

遗传算法优化主要参比燃料的骨架机理

Skeletal mechanism optimization of primary reference fuel based on the genetic algorithm

牛波, 贾明, 常亚超, 徐光甫

(大连理工大学能源与动力工程学院, 辽宁 大连 116024)

([Tel:15004111875](tel:15004111875) E-mail:niubo90@126.com)

摘要: 以激波管中的着火滞燃期实验值为目标, 使用遗传算法优化了由正庚烷和异辛烷组成的主要参比燃料的骨架机理。基于 C4-C8 的 30 个大分子基元反应的指前因子, 将主要参比燃料的着火滞燃期实验值和模拟值平均相对误差设为目标函数。最终获得 56 个优化机理。其中的一些机理极大地改善了对着火滞燃期的预测能力。以其中一个优化机理为例, 着火滞燃期整体平均相对误差从 0.626 降至 0.198。通过模拟其他工况条件下的着火滞燃期, 剔除预测偏差较大的机理, 最终得到一个最优机理。该机理能预测十分宽广工况条件下主要参比燃料的着火滞燃期, 具有很好的稳定性。

关键词: 非劣解排序遗传算法; 主要参比燃料; 着火滞燃期; 反应机理

Abstract: The genetic algorithm was used to optimize the skeletal mechanism of primary reference fuel composed of *n*-heptane and *iso*-octane. The relative errors between experimental values and simulated values were set as the objective functions through the optimization of the pre-exponential factors of 30 large-molecule reactions involving from C4 to C8 molecules. 56 optimized mechanisms were achieved finally. Some of these mechanisms have greatly improved the prediction ability of ignition delay times. Taking one of the optimization mechanisms as an example, the overall relative error of the ignition delay times was declined from 0.626 to 0.198. By simulating the ignition delay times under other conditions, the mechanisms with large deviations were abandoned. An optimal mechanism was obtained at last. The optimal primary reference fuel mechanism has a great prediction of ignition delay times under a very wide operation conditions and has a good stability.

Key words: non-dominated sorting genetic algorithm; primary reference fuel; ignition delay time; reaction mechanism

前言

近年来, 内燃机各种先进的燃烧模式研究日趋深入, 如预混压燃 (premixed charge compression ignition, PCCI), 均质充量压燃 (homogeneous charge compression ignition, HCCI) 和反应可控压燃技术 (reactivity controlled compression ignition, RCCI) 等。这些燃烧模式均受燃料燃烧的化学反应动力学控制。然而详细的化学反应机理过于庞大, 与计算流体动力学软件 (computational fluid dynamics, CFD) 耦合起来模拟发动机运行工况时, 计算成本过于昂贵, 有必要对详细反应机理进行一定程度的简化。但简化后的反应机理与原始机理相比会存在一定程度的偏差, 所以要对简化机理进行优化。

传统的机理优化是通过敏感性分析, 人工反复调整机理参数来获得的。这种优化方式效率较低, 并且得靠一定的经验, 且当实验的工况点很多时很难调整出一个令人满意的机理。Elliott^[1-5]和 Harris^[6]等人分别使用二进制和浮点数编码的单目标遗传算法, 并结合美国国家标准与技术研究所 (National Institute of Standards and Technology, NIST) 化学反应动力学数据库中反应速率常数的预定义边界, 分别对氢气、甲烷和煤油与空气燃烧的化学反应机理进行了优化, 总体上优化效果良好。Wade^[7]等人采用先使用遗传算法优化, 再使用单纯形法进一步优化的方式, 优化了航空燃油的热氧化反应机理。Federico Perini^[8]等人使用元素通量分析法减少组分种类和反应数量, 并通过遗传算法来优化剩下的这些反应中的活化能和指前因子, 通过这种方法简化并优化了乙醇燃烧的详细反应机理。Nejra Sikalo^[9]

等人使用遗传算法分别优化了甲烷、叔丁醇和氢气与空气反应的简化机理。使用单目标遗传算法优化反应机理可以获得较好的结果，但最终只能得一个最优机理，该机理严重依赖所选取的实验工况，不具有稳定性。通过非劣解排序遗传算法优化反应机理可以得到一系列的优化机理，以保证优化机理的多样性。为得到能准确预测其他实验工况的机理，必须进行进一步筛选，最终得到具有很好稳定性的最优机理。

