烧速度随初始压力和温度的变化更为敏感。本文研究结果可以为二甲醚发动机数值模拟提供简单准确的层流燃烧速度输入数据，从而节约研究成本和计算时间。

关键词：层流燃烧速度；二甲醚；模型预测；机器学习；多变量回归

**Predictions on Laminar Burning Velocity of Dimethyl Ether/Air Mixtures Using Machine Learning**

Xu Fan1, Chen Zhaoyang1, Li Zhao1, Li Qianqian2

1. School of Automobile, Chang’an University, Xi’an 710064, China,
2. School of energy and power engineering, Xi’an Jiaotong University, Xi’an 710049）

**Abstract:** In order to determine the relationship between laminar burning velocity of dimethyl ether/air mixture and the initial conditions (temperature, pressure, equivalence ratio), the calculation formula of laminar burning velocity of dimethyl ether/air mixture was founded using multivariate regression algorithm of machine learning based on the data of experimental and simulated laminar burning velocities of dimethyl ether/air mixtures. By comparing with the results of literatures and numerical simulation, it is found that the founded formula can accurately predict the laminar burning velocity of dimethyl ether/ air mixture under conditions with equivalence ratio range of 0.8-1.4, initial pressure range of 0.1MPa-1.0MPa and initial temperature range of 298K-373K. Laminar burning velocity of DME has negative exponent relation with initial pressure, while has positive exponent relation with initial temperature. This indicates the decrease in laminar burning velocity of DME with the increase of initial pressure and the increase in laminar burning velocity of DME with the increase of initial temperature. The absolute value of the pressure or temperature index is smaller at the stoichiometry condition, and the value increases as the mixtures become richer or leaner, indicating a higher sensitivity of laminar burning velocity of DME to the initial pressure or initial temperature change under the richer or leaner conditions. The results of this study can provide a simple and accurate input data of burning velocity for the numerical simulation of DME engines, saving research costs and calculation time.

**Key words:** laminar burning velocity; dimethyl ether; model prediction; machine learning; multivariate regression

目前，化石燃料仍然是我国车用发动机的主要动力来源，随着汽车保有量的逐年增长，由此引发的能源短缺和环境污染问题日益突出。寻找清洁替代燃料和开发内燃机高效低污染燃烧技术是目前发动机领域的研究热点。二甲醚（DME）来源广泛，十六烷值高，燃烧清洁，是柴油机燃料的良好替代产品和添加剂[1-2]。

层流燃烧速度是燃料的基本燃烧特性参数之一，是湍流燃烧研究的基础，也是发动机数值模拟研究的基础输入参数，对燃料的层流燃烧速度进行准确测定和预测对实际燃烧器设计和改进有非常重要的意义。近年来，各国学者用多种不同方法对二甲醚/空气预混合气的层流燃烧速度进行了测定[3-9]，得到了大量的实验数据，这些数据也促使了二甲醚详细化学反应机理的建立和完善[10-12]。然而，由于层流燃烧速度与初始条件之间存在复杂的非线性关系，尽管二甲醚的层流燃烧数据很多，但宽广条件下层流燃烧速度与初始条件的定量关系并不明确，燃烧分析软件结合详细化学反应动力学机理能够对混合气的二甲醚层流燃烧速度进行较为准确的预测，但与发动机数值模拟软件耦合运算时需要耗费大量的时间和内存而影响计算效率。发动机燃烧模拟一直是个难题，缸内实际条件复杂，局部温度、压力、当量比变化多端，与基础实验工况差别较大，局部燃烧速度难以确定，插值计算可能造成较大的误差。因此有必要建立简单准确的层流燃烧速度的预测方法，以满足数值模拟的要求。

机器学习在处理非线性问题方面有特别的优势，近年来被广泛用于工程技术领域中各类复杂问题的研究[13-14]。本文基于大量的二甲醚层流燃烧速度实验数据及详细化学反应机理模拟结果，用机器学习多变量回归算法，建立二甲醚层流燃烧速度与主要初始条件当量比、初始压力和初始温度之间的准确的函数关系式，以得到宽广条件下二甲醚层流燃烧速度预测值，为二甲醚发动机数值模拟提供简单准确的输入参数。

1 研究方法介绍

**1.1 层流燃烧速度分析式的建立**

层流预混火焰在可燃气体中的传播是最简单的燃烧现象，但其涉及的化学动力学反应以及能量和组分的扩散等传热传质过程相当复杂，因此，很难得到其燃烧特性的准确解析式。为了考察层流火焰的燃烧特性与燃烧参数之间的关系，必须对基本守恒方程进行一系列的假设和简化，最终得到层流燃烧速度的简单模型。根据一般反应原理，化学反应速率对温度呈阿累尼乌斯依赖关系，当量比、初始温度等的变化对绝热火焰温度有重要影响，从而影响火焰传播速度；初始压力则是通过反应速率、热扩散系数以及未燃气体的密度等影响火焰传播速度。Mahdi等人[4]用定容球形火焰法在发动机相关温度和压力下测量了二甲醚空气混合气的层流燃烧速度，并对数据进行整理，拟合得到如下关系式：

