

湍流燃烧模拟中化学反应的加速算法研究进展

刘再刚^{1,2}, 孔文俊^{1,2,3,*}

(1. 中国科学院工程热物理研究所 中国科学院轻型动力重点实验室, 北京 100190; 2. 中国科学院大学 工程科学学院, 北京 100049; 3. 北京航空航天大学 宇航学院, 北京 100191)

摘要:为研究湍流燃烧数值模拟中化学反应机理计算的加速方法,讨论了动态自适应化学(Dynamic Adaptive Chemistry, DAC)方法和 Krylov 子空间近似的指数格式的应用情况。在湍流火焰大涡模拟中,使用 DAC 简化可以加速化学反应计算。然而,在并行燃烧数值模拟中,处理器核心的负载极度不平衡,加速效果有限。而 Krylov 子空间近似的指数格式的加速效果可以作用于每个处理器核心,更有利于整体计算效率的提高。在同等精度下,相比于隐式格式耦合 DAC 和 MTS 加速方法,Krylov 子空间近似的指数积分格式对化学反应计算的加速效果更为显著。

关键词:湍流燃烧数值模拟; 化学反应计算加速; 动态自适应化学; Krylov 子空间近似; 指数积分格式

中图分类号: TK16

文献标识码: A

Progress on acceleration algorithm of the computation for chemical reactions in turbulent combustion simulation

Liu Zaigang^{1,2}, Kong Wenjun^{1,2,3,*}

(1. Key Laboratory of Light-Duty Gas-Turbine, Institute of Engineering Thermophysics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China; 2. School of Engineering Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China; 3. School of Astronautics, Beihang University, Beijing 100191, China)

Abstract: To investigate the methods of accelerating the computation of chemical kinetics in turbulent combustion, the application of Dynamic Adaptive Chemistry (DAC) and exponential integrator with Krylov subspace approximation is discussed. In the large eddy simulation of a turbulent flame, using DAC can accelerate the computation of chemical kinetics. However, in the context of parallel combustion simulation, the loads on the different processors are extremely imbalanced, which limits its performance. For the exponential integrator with Krylov subspace approximation, the acceleration effect acts on each processor, which is beneficial to improve the global computational efficiency. Compared to that of the implicit scheme coupled with DAC and MTS, the accelerating performance of the exponential integrator with Krylov subspace approximation under the same level of accuracy is more obvious.

Keywords: turbulent combustion simulation; acceleration of the computation for chemical reactions; Dynamic Adaptive Chemistry; Krylov subspace approximation; exponential integration

0 引言

燃烧是发动机中燃料能量转换的主要形式,准确地描述燃烧过程,从而得到精确的燃烧数值模拟结果,可以高效指导发动机的设计与实验。实际应用中,发动机中的燃烧大多是湍流的,燃烧与湍流之间

的相互作用机理复杂,使得湍流燃烧数值模拟成为了重要的研究课题。

随着计算机能力的提升,大涡模拟(Large Eddy Simulation, LES)逐渐成为湍流燃烧数值模拟的重要研究手段。在湍流燃烧 LES 中需要使用燃烧模型来封闭标量方程中的化学反应源项。目前精度较高

收稿日期: 2018-08-30; 修订日期: 2019-03-14

基金项目: 国家自然科学基金项目(91441131, U1738113)

* 通信作者 E-mail: wjkong@buaa.edu.cn

引用格式: Liu Z G, Kong W J. Progress on acceleration algorithm of the computation for chemical reactions in turbulent combustion simulation. Journal of Experiments in Fluid Mechanics, 2019, 33(4): 1-10. 刘再刚, 孔文俊. 湍流燃烧模拟中化学反应的加速算法研究进展. 实验流体力学, 2019, 33(4): 1-10.

的燃烧模型,如小火焰模型^[1-5]、线性涡模型^[6-7]、基于概率密度函数的模型^[8-12]、条件矩模型^[13-14]、加厚火焰面模型^[5, 15]、涡耗散模型^[16]和部分预混反应器模型^[17]等,均需要借助详细的化学反应机理来描述燃烧时的复杂反应过程,如燃烧场中的局部熄火和再燃、化学反应速率随压力的非线性变化、低温化学反应的影响、污染物排放等。