1. 多目标优化问题

多目标优化问题可以表示为下列表达式：

$$\begin{aligned} &\text{Minimize } F(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_n(\mathbf{x})) \\ &\text{Subject to } \mathbf{x} \in \mathbf{X} \end{aligned} \quad (1-1)$$

$F(\mathbf{x})$ 为目标向量， $f_i(\mathbf{x})$ 是第 i 个目标向量，共有 n 个目标， $\mathbf{x}$ 是自变量向量， $\mathbf{X}$ 是可行域

若 $\mathbf{y}$ 和 $\mathbf{z}$ 分别是该多目标问题的两个可行解：

$$\forall j: f_j(\mathbf{y}) \leq f_j(\mathbf{z}) \text{ 且 } \exists k: f_k(\mathbf{y}) < f_k(\mathbf{z})$$

$$\text{其中 } j, k \in (1, \dots, n) \quad (1-2)$$

则 $\mathbf{y}$ 支配 $\mathbf{z}$ ，即 $\mathbf{z}$ 被 $\mathbf{y}$ 支配。

当 $\mathbf{y}$ 不被任何一个其他可行解支配时，则称 $\mathbf{y}$ 是该多目标问题的 Pareto 最优解，也称非支配解。所有的非支配解会在目标空间中形成一个权衡面，该权衡面被称作 Pareto 前沿。求解多目标优化问题的过程就是寻找接近 Pareto 前沿的分支支配解。求解多目标优化问题的代表性算法主要有 VEGA、NSGA2、PAES、PESA、SPEA2。

2. NSGA II 简介

2.1 NSGA II 的求解流程

2000 年 K. Deb[10] 在非劣解排序遗传算法 (non-dominated sorting genetic algorithm, NSGA) 的基础上进行了改进，提出了 NSGA II 算法。NSGA II 是基于遗传算法基本思想提出的一个求解多目标问题的工具。使用 NSGA II 优化化学反应机理的基本流程见图 2.1。

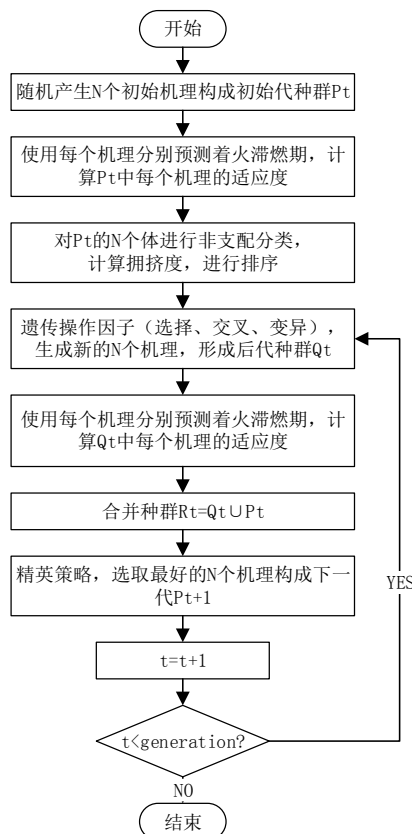


图 2.1 使用 NSGA II 优化化学反应机理的基本流程

1. 初始化种群 P_t 。在预定义的化学反应速率参数范围内随机产生 N 个初始机理，作为构成初始种群 P_t 的 N 个个体。且一个个体对应一套化学反应机理；
2. 初始种群的适应度计算。使用每个初始机理预测着火着火滞燃期，计算 P_t 中每个个体的目标函数，确定其适应度；
3. 对个体进行排序。基于个体的适应度，对个体进行非支配分类，计算拥挤度，排序；
4. 生成后代种群 Q_t 。通过选择、交叉和变异等操作因子产生含有 N 个个体的后代种群 Q_t ，并计算 Q_t 中每个个体的目标函数，确定其适应度；
5. 产生新一代种群 P_{t+1} 。合并 P_t 种群和 Q_t 种群，产生含有 $2N$ 个个体的 R_t 种群。基于这 $2N$ 个个体的适应度，对其进行非支配分类，计算拥挤度，排序。选择其中 N 个最优个体进入下一代，形成新一代种群 P_{t+1} ；
6. 代数繁衍。第 4、第 5 步循环，直至繁衍代数达到收敛准则或某一代数，程序终止。输出最后一代个体作为最优个体。