 (1)

其中，为层流燃烧速度，和分别为混合气的初始温度和压力，是压力为、温度为的参考条件下的层流燃烧速度。*γ*和*β*分别为层流燃烧速度的温度和压力指数，用最小二乘法拟合得到，在文献实验条件范围内，这两个指数分别取值为、；Metghalchi等人[15]通过实验确定了各种燃料-空气混合物在内燃机和燃气轮机中典型温度和压力条件下的层流火焰传播速度，并根据实验数据，拟合出了层流火焰传播速度与初始燃烧参数之间的经验公式：

 （2）

其中，为参考温度、参考压力下的层流燃烧速度，温度指数*γ*和压力指数*β*分别为当量比*ϕ*的一次函数，为混合物中稀释剂的质量分数。研究表明，对甲醇、丙烷、异辛烷，以上关系式在实验涉及的条件下有较好的适应性[15]。

本文基于宽广条件下的二甲醚/空气层流燃烧速度文献数据和文献[15]中的拟合关系式（2），利用机器学习多变量回归算法，确定了适用于二甲醚层流燃烧速度计算的函数关系式，为了得到更为准确的函数关系式，本文采用如下当量比的三次函数来描述温度和压力指数。

 （3）

 （4）

 （5）

**1.2多变量线性回归算法**

回归算法是机器学习中最常见也应用最广的一种算法，回归算法中试图采用对误差的衡量来探索变量之间的关系。在机器学习领域，回归算法有很多种，其中最为常用的算法是线性回归算法，线性回归是一种监督学习，用自变量与因变量的数据集来训练函数关系式，如下式（6）：

（6）

式中，为训练得出的参数值，分别代表从1到*n*个变量。由（2）式可知，本文所要训练得到的多项式为指数相乘的函数式，与式（6）形式完全不同，同时由于本文研究的是零掺混条件下的二甲醚层流燃烧速度，所以（2）式中关于混合气稀释的部分不予考虑，得到函数式（7）

 （7）

对（7）式两边同时取对数，得到如下表达式：

 （8）

代价函数（8）用于描述预测值与实际值之间的差值，代价函数值越小，说明训练得到的函数关系式预测越准确，线性回归训练的目的就是找到代价函数的最小值。

 （8）

本文利用梯度下降算法进行预测函数求取，原理是不断寻找参数组合使代价函数值不断朝其最小值逼近，直至代价函数值收敛到全局最小，当变量*n*大于等于1时，求导之后，参数的梯度下降算法如下所示：

,（同步更新，j=0,1,,*n*） （9）

**1.3 数据样本的建立**

目前，针对二甲醚层流燃烧特性的研究开展了很多。陈朝阳等人利用定容燃烧弹球形扩展火焰法对不同初始温度和压力下的二甲醚/空气预混合气的层流燃烧速度进行了实验测定[16]，获得了丰富实验数据，并验证了Zhao等人发展的二甲醚详细化学反应机理[10]。本文选取文献[16]中的实验值作为机器学习的基础样本数据，同时，为了扩充样本数据，利用CHEMKIN Ⅱ数值模拟软件[18]及Zhao等人发展的二甲醚详细化学反应机理[10]对实验温度压力范围内其它条件下的二甲醚/空气预混层流燃烧速度进行了模拟计算，最终得到133组Chemkin模拟样本，与35组实验样本一起，作为机器学习的训练及测试样本集。

2结果分析

基于样本库中的35组实验值和133组模拟数值，对公式（8）所表述的多变量回归问题进行求解。训练得出各项系数，如表1所示：

表1 拟合系数表

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | -110.78 |  | 0.5456  |  | 0.1601  |
|  | 296.89 |  | 4.7290  |  | -2.2566  |
|  | -144.13 |  | -6.1276  |  | 3.0905  |
|  | 4.1161 |  | 2.5684  |  | -1.2758  |

**2.1模型评价**

图1给出了研究中涉及的298 K-373 K初始温度，0.1 MPa-0.6 MPa初始压力，0.8-1.4当量比范围内的168组二甲醚层流燃烧速度样本值与本文预测值的对比。由图可知，预测值与样本值拟合良好（拟合度），最大误差为±3.5cm/s，均方差（MSE）为1.02，表明模型对样本数据进行了很好的预测，模型准确性良好。