化学反应机理是指描述化学过程的基元反应的集合。在燃烧时,燃料分解产生大量化学分子和自由基,称为组分,组分间最基本的化学反应为基元反应。要准确模拟燃烧过程,所需的化学反应机理的规模是巨大的,可以包含数量成百上千的组分和基元反应^[18]。而且化学反应组分常微分方程组(Ordinary Differential Equations, ODEs)通常是刚性的,如果使用常规的显式格式求解,为了计算稳定必须使用极小的时间步长。常见的解决方法是使用基于隐式格式的刚性求解器,如 DVIDE^[19]和 DASSL^[20]等。因此,在湍流燃烧 LES 中,求解化学反应方程的时间常占据主要部分^[21]。

化学反应机理规模的增加将导致化学反应源项计算量的迅速增长。应用小火焰类燃烧模型,如 FGM (Flamelet Generated Manifolds) 或 FPV (Flamelet/Progress-Variable)等,可以通过预先建表的方法回避在线求解化学反应问题,类似的还有 PRISM(Piecewise Reusable Implementation of Solution Mapping)^[22]、RS-HDMR(Random Sampling-High Dimensional Model Representation)^[23-24]等映射方法。相比于直接使用总包反应机理,此类方法虽然在一定程度上考虑了详细化学反应机理的作用,但化学反应表中的变量数量严重受限于计算机内存空间,当燃烧的工况不处于预先存储结果的工况范围内时,就会缺乏灵活性和适应性,与直接在线求解化学反应相比准确性较低。为了降低直接求解化学反应的计算时间,虽然可以使用在线的建表方法,如 ISAT(In Situ Adaptive Tabulation)^[25-29],但是,ISAT 方法对内存需求仍较大,并且在线建表的速度快慢也依赖于直接积分的求解速度。而提高直接求解的计算效率,可以通过使用化学反应机理简化或采用高效的积分求解器来实现。

对于不同的燃烧问题,反应机理的组分和基元反应并不都是活跃的,可能仅仅其中的某一部分是重要的,而其他部分的反应速率则可以忽略不计。因此,研究人员发展了许多化学反应机理简化方法,如敏感性分析法^[30-32]、准稳态假设法^[33]、局部平衡法^[33]、计算奇异摄动法^[34]、ILDM(Intrinsic Low Dimensional

Manifold) 法^[35]和 DRG(Direct Relation Graph)法^[36]及其衍生算法,如 DRGEP(Directed Relation Graph Error Propagation)方法^[37]、PFA(Path Flux Analysis)^[38-40]、EFA(Element Flux Analysis)^[41-43]和 GPS(Global Pathway Selection)方法^[44]等。

上述反应机理简化方法需要在流场计算前完成,并在计算过程中直接使用预先简化好的反应机理。为了保证简化机理的准确性,这种预先简化的机理常包含了较多的组分。然而,对于同一燃烧场中的不同时刻或当地,反应机理可以进一步简化。因此研究人员发展了一类动态自适应化学法(Dynamic Adaptive Chemistry, DAC)^[39, 45-48],可以在计算过程中动态简化化学反应机理。动态简化主要基于 DRG、PFA 或 GPS 算法,因为这些方法能以较小的额外时间花费完成机理简化。DAC 方法已应用于多种简单模型的燃烧计算,如 HCCI(Homogeneous Charge Compression Ignition)模型^[47, 49]、部分预混搅拌反应器模型^[27, 50-52]、着火问题和一维火焰传播^[48, 53-54]等。

DAC 方法也在不断地改进,并与其他简化方法耦合应用。为了进一步降低机理简化本身所占用的时间, Sun 等^[55]提出了自相关动态自适应化学(Correlated Dynamic Adaptive Chemistry, CoDAC)方法。该方法将具有相近状态的不同空间位置和时间节点网格点进行归类后统一处理,这与分区模型和 CA(Cell Agglomeration)方法^[56-57]的思想相同,自相关技术有效地降低了化学反应机理简化所需要的计算时间。Oluwole 等^[54]发展了一种 DSRR(Decoupled Species and Reaction Reduction)简化方法,相比于 DRG 简化,具有同等的简化计算速度并提供了改进的误差控制方法。DSRR 的显著优点是不需要指定初始组分,但简化结果可能会导致元素不守恒^[54]。Xie 等^[58]提出的 TSRA(Time-Scale and Jacobian-aided Rate Analysis)将组分分为活跃的(Active)、直接耦合的(Directly coupled)和不重要的(Inconsequential)3类,通过迭代计算来保证元素守恒。此外, DAC 方法和 ISAT 方法结合,构成 TDAC(Tabulated Dynamic Adaptive Chemistry)^[27, 51, 59-60]方法,可以进一步提高化学反应计算速度。除了将 DAC 和 ISAT 二者结合, Xie 等^[60]提出的 DAAM(Dynamic Adaptive Acceleration Method)可以根据 DAC 和 ISAT 的计算耗时自动选择二者之中较快的方法进行计算。最后,分区方法或 CA 方法也可以和 DAC 及 ISAT 结合^[52, 61-62],实现更高效的计算。