2.2 操作因子和相关参数的选取

联赛选择因子 (tournament selection operator)：每次通过以下两个准则对两个解进行选择：若非支配分类的等级不同，则处于较高等级的个体被选择；若非支配分类等级相同，则拥挤度距离较小的个体被选择。这两个准则确保进化朝着非支配解和拥挤度距离较小两个方向发展，保证了最终非支配解的分布尽可能分散。

模拟二进制的交叉因子 (simulated binary crossover operator, SBX): 按照交叉率 P_c 的概率选择两个父代个体进行交叉, 获得两个新的子代个体。其中 η_c 是 SBX 的分布指数, 为非负值。 η_c 的值较小时, 允许在离亲代较远的解空间中产生子代, 较大的 η_c 会限制在亲代附近产生子代。

基于参数的变异因子 (parameter-based mutation operator): 以变异率 P_m 的概率选择种群中的个体, 给个体的基因给予一个扰动值, 改变其基因。这样可以避免算法陷入局部最优解并可以保持解的多样性。 η_m 是变异的分布指数, 为非负值。扰动值是 $O(1/\eta_m)$, η_m 越大, 扰动值越小。随着代数的增加, 变异率 p_m 和变异分布指数 η_m 逐渐增大, 扰动值却在逐渐减小。也就是说, 随着代数的增加, NSGA II 会使用较小的扰动值来变异更多的自变量。

表 2.1 NSGA II 优化化学反应机理相关参数的选取

参数名称	参数选取
种群规模	56
交叉率 p_c	0.9
交叉分布指数 η_c	10
变异率 p_m	0.1
变异分布指数 η_m	20
终止条件	繁衍 1000 代
目标数	3

3. 使用 NSGA II 优化化学反应机理的方法

3.1 反应速率参数

在燃烧过程中, 大分子的反应往往由若干个基元反应组成, 每个基元反应的反应速率由阿雷纽斯公式 (Arrhenius expression) 给出。

$$k_i = A_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_{a,i}}{RT}\right) \quad (3-1)$$

其中 $i=1, \dots, N_R$, 其中 R 是大气常数, N_R 为基元反应的个数, 上式包含三个参数, 分别表示第 i 个反应的指前因子 A_i , 温度指数 b_i 和活化能 $E_{a,i}$, 这三个参数的大小对于反应机理的构建十分重要。因为即使给它们一个很小的扰动, 反应物、中间产物和最终产物的浓度和各种反应现象也会有很大的不同。因此, 通过基础反应器的实验数据来反推简化机理中各基元反应的参数, 从而为优化简化机理提供了理论基础。

使用正庚烷、异辛烷和两者按一定比例混合形成的主要参比燃料 (primary reference fuel, PRFs) 在激波管 (shock tube, ST) 中燃烧的着火滞燃期实验数据作为标的, 优化了一个 PRFs 在空气中燃烧的化学反应机理。

这一原始机理来自 Chang^[11], 通过骨架模型和解耦法, Chang 构建了包含 H_2 、CO 和 C_1 详细反应机理和 C_2 - C_8 简化反应机理的骨架机理。 H_2 、CO 和 C_1 详细反应机理用于预测小原子团或物质的发展、热释放速率和层流火焰速度; C_4 - C_8 机理包括 30 个大分子的基元反应, 主要控制着火滞燃期和燃料消耗, 如表 3.1; C_2 - C_3 机理主要在大分子和小分子反应中间起过渡作用。由于该机理进行了一定的简化, 反应数和反应物种类减少, 若直接使用该机理直接预测着火滞燃期, 误差将会很大, 所以有必要对简化机理进行优化。该优化过程仅对 C_4 - C_8 的 30 个大分子基元反应的指前因子 A 进行优化调整, 温度指数 b 和活化能 E_a 保持不变。

3.2 数学模型

$$\text{Minimize } f = \sum_{i=1}^n \omega_i \times \frac{|\tau_{exp,i} - \tau_{sim,i}|}{\tau_{exp,i}} \times 100\% \quad (3-2)$$

其中 n 表示燃料与空气燃烧反应的工况数, $\tau_{exp,i}$ 表示第 i 个工况下着火滞燃期实验值, $\tau_{sim,i}$ 表示第 i 个工况下着火滞燃期模拟值, ω_i 为第 i 个工况点的权重。 ω_i 的取值由所选取工况点的分布情况决定, 若处于负温度系数 (negative temperature coefficient, NTC) 区的工况点分布较为稀疏时, 为保证 NTC 现象, 就应该适当增加这些工况点的权重。