图1二甲醚层流燃烧速度样本值与预测值对比

图2给出了在初始压力为0.1 MPa，初始温度为298 K时二甲醚层流燃烧速度的样本值、预测值与文献值的对比[3,5-7,19]。可以看出，本文的预测值与样本数据得到了良好的吻合，但与文献值存在一定差异。这主要是由研究方法的不同而引起，吴昊等人的研究中也有类似报导[19]。本文预测值与样本值在稀混合气条件时略高于文献值，且与Zhao等人的实验结果较为接近，在浓混合气时与Daly等人定容燃烧弹实验数据更为接近，且处于各文献值平均值附近，说明本文研究的预测模型可以有效预测常温常压附近的二甲醚/空气预混气体的层流燃烧速度。



图2 二甲醚层流燃烧速度预测值与样本值及文献值的对比

**2.2高压条件下模型预测评价**

图3给出了高压条件下（*p*0=1.0 MPa，*T*0=298K），二甲醚/空气混合气预混层流燃烧速度的模型预测值、基于Zhao等人机理[10]的Chemkin模拟值以及文献值的对比[3,17]。由图可知，在高压条件下，模型预测值与Zhao等人机理的Chemkin模拟值仍然达到了良好的吻合，与Vries等人[17]定容燃烧弹法测得的二甲醚层流燃烧速度值也非常接近。本文预测值与Qin等人[3]的文献值有些差异，但总体趋势相近，表明本文建立的预测模型对1.0 MPa的初始压力仍然有较好的适应性。



图3高压条件下二甲醚层流燃烧速度的预测值与Chemkin模拟值及文献值对比

**2.3初始温度和压力对层流燃烧速度的影响**

图4给出了初始温度*T*0=298 K，当量比分别为0.8、1.0和1.2时，二甲醚/空气混合气预混层流燃烧度随初始压力的变化关系，其中，数据点代表基于Zhao机理的Chemkin模拟值，曲线代表本文多项式的模型预测值。从图中可以看出，对于三个当量比，在10个大气压力以内，模型预测值都与Chemkin模拟值得到了良好的吻合，说明本文模型多项式可以预测较宽压力范围内的二甲醚层流燃烧速度；三个当量比下，层流燃烧速度曲线随初始压力增大都呈现指数下降的趋势，其压力指数分别为-0.3205（*φ* = 0.8）、-0.2818（*φ* = 1.0）和-0.3021（*φ* = 1.2），表明初始压力对层流燃烧速度呈负指数影响关系；在初始压力较小时，层流燃烧速度随初始压力增大减小的幅度较大，随着初始压力增大，层流燃烧速度减小的幅度逐渐减小；化学当量比时，压力指数绝对值较小，随着混合气变浓或者变稀，压力指数绝对值都会增大，表明在较浓或者较稀的混合气条件下，层流燃烧速度对压力变化更为敏感。



图4 二甲醚层流燃烧速度随初始压力的变化关系

图5给出了在初始压力*p*0 = 0.1 MPa，当量比分别为0.8、1.0和1.2时二甲醚/空气预混合气的层流燃烧速度随温度变化的关系。其中，数据点代表样本数据，曲线代表模型预测结果。从图中可以看出，三个当量比下的层流燃烧速度都随初始温度升高而增大，从模型预测结果可以看出初始温度对层流燃烧速度呈正指数影响关系。其温度指数分别为1.7221（*φ* =0.8），1.7154（*φ* =1.0）和1.8348（*φ* =1.2），化学当量比时，温度指数值较小，说明此时温度对于层流燃烧速度影响较小，随着混合气变浓或者变稀，温度指数值都会增大，表明在较浓或者较稀的混合气条件下，层流燃烧速度对温度变化更为敏感。

3 结论

基于大量的二甲醚/空气预混合气层流燃烧速度实验及数值模拟数据，利用机器学习多变量性回归算法对不同初始条件下的二甲醚/空气预混合气层流燃烧速度进行了模型预测，主要研究结果如下：



图5 *p*0=0.1 MPa时，不同当量比下二甲醚层流燃烧速度随初始温度的变化关系

（1）建立了二甲醚层流燃烧速度与初始条件的准确函数关系式：，其中*S*u,0，分别为当量比*φ*的三次函数。模型预测结果与样本数据及文献值的对比表明，所建函数关系式在*T*0 =298 K-373 K，*p*0 = 0.1 MPa-1.0 MPa和*φ* = 0.8-1.6初始条件范围内有良好的预测能力。

（2）二甲醚层流燃烧速度随初始压力呈负指数关系，化学当量比时，压力指数绝对值较小，随着混合气变浓或者变稀，压力指数绝对值都会增大，表明在较浓或者较稀的混合气条件下，二甲醚层流燃烧速度对压力变化更为敏感。