通过提高求解器计算效率也可以加速化学反应

求解,如使用外推法^[63],点隐式求解器^[64]、带预处理的 Krylov 求解器^[65]、刚性去除法^[66]和基于多时间尺度(MTS, Multi-Timescale Method)分析的混合多时间尺度(HMTS, Hybrid Multi-Timescale Method)方法^[67], HMM (Heterogeneous Multiscale Method) 方法^[68]和 AHI (Adaptive Method for Hybrid Integration)^[69]方法等。

求解化学反应常微分方程组,除了使用广泛应用的显式或隐式格式外,还可以使用指数格式积分方法(Exponential Integrator)^[70]。这种方法构造含有 Jacobian 矩阵指数函数形式的积分格式,其优势在于可以使用显式大步长时间推进得到稳定的计算结果,适用于刚性常微分方程问题和振荡系统问题。因此,指数格式被广泛应用于金融与统计学^[71]、正则化理论^[72]、电磁场模拟^[73]及浅水方程模拟^[74]等领域。在指数积分方法中,需要计算 Jacobian 矩阵的指数函数。在多种计算矩阵指数函数的方法^[75]中通用性较好、计算效率较高的方法是收缩乘方和 Padé 近似^[76]方法。然而,这种方法所需的计算量与矩阵维数的3次方成正比,因此适用于较小规模的矩阵,对于大型矩阵,尤其是大型稀疏矩阵,其计算效率很低。一种广泛采用的解决方法是利用 Krylov 子空间近似^[77],将原问题投影到其 Krylov 子空间,从而实现降维,减少问题规模^[74, 78-81]。Krylov 子空间近似也常被应用于 GMRES (Generalized Minimum Residual) 算法和 BiCGSTAB (Biconjugate Gradient Stabilized) 算法等线性方程组求解方法中。

在燃烧数值模拟中,刚性化学反应问题也适合用指数格式求解。Bisetti^[82]和 Curtis 等^[83]的研究表明,四阶指数积分格式和 Krylov 子空间近似方法可应用于求解自着火和 HCCI 的化学反应机理。然而,四阶指数积分格式每步需要计算3次矩阵指数函数,计算量较大。Niesen 和 Wright^[79]发展了一种自适应时间步长和 Krylov 子空间大小的算法:Phipm 算法。该求解器已被应用于自着火问题数值模拟,与 DVODE 求解器相比,显著提高了化学反应求解效率^[84]。

为了研究湍流燃烧数值模拟中化学反应机理计算的加速方法,本文阐述了 DAC 和指数格式在湍流燃烧数值模拟中的应用情况。首先,探讨了 DAC 在湍流燃烧数值模拟中的加速效果。然后,考察了 Krylov 子空间近似的指数格式求解湍流-化学反应系统的加速效果。

1 动态化学反应机理简化在燃烧数值模拟中的应用

Liu 等^[21, 85]使用 53 组分/325 反应的 GRI-Mech 3.0 反应机理和基于 PFA 的 CoDAC 简化方法对 Sandia Flame D 进行了 LES 数值模拟。Sandia Flame D 是美国 Sandia 国家实验室发展的经典湍流射流火焰,由主射流、值班射流和空气伴流组成,其中主射流由 25% 甲烷和 75% 空气组成,值班射流为甲烷-空气燃烧后的平衡产物。具体参数可见 Barlow 等^[86]的研究。数值模拟结果如图 1 所示,通过对比发现,使用 CoDAC 简化的 LES 计算结果与未使用简化得到的结果符合得很好,表明使用 CoDAC 可以准确模拟非预混湍流火焰特性。使用 CoDAC 后,LES 中化学反应计算时间总体下降了 29%,化学反应速率的求解仍然占据总求解时间的主要部分。Yang 等^[64, 87-89]同样使用基于 PFA 的 CoDAC 方法简化化学反应计算,并结合 CoTran 方法降低组分输运系数的计算。对湍流预混火焰的 DNS 模拟^[64]结果表明,简化方法的加速因子可以达到 2.7,在湍流非预混火焰的 DNS 模拟^[89]中可以达到 4.0。CoDAC 简化方法也被用于模拟实验室尺度湍流火焰 Sandia Flame D^[87]和 Flame E^[88]的 LES,使用的反应机理为