按照物质的种类分为三个目标, 即正庚烷、异辛烷和两者混合构成的主要参比燃料, 使用 NSGA II 对其进行求解, 目标函数均按照 (3-2) 式进行计算。并且函数值越小, 与之相应的机理的适应度越强。该数学模型的目的是找到一个或者几个化学反应机理, 该机理能在较为宽广的工况范围, 准确地预测正庚烷、异辛烷和主要参比燃料与空气燃烧的着火滞燃期变化。使用 NSGA II 寻找机理, 搜索三者与空气燃烧的着火滞燃期平均相对误差最小的 Pareto 最优解, 以期三者的平均相对误差都尽可能小。

表 3.1 C4-C8 大分子基元反应

i	Reaction	A _i	i	Reaction	A _i
1	c7h16=>c2h5+c2h4+c3h7	5.000E+14	16	c8h18+o2<=>c8h17+ho2	1.530E+07
2	c7h16+h<=>c7h15+h2	2.888E+07	17	$\sum_{i=1}^n \omega_i$ c8h17<=>ic4h8+ic4h9	1.500E+13
3	c7h16+oh<=>c7h15+h2o	4.793E+06	18	c8h17+o2<=>c8h17o2	4.520E+12
4	c7h16+ho2<=>c7h15+h2o2	6.465E+06	19	c8h17o2<=>c8h16ooh	2.500E+10
5	c7h16+o2<=>c7h15+ho2	2.045E+07	20	c8h16ooh+o2<=>o2c8h16ooh	4.520E+12
6	c7h15+o2<=>c7h15o2	7.540E+12	21	o2c8h16ooh<=>c8ket+oh	2.500E+10
7	c7h15o2<=>c7h14ooh	2.500E+10	22	c8ket<=>ch2o+c6h13co+oh	1.500E+16
8	c7h14ooh+o2<=>o2c7h14ooh	7.540E+12	23	c6h13co+o2=>c3h7+c3h5+co+ho2	3.160E+13
9	o2c7h14ooh<=>c7ket+oh	1.250E+10	24	c8h17+o2<=>c8h16+ho2	1.340E+11
10	c7ket=>c5h11co+oh+ch2o	1.800E+15	25	c8h16+oh=>ic4h8+ic4h7+h2o	3.233E+06
11	c5h11co+o2=>c3h7+c2h3+co+ho2	3.160E+13	26	c8h16=>ic4h9+ic4h7	1.000E+16
12	c7h15=>c3h6+c2h5+c2h4	1.420E+14	27	ic4h8+h<=>ic4h7+h2	3.400E+05
13	c8h18+h<=>c8h17+h2	2.170E+07	28	ic4h8+oh<=>ic4h7+h2o	5.200E+06
14	c8h18+oh<=>c8h17+h2o	3.600E+06	29	ic4h9<=>c3h6+ch3	9.504E+11
15	c8h18+ho2<=>c8h17+h2o2	6.850E+06	30	ic4h7<=>c3h4+ch3	1.230E+47

4. 数值结果与讨论

以激波管中 PRFs 燃烧的着火滞燃期为例, 反推出该燃料与空气燃烧的化学反应机理。其中, 正庚烷的实验数据来自 Gauthier^[12], 温度范围是 900–1400 K, 压力在 2 atm、10 atm、20 atm 和 55 atm 附近, 当量比为 1.0。异辛烷的实验数据来自 Davidson^[13], 温度范围是 855–1269 K, 压力范围是 14–59 atm, 当量比是 0.5 和 1.0。主要参比燃料的实验数据来自 Fieweger^[14], 包含按不同比例混合的主要参比燃料: PRF100、PRF90、PRF80、PRF60、PRF0, 温度范围是 700–1300 K, 压力均在 40 atm 附近, 当量比为 1.0。

4.1 遗传算法的代数繁衍

如图 4.1 所示, 目标函数值随着繁衍代数的增加迅速降低, 第 100 代时目标函数值已经降低到较低的水平, 个别个体已经靠近帕累托前沿。图 4.2 是图 4.1 的局部放大图, 随着代数的进一步增加, 个体的分布越来越分散。和第 100 代相比, 第 500 代个体的分布范围更加广泛。当繁衍至 1000 代时, 个体分布已经足够分散, 目标函数值进一步降低, 且大部分的个体已经占据帕累托前沿。