（3）二甲醚层流燃烧速度随初始温度呈指数关系，化学当量比时，温度指数较小，说明此时温度对层流燃烧速度影响较小，随着混合气变浓或者变稀，温度指数都会增大，表明在较浓或者较稀的混合气条件下，温度对二甲醚层流燃烧速度的影响增大。

**参考文献：**

1. Arcoumanis C, Bae C, Crookes R, et al. The potential of di-methyl ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines: a review [J]. Fuel, 2008, 87(7):1014-1030.
2. Kim MY, Yoon SH, Ryu BW, et al. Combustion and emission characteristics of DME as an alternative fuel for compression ignition engines with a high pressure injection system[J]. Fuel, 2008, 87(8):2779-2786.
3. QIN X, Ju Y. Measurements of burning velocities of dimethyl ether and air premixed flames at elevated pressures [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30(1):233-240.
4. Faghih M, LI HY, GOU XL, et al. On laminar premixed flame propagating into autoigniting mixtures under engine-relevant conditions [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2019, 37(4):4673-4680.
5. ZHAO Z, Kazakov A, Dryer FL. Measurements of dimethyl ether/air mixture burning velocities by using particle image velocimetry [J]. Combustion and Flame 2004, 139 (1−2):52-60.
6. DALY CA, Simmie JM, JUDITH W, et al. Burning velocities of dimethyl ether and air [J]. Combustion and Flame, 2001, 125(4):1329-1340.
7. WANG YL, Holley AT, JI C, et al. Propagation and extinction of premixed dimethyl ether/air flames [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, 32 (1):1035-1042.
8. CHEN ZY, WEI LJ, HUANG ZH, et al. Measurement of laminar burning velocities of dimethyl ether-air premixed mixtures with N2 and CO2 dilution [J]. Energy and Fuels 2009, 23 (2):735−739.
9. HUANG ZH, WANG Q, YU JR, et al. Measurement of laminar burning velocity of dimethyl ether-air premixed mixtures [J]. Fuel, 2007, 86 (15):2360-2366.
10. ZHAO Z, CHAOS M, Kazakov A, et al. Thermal decomposition reaction and a comprehensive kinetic model of dimethyl ether [J]. International Journal of Chemical Kinetics, 2008, 40(1):1-18.
11. GUO HJ, SUN W, HAAS FM, et al. Measurements of H2O2 in low temperature dimethyl ether oxidation[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2013, 34(1):573-581.
12. WANG Z, ZHANG X, XING L, et al. Experimental and kinetic modeling study of the low-and intermediate temperature oxidation of dimethyl ether [J]. Combustion and Flame, 2015,162(4):1113-1125.
13. 田心如，蔡凝昊，张志薇. 基于气象因子及机器学习回归算法的夏季空调负荷预测[J].气象科学, 2019, 39(04): 548-555.

TIAN XR, CAI NH, ZHANG ZW. Summer air-conditioning load forecasting in Nanjing based on meteorological factors and machine learning regression algorithm [J]. Journal of the Meteorological Sciences, 2019, 39(04): 548-555.

1. 牛晓晓. 基于机器学习及智能算法的柴油机性能预测及优化研究[D].哈尔滨工程大学, 2017.

NIU XX. Prediction and optimization of diesel engine performance based on machine learning and intelligent algorithms [D]. Harbin Engineering University, 2017

1. Metghalchi M, KECK JC. Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane, and indolene at high pressure and temperature [J]. Combustion and Flame, 1982, 48:191-210.
2. 陈朝阳. 二甲醚及二甲醚掺混火焰预混层流燃烧基础研究[D].西安交通大学，2011.

CHEN ZY. Fundamental study on combustion characteristics of premixed laminar DME and/or DME blended flames [D]. Xi’an Jiaotong University, 2011.

1. Vries JD, Lowry WB, Serinyel Z, et al. Petersen Laminar flame speed measurements of dimethyl ether in air at pressures up to 10 atm [J]. Fuel, 2011, 90:331-338.
2. KEE RJ, RUPLEY FM, MILLER JA. CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics; Sandia National Laboratory: Albuquerque, NM, 1989; SAND Report 89-8009.
3. WU H, HU EJ, YU HB, et al. Experimental and numerical study on the laminar flame speed of n-butane/dimethyl ether-air mixtures [J]. Energy and Fuels, 2014, 28(5):3412-3419.
4. Gibbs GJ, Calcote HF. Effect of molecular structure on burning velocity.[J]. Journal of Chemical and Engineering Data, 1959,4(3):226-237.
5. 张波，傅维标．二甲醚火焰传播速度的实验研究[J]．燃烧科学与技术，2005，11(2)：163-166．

ZHANG B, FU WB. Experimental study on laminar flame speeds of dimethyl ether and air mixtures [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2005, 11(2):163-166.