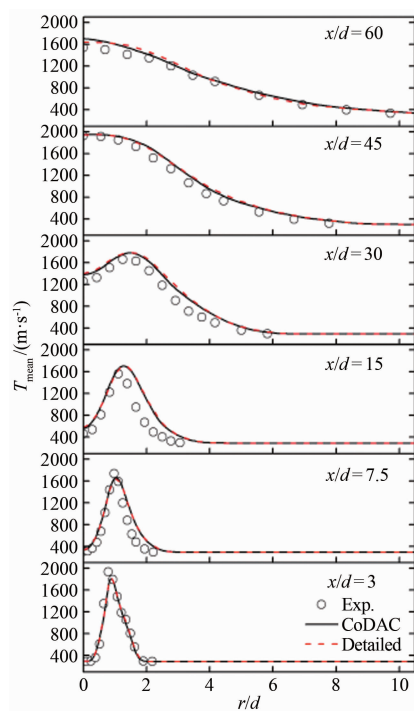


图1 Sandia Flame D 火焰在 $x/d = 3, 7.5, 15, 30, 45$ 和 60 截面处时均温度的周向分布^[21]

Fig.1 Radial profiles of time-average of temperature for Sandia Flame D at $x/d = 3, 7.5, 15, 30, 45$ and 60 ^[21]

20 组分/84 反应的简化机理,该反应机理是通过 GRI-Mech3.0 机理使用 GPS 简化后获得的。该研究对比了有限速率化学模型和小火焰/进度变量方法,结果表明,2 种模型都较好地反映了实验结果的变化趋势,但使用有限速率化学模型和 CoDAC 简化相比于 FPV 模型,可以得到更准确的统计结果。

DAC 还被应用于超声速燃烧数值模拟中。Wu 等^[90]对比了 DAC、TDAC 方法和骨架机理在超声速燃烧室数值模拟中的表现。结果表明 DAC 和 TDAC 可以准确模拟燃烧室的特性和火焰结构,而骨架机理不能准确预测火焰的稳定特性。在计算效率方面,在 57 组分/269 反应的 UCSD 反应机理的基础上使用 DAC 可以获得与使用 30 组分/143 反应的骨架机理同等的加速效果,而在 DAC 的基础上使用 TDAC 可以将计算效率再提高 1 倍。

在实际燃烧设备的数值模拟中,DAC 方法也得到了应用,Li 等^[59]对比研究了 TDAC 方法和 5 种不同的化学反应机理简化方法:DRG、DRGEP、Contino 等的 DAC 方法^[91]、PFA 和 EFA。研究使用非定常雷诺平均方法(URANS)数值模拟了 DJHC(Delft Jet-in-Hot-Coflow)燃烧器的燃烧特性,结果表明 DRGEP、DAC 和 EFA 方法比 DRG 和 PFA 方法准确。对于小规模反应机理,TDAC 方法中的制表方法贡献了主要的计算加速,而对于大规模反应机理,DAC 简化起了主要作用。Zhou 和 Lu 等^[92-93]使用 URANS 和 LES 方法模拟了 Spray H 正庚烷湍流喷雾火焰,结果表明使用 DAC 的加速因子可达到 2.0。在化工应用方面,Huang 等^[94]使用基于 DRG 的 DAC 方法模拟了石英玻璃反应炉的 $\text{SiCl}_4/\text{H}_2/\text{O}_2$ 燃烧系统,加速因子为 2.2。

DAC 在内燃机数值模拟中受到了广泛关注,DAC 方法及其他多种化学反应机理简化方法被应用于加速计算。Shi 等^[95]使用基于 DRGEP 的 DAC 进行了 DI(Direct-Injection)发动机的二维数值模拟,并改进了确定初始组分的方法。计算速度的对比表明,在多维发动机数值模拟中的 DAC 简化加速效果不如在单区绝热发动机模型模拟中显著,但仍有效加速了化学反应计算。对于 34 组分和 61 组分的正庚烷反应机理,计算时间分别节省了 30% 和 50%。Contino 等^[91]使用 TDAC 模拟了 HCCI 发动机的燃烧过程,加速因子可高达 500.0,而对于柴油发动机,加速因子在 9.0 左右。Xie 等^[60]将 DAAM 方法用于 PCCI(Premixed Charge Compression Ignition)发动机的数值模拟,模拟结果显示 DAAM 相比于 ISAT