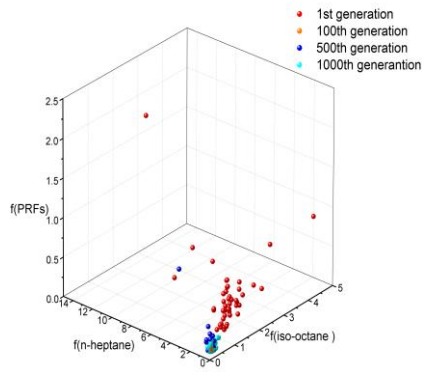


图 4.1 目标函数值随繁衍代数的变化

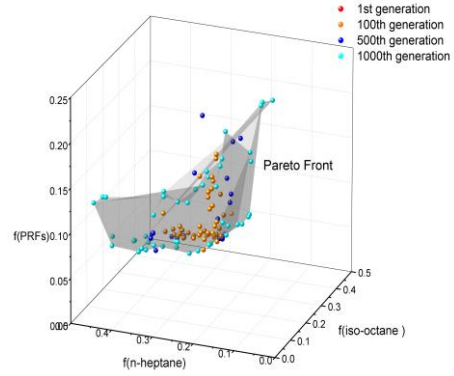


图 4.2 局部放大图

4.2 优化机理的数值模拟结果

通过对最后一代机理的筛选，去除正庚烷、异辛烷和 PRFs 中预测值和实验值相对误差较大的机理，只保留能协调三者目标函数的机理。使用保留下来的机理模拟上述三组实验工况。这些机理均能准确地预测这些实验工况的着火滞燃期。这里只展示其中一个机理的模拟结果。

图 4.3 显示的是使用初始机理模拟 Fieweger 实验工况得到的着火滞燃期。由原始机理模拟的着火滞燃期可以看出，该机理能较好的拟合正庚烷（PRF0）的着火滞燃期，但在低温区模拟值略大，并且该机理在高温区预测的异辛烷（PRF100）着火滞燃期过大。由图 4.4 可知，使用 NSGA II 得到的优化机理明显得到了改进。使用原始机理预测该组实验的着火滞燃期的平均相对误差为 0.423，优化后，着火滞燃期平均相对误差降至 0.095。

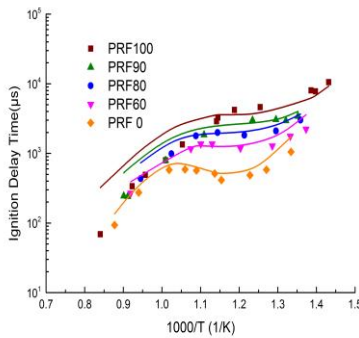


图 4.3 原始机理对 PRFs 着火滞燃期的预测值（实线）与实验值（符号）的比较

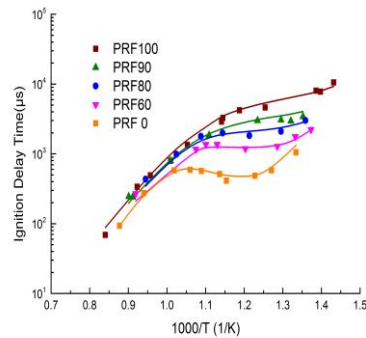


图 4.4 优化机理对 PRFs 着火滞燃期的预测值（实线）与实验值（符号）的比较

由表 4.1 可见，原始机理已经能较好地预测正庚烷着火滞燃期，但优化机理进一步减少了模拟值和实验值的相对误差。经计算，使用原始机理预测表 4.1 中各工况的模拟值和实验值的平均相对误差为 0.383，优化机理将其进一步缩减为 0.256。总的来说，优化机理能更准确地预测正庚烷的着火滞燃期。

由表 4.2，原始机理在预测异辛烷的着火滞燃期时普遍是偏高的，而使用优化机理的预测能力得到了显著地提高，能较好地模拟异辛烷的着火滞燃期。原始机理预测表 4.2 中各工况的模拟值和实验值的平均相对误差为 2.006，优化机理将其降至 0.234，预测能力明显提高。综合三组实验数据来看，现有的优化机理进一步提高了正庚烷着火滞燃期的预测能力，极大地改善了异辛烷和 PRFs 着火滞燃期的预测能力，整体着火滞燃期的平均相对误差从 0.626 降至 0.198。

表 4.1 Gauthier 的正庚烷燃烧实验工况

P/atm	T/K	Φ	$T_{\text{exp}}/\mu\text{s}$	$T_{\text{ori}}/\mu\text{s}$	$T_{\text{opt}}/\mu\text{s}$	P/atm	T/K	Φ	$T_{\text{exp}}/\mu\text{s}$	$T_{\text{ori}}/\mu\text{s}$	$T_{\text{opt}}/\mu\text{s}$
1.97	1249	1	529	558	504	16.7	1048	1	854	1086	809
1.89	1299	1	311	336	320	53.9	909	1	254	371	361
1.85	1358	1	152	192	186	60	923	1	244	329	320
1.99	1378	1	117	150	145	60.6	926	1	233	328	317
10.62	1305	1	117	52	56	55.4	932	1	323	388	369
11.24	1236	1	207	72	100	48.6	985	1	364	553	446
10.25	1299	1	122	79	61	57.7	1007	1	232	409	322
10.27	1344	1	85	75	42	53.6	1013	1	292	442	340
11.88	1290	1	118	137	57	54.2	1023	1	261	409	311
20	806	1	1377	1167	1051	59.1	1027	1	237	356	271
19.9	850	1	1653	1493	1391	50	1057	1	194	324	238
19.8	906	1	1836	2107	1798	53.1	1063	1	179	284	208
18.1	1012	1	944	1689	1254	52.3	1115	1	102	148	104

注： P 表示压力， T 表示温度， Φ 表示当量比， T_{exp} 表示着火滞燃期实验值， T_{ori} 表示原始机理预测的着火滞燃期， T_{opt} 表示优化机理预测的着火滞燃期。

表 4.2 Davidson 的异辛烷燃烧实验工况

P/atm	T/K	Φ	$T_{\text{exp}}/\mu\text{s}$	$T_{\text{ori}}/\mu\text{s}$	$T_{\text{opt}}/\mu\text{s}$	P/atm	T/K	Φ	$T_{\text{exp}}/\mu\text{s}$	$T_{\text{ori}}/\mu\text{s}$	$T_{\text{opt}}/\mu\text{s}$
18.1	984	1	1511	6116	2106	51.1	1006	1	625	1319	679
16.3	995	1	1535	6262	1982	47.8	1015	1	505	1328	640
17.1	1043	1	927	3528	1000	47.5	1098	1	222	634	229
18.4	1077	1	604	2244	607	15	1043	0.5	1747	5572	1701
15.9	1109	1	516	1852	457	14.9	1071	0.5	1222	4056	1155
14.9	1159	1	214	1166	271	14.4	1095	0.5	916	3187	852
56.4	855	1	1719	2074	2844	13.5	1171	0.5	329	1475	343
59.3	867	1	1755	1916	2498	51.1	1009	0.5	1075	2236	1130
58.5	894	1	1193	1937	2044	51	1057	0.5	598	2236	1130
55.7	927	1	1067	1940	1566	48.6	1099	0.5	348	922	353
51.2	975	1	871	1671	987	47.8	1147	0.5	178	579	191

注： P 表示压力， T 表示温度， Φ 表示当量比， T_{exp} 表示着火滞燃期实验值， T_{ori} 表示原始机理预测的着火滞燃期， T_{opt} 表示优化机理预测的着火滞燃期。

4.3 优化机理的进一步筛选

一个好机理必须能够在非常宽广的工况范围内准确地模拟着火滞燃期，也就是说，该机理应具有稳定性。为了验证优化机理的稳定性，使用优化机理模拟其他实验工况下正庚烷和异辛烷的着火滞燃期。通过比较拟合情况可以淘汰一些优化机理，经过筛选只能保留一个或少数几个机理作为最优机理。经过筛选，只保留了一个最优机理，使用该机理可以准确模拟正庚烷、异辛烷和 PRFs 的着火滞燃期，拟合结果展示在图 4.5-图 4.10。

图 4.5-图 4.7 表示使用最优机理预测异辛烷着火滞燃期的拟合情况。这些工况点涵盖范围宽广：当量比从 0.25 至 1.0，压力分布从 10 atm 至 50 atm，除了在低压高温工况下预测值略大以外，整体拟合结果较好。图 4.8-图 4.10 表示最优机理预测正庚烷着火滞燃期的拟合情况，同样，这些工况点的分布也十分宽广：当量比从 0.25 至 1.0，压力分布从 3.2 atm 至 55 atm，拟合效果较好。可见最优机理在预测正庚烷、异辛烷和 PRFs 着火滞燃期方面，整体拟合情况令人满意。通过上述一系列验证，证明该机理