方法使计算加速了 50%,其计算效率也高于 ISAT-DAC 方法,且数值模拟的准确性处于同一水平。此外,DAC 和 ISAT 方法也可以和 CA 方法联合^[61-62],在分区的基础上再进行 DAC 简化或 ISAT 建表,可以进一步提高计算速度。Zhou 等^[61]的研究表明,对于约 40 个组分的反应机理,CA 联合 DAC 的方法可以使计算加速一倍,而对于约 140 个组分的反应机理,加速因子可达到 9.0 左右。

DAC 在湍流燃烧数值模拟中的加速效果不尽相同,其影响因素是多方面的:

(1) DAC 简化的加速效果与数值模拟结果误差是相关的,用户所能容忍的误差越大,DAC 简化能实现的加速就越大。误差的调节方式与 DAC 中具体应用的简化方法有关,如 DRG、DRGEP、PFA 等通过简化阈值调节,合理阈值的大小还根据所使用简化机理的不同而不同,最终的误差需要通过结果来验证;而 DSRR 则通过给定容许误差来调节。

(2) 加速效果与燃烧特性有关。Liu 等^[21]的研究表明,对于燃烧反应不活跃的情况,如自着火过程发生前的慢速反应区域和自着火完成后的平衡区域,以及一维预混火焰面上游的未燃区和火焰面下游的已燃区,燃烧过程中活跃的组分数较小,使用 DAC 简化可以显著降低局部简化机理中的组分,从而大大提高计算速度。而对于反应较为剧烈的区域(如自着火时刻或火焰锋面处),化学反应过程复杂,涉及组分多,因此 DAC 简化产生的局部简化机理规模较大,甚至与输入的反应机理规模相当,此时 DAC 的加速效果不明显。

(3) 加速效果与输入反应机理有关,应用规模越大的反应机理通常能获得越明显的加速效果。例如 Wu 等^[90]的研究表明,同等网格数量的情况下,对于 57 组分、75 组分和 111 组分的反应机理,DAC 的加速因子分别为 1.9、2.2 和 2.5。

在实际应用中,DAC 如果与其他加速手段耦合,加速效果也会受到影响。例如 DAC 方法与 ISAT 方法耦合时^[51],DAC 的加速效果随 ISAT 误差阈值的增大而略有降低。在湍流燃烧的并行计算中,化学反应计算的并行方式也对 DAC 的加速效果有较大影响。Liu 等^[21]的研究表明,由于并行 LES 中化学反应的计算效率受火焰面附近处理器核心的计算效率控制,在并行计算中,化学反应求解完成后,核与核之间需要进行一次同步并通信,然后再进行下一步计算,因此总体的化学反应计算时间由各个核心中最慢的决定。例如,图 2 所示是不同核心上的化学反应计

算时间 $t_{\text{ODE},p}$, 可以看到不同计算区域中的 $t_{\text{ODE},p}$ 差别很大, 火焰反应区附近的 $t_{\text{ODE},p}$ 显著高于其他反应活性较低的区域。放大图 2(a), 显示出最高的 $t_{\text{ODE},p}$ 出现在火焰中 $r=d$, $10d < x < 25d$ 的区域。这正是湍流-化学相互作用最强烈的区域, 湍流火焰中的局部熄火和再燃频繁发生。CoDAC 和 DAC 的主要区别在于是否进行自相关算法运算。图 2(d) 所示是当地各个网格点上的简化机理中通过 PFA 算法得到而不

是通过自相关算法得到的占比 $\phi_{\text{PFA},p}$, 分布结果同样表明在火焰反应区附近自相关算法带来的计算加速效果不明显。在自着火的模拟结果中(如图 3 所示), 同样可以发现在反应活跃的点火时刻, 计算时间也出现了显著升高的现象。因此, 要进一步提高计算效率, 一方面应平衡处理器之间的计算效率, 如使用 x2f_mpi 算法^[96]等; 另一方面, 可以发展更高效的化学反应积分方法, 从而提高整体计算效率。