具有很好的稳定性，可准确预测宽广工况条件下 PRFs 的着火滞燃期，也说明使用 NSGA II 优化机理的可行性。

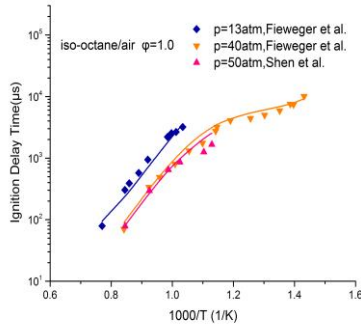


图 4.5 $\Phi=1$ 时异辛烷着火滞燃期的预测值（实线）和实验值^[14, 15]（符号）的比较

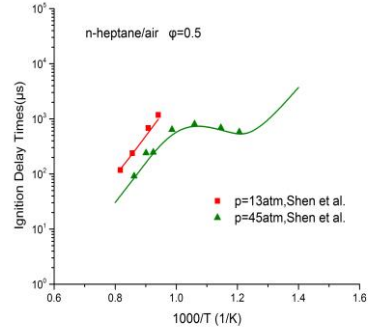


图 4.6 $\Phi=0.5$ 时异辛烷着火滞燃期的预测值（实线）和实验值^[15]（符号）的比较

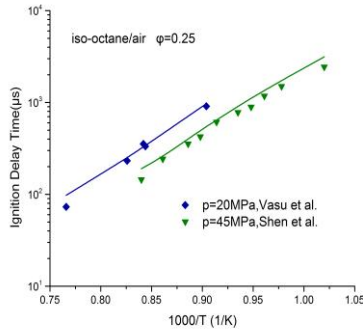


图 4.7 $\Phi=0.25$ 时异辛烷着火滞燃期的预测值（实线）和实验值^[15, 16]（符号）的比较

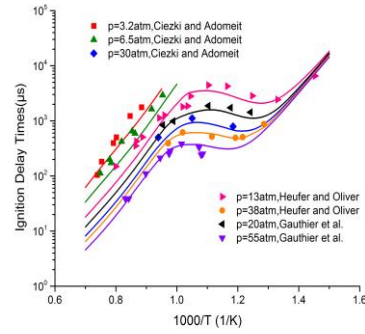


图 4.8 $\Phi=1$ 时正庚烷着火滞燃期的预测值（实线）和实验^[12, 17, 18]（符号）的比

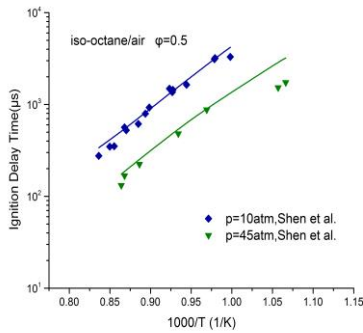


图 4.9 $\Phi=0.5$ 时正庚烷着火滞燃期的预测值（实线）和实验值^[19]（符号）的比较

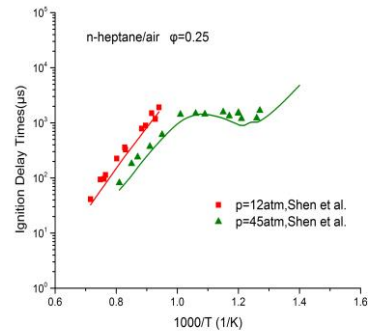


图 4.10 $\Phi=0.25$ 时正庚烷着火滞燃期的预测值（实线）和实验值^[19]（符号）的比较

5. 结论

（1）以激波管着火滞燃期实验值与模拟值的平均相对误差最小作为优化目标，基于 30 个大分子基元反应的指前因子，通过 NSGA II 优化一个由正庚烷和异辛烷构成的主要参比燃料的原始机理，经过优化得到了 56 个机理。

(2) 第一步筛选: 通过剔除一些预测偏差较大的机理, 得到了一系列优化机理, 这些机理明显地提高了着火滞燃期的预测能力。以其中一个机理为例, 整体的着火延迟时间平均相对误差从 0.626 降至 0.198。