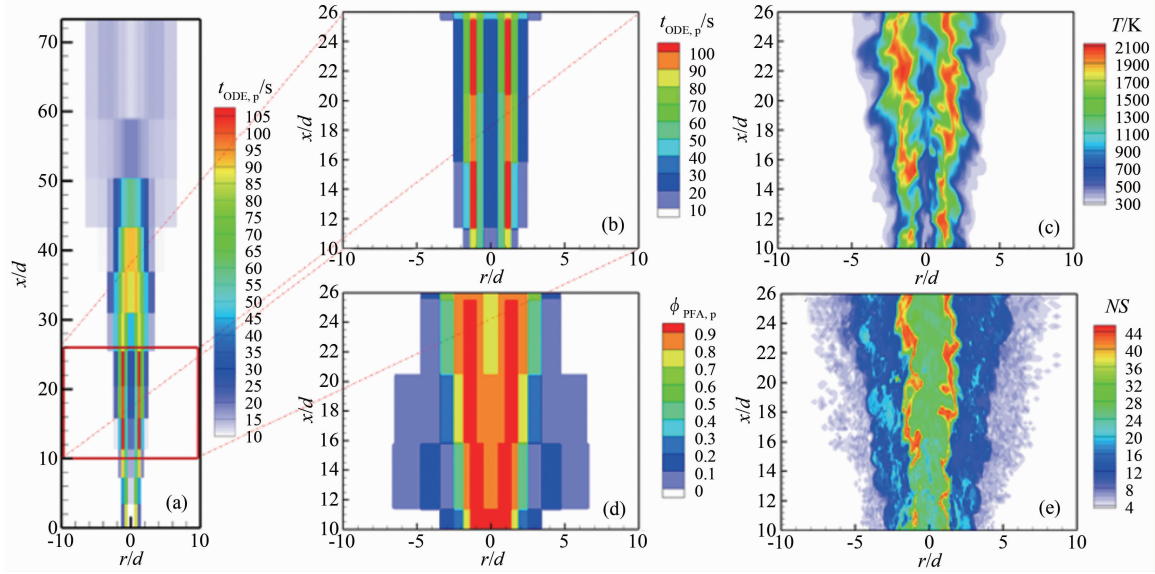


图2 在各处理器核心上的(a) ODE 时间($t_{\text{ODE},p}$) 以及(b) ODE 时间、(c) 温度 T 、(d) PFA 占比($\phi_{\text{PFA},p}$) 和 (e) 简化机理中组分数(NS)的局部放大视图^[21]

Fig.2 Contour plot of (a) ODE time on each processor ($t_{\text{ODE},p}$) together with zoom-in view of (b) ODE time on each processor, (c) temperature T , (d) percentage of cells performing PFA ($\phi_{\text{PFA},p}$) and (e) number of selected species in locally reduced mechanism (NS) ^[21]

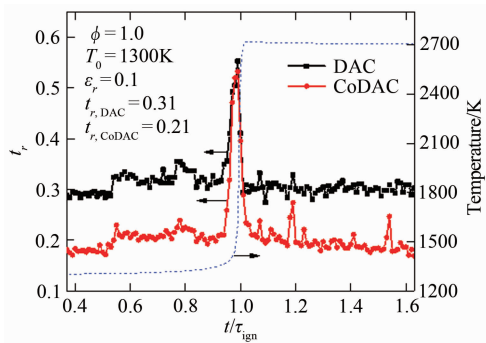


图3 使用 DAC 和 CoDAC 在初始条件为 $\phi = 1.0$, $T_0 = 1300\text{K}$ 和简化阈值 $\epsilon_r = 0.1$ 时相对计算时间和温度随时间的变化^[21]

Fig.3 Evolution of relative computational time t_r and temperature for auto-ignition simulation with DAC and CoDAC at $\phi = 1.0$, $T_0 = 1300\text{K}$ and reduction threshold $\epsilon_r = 0.1$ ^[21]

2 Krylov 子空间近似的指数积分格式

对于如下的燃烧化学反应常微分方程问题:

$$\frac{d\phi}{dt} = \omega(\phi), \quad \phi(t=0) = \phi_0 \quad (1)$$

二阶的指数积分格式可以表示为^[70]:

$$\phi_{k+1} = \phi_k + t_k \phi_1(t_k J_k) \omega_k, \quad t_k \in [0, h] \quad (2)$$

式中 ϕ 表示包括温度和组分质量分数在内的微分方程变量, ω_k 表示各个变量的化学反应速率, h 为时间步长, 当时间步长较短时可认为 Jacobian 矩阵 $J_k = \partial \omega_k / \partial \phi_k$ 是近似恒定的, 矩阵的 ϕ 函数定义为:

$$\phi_0(z) = \exp(z), \quad \phi_l(z) = z \phi_{l+1}(z) + (1/l!) \quad (3)$$

此时, 常微分方程的求解变成了对一般形式为 $\phi_1(\tau A)v$ 的向量的求解, 其中 A 为在 $n \times n$ 维实空间 $R^{n \times n}$ 中的矩阵, v 为在 n 维实空间 R^n 中的向量。

当 n 很大时, ϕ 函数的计算需要巨大的计算量, 利用 Krylov 子空间的性质, 组合 $\phi_1(\tau A)v$ 可以方便地在更小的 m 维 Krylov 子空间中得到近似。Krylov 子空间是由向量序列 $v, Av, A^2v, \dots, A^{m-1}v$ 张成的空间, 构造 Krylov 子空间的算法称为 Arnoldi 算法^[77]。原向量 $\phi_1(\tau A)v$ 在 Krylov 子空间中的近似可以表示为^[77]:

$$\begin{aligned} \phi_1(\tau A)v &\approx \beta V_m \phi_1(\tau H_m) e_1 + \\ &\beta h_{m+1,m} \tau e_m^T \phi_2(\tau H_m) e_1 v_{m+1} \end{aligned} \quad (4)$$

式中 $\beta = \|v\|$, $V_m = (v_1, v_2, \dots, v_m)$ 为 Krylov 子空间的基向量, H_m 为上 Hessenberg 矩阵, 是原矩阵 A 在 Krylov 子空间中的投影, e_1 和 e_m 分别表示第 1 维和第 m 维单位向量。当矩阵 A 在 Krylov 子空间中投影为 H_m 时, H_m 的特征值称为 Ritz 值, 随着 m 的增加, 收敛于原矩阵 A 模最大的特征值。这一重要性质使 Krylov 子空间广泛应用于近似求解矩阵特征值问题^[97]。通过近似式(4), 原 n 维问题降为 m 维问题, 使指数格式求解所需的计算量显著降低。

Bisetti^[82] 使用四阶 Rosenbrock 指数格式 $\exp4$ ^[98] 计算了火焰的自着火过程, 结果表明, 尽管使用大时间步长时非线性系统刚性很大, 但指数格式方法仍是稳定的。Curtis 等^[83] 对比了 CPU 和 GPU 计算时 $\exp4$ 和 $\expbr43$ 指数积分格式的计算效率, 结果表明 2 种指数积分格式在 CPU 和 GPU 上都慢于隐式求解器 CVODE 和 Radau-IIA。然而, 四阶指数积分格式每推进 1 个时间步长需要计算 3 次矩阵指数函数。而矩阵指数函数的计算十分耗时, 为了实现加速计算, 应尽量减少计算次数。因此, 刘再刚等^[84] 使用二阶指数格式, 如式(2), 并引入 Schur 分解方法有效控制了算法的舍入误差^[99], 发展了用于加速燃烧化学反应计算的指数积分求解器。

指数格式算法的计算效率可以使用简单的燃烧模型来估计。带配对混合 (Pairwise mixing) 的局部搅拌反应器 (Partially-Stirred Reactor, PaSR) 是一个假设的反应器^[100]。这种反应器可以用于模拟湍流燃烧数值模拟中的小尺度混合和反应过程, 常用于检验燃烧化学反应计算方法和 ISAT 方法的准确性和计算效率。模拟使用的燃料和参数与 Liu 等^[21] 的研究相同, PaSR 入流由 3 部分组成, 分别为甲烷、甲烷-空气燃烧后的平衡产物以及空气, 并分别对应 Sandia Flame 系列火焰的主射流、值班射流和空气伴流。在 Liu 等^[21] 的研究中, CoDAC 在 PaSR 模拟中得到了与 LES 模拟相近的加速结果, 表明了 PaSR 能合理估计 LES 的计算效率。对于燃烧化学反应问题, 还可以同时使用一些加速算法。CoDAC 简化应用于指数格式可以减少算法中矩阵 A 和 v 的维数, SpeedCHEM(SC) 库^[101] 中的稀疏矩阵算法和解析 Jacobian 矩阵算法可以降低矩阵存储所需的内存空间, 并加速 Jacobian 矩阵和 Arnoldi 算法中矩阵-向量乘法 Av 的计算。MTS 方法^[69] 可以分离刚性问题中的刚性部分和非刚性部分, 从而降低刚性方程组的数量。在指数格式中, 作用与 CoDAC 相同, 可以减少算法中矩阵 A 和 v 的维数。Liu 等^[99] 将指数积分

格式与 SC 库、CoDAC 简化和 MTS 方法结合, 并与 DVODE 求解器的计算结果作了详细对比, 不同的组合算例列于表 1。

表 1 使用不同加速方法的算例设置

Table 1 Simulated cases for different acceleration methods

加速方法\求解器	DVODE	指数格式
Non	R	-
SC	As	Bs
SC + CoDAC	Asc	Bsc
SC+MTS	Asm	Bsm
SC + CoDAC + MTS	Ascsm	Bscsm

图 4 所示是分别使用 GRI-Mech 3.0^[102] 和 USC Mech II^[103] (111 组分/784 反应) 计算得到的结果。图中的加速因子和误差均以表 1 中的参考工况 R 为基准, 加速因子和误差的详细定义可参考文献^[99]。从图中可以看出, 在同等精度并同时采用了 SC 的情况下, 使用指数格式的计算速度均显著快于使用隐式格式求解器 DVODE, 并且加速效果显著优于使用

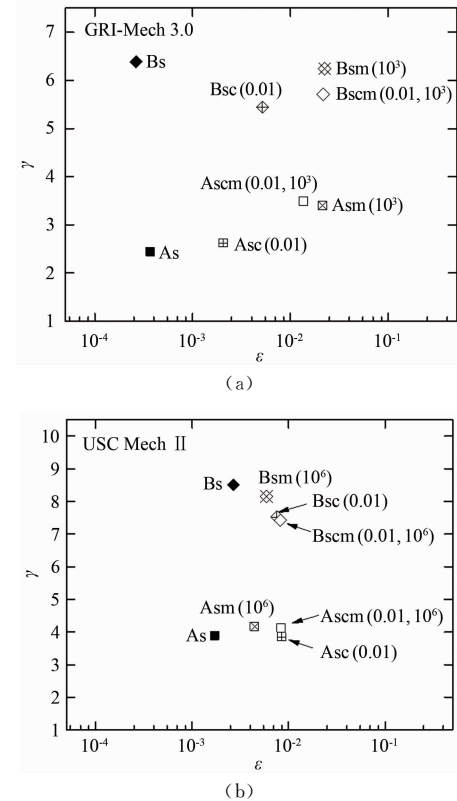


图 4 使用反应机理 (a) GRI-Mech 3.0^[102] 和 (b) USC Mech II^[103] 得到的表 1 中算例的加速因子 γ 与最大平均相对误差 ϵ 的关系。Xsc(ϵ_r), Xsm(α) 和 Xscm(ϵ_r, α) 表示表 1 所列工况算例, 括号中的数值 ϵ_r 和 α 分别表示 CoDAC 简化阈值和 MTS 安全因子^[99]

Fig.4 The speedup factor γ as functions of maximum averaged relative error ϵ for the cases in Table 1 with (a) GRI-Mech 3.0^[102] and (b) USC Mech II^[103]. Xsc(ϵ_r), Xsm(α) and Xscm(ϵ_r, α) represent the cases in Table 1 and numbers ϵ_r and α in the parentheses represent the reduction threshold of CoDAC and the safety factor of MTS, respectively^[99]

DVODE 结合 3 种加速算法。但指数格式结合 CoDAC 和 MTS 加速算法时,不仅计算精度下降,计算效率也有所下降。从图 5 可以看出,效率下降主要是由 CoDAC 和 MTS 带来的额外开销导致的。因此只使用含 SC 的指数格式可以得到最佳的加速效果。

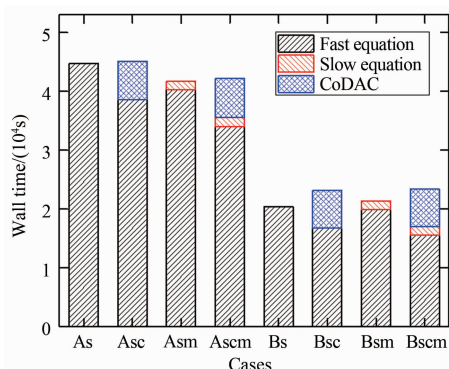


图5 使用 USC Mech II^[103]时,表1中的算例中用于计算快方程、慢方程和 CoDAC 简化的壁面时间^[99]

Fig.5 Wall time spent on fast equation integration, slow equation integration and CoDAC reduction for the cases in Table 1 with USC Mech