(3) 第二步筛选: 通过预测其他实验工况的着火滞燃期, 对优化机理进行进一步筛选, 最终获得一个具有较好稳定性的最优机理, 该机理能准确地预测宽广工况条件下主要参比燃料的着火滞燃期。

6. 参考文献

- [1] Elliott L., Ingham D. B., Kyne A. G., et al. Genetic algorithms for optimisation of chemical kinetics reaction mechanisms. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2004, 30(3): 297–328.
- [2] Elliott L., Ingham D. B., Kyne A. G., et al. Incorporation of physical bounds on rate parameters for reaction mechanism optimization using genetic algorithms. *Combustion Science and Technology*, 2003, 175(4): 619–48.
- [3] Elliott L., Ingham D. B., Kyne A. G., et al. Multiobjective Genetic Algorithm Optimization for Calculating the Reaction Rate Coefficients for Hydrogen Combustion. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, 42(6): 1215–24.
- [4] Elliott L., Ingham D. B., Kyne A. G., et al. The use of ignition delay time in genetic algorithms optimisation of chemical kinetics reaction mechanisms. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2005, 18(7): 825–31.
- [5] Elliott L., Ingham D. B., Kyne A. G., et al. Reaction Mechanism Reduction and Optimization Using Genetic Algorithms. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2005, 44(4): 658–67.
- [6] Harris S. D., Elliott L., Ingham D. B., et al. The optimisation of reaction rate parameters for chemical kinetic modelling of combustion using genetic algorithms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2000, 190(8–10): 1065–90.
- [7] Wade A. S., Kyne A. G., Mera N. S., et al. Optimization of the Arrhenius Parameters in a Pseudo-detailed Mechanism for Jet Fuel Thermal Oxidation Using Genetic and Simplex Algorithms. *Energy & Fuels*, 2004, 18(6): 1896–908.
- [8] Perini F., Brakora J. L., Reitz R. D., et al. Development of reduced and optimized reaction mechanisms based on genetic algorithms and element flux analysis. *Combustion and Flame*, 2012, 159(1): 103–19.
- [9] Sikalo N., Hasemann O., Schulz G., et al. A Genetic Algorithm - Based Method for the Optimization of Reduced Kinetics Mechanisms. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2015, 47(11): 695–723.
- [10] Deb K., Pratap A., Agarwal S., et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. *Trans Evol Comp*, 2002, 6(2): 182–97.
- [11] Chang Y., Jia M., Li Y., et al. Application of the optimized decoupling methodology for the construction of a skeletal primary reference fuel (PRF) mechanism focusing on engine-relevant conditions. *Frontiers in Mechanical Engineering*, 2015, 1.
- [12] Gauthier B. M., Davidson D. F., Hanson R. K. Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures. *Combustion and Flame*, 2004, 139(4): 300–11.
- [13] Davidson D. F., Gauthier B. M., Hanson R. K. Shock tube ignition measurements of iso-octane/air and toluene/air at high pressures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2005, 30(1): 1175–82.
- [14] Fieweger K., Blumenthal R., Adomeit G. Self-ignition of S.I. engine model fuels: A

shock tube investigation at high pressure. *Combustion and Flame*, 1997, 109(4): 599-619.

[15] Shen H.-P. S., Vanderover J., Oehlschlaeger M. A. A shock tube study of iso-octane ignition at elevated pressures: The influence of diluent gases. *Combustion and Flame*, 2008, 155(4): 739-55.

[16] Vasu, S. S., Davidson, D. F., and Hanson, R. K. Shock tube measurements and modeling of ignition delay times in lean iso-Octane/air, in 25th Int. Symp. on ShockWaves (Bangalore), 2005.

[17] Ciezki H. K., Adomeit G. Shock-tube investigation of self-ignition of n-heptane-air mixtures under engine relevant conditions. *Combustion and Flame*, 1993, 93(4): 421-33.

[18] Heufer K. A., Olivier H. Determination of ignition delay times of different hydrocarbons in a new high pressure shock tube. *Shock Waves*, 2010, 20(4): 307-16.

[19] Shen H.-P. S., Steinberg J., Vanderover J., et al. A shock tube study of the ignition of n-heptane, n-decane, n-dodecane, and n-tetradecane at elevated pressures. *Energy & Fuels*, 2009, 23(5): 2482-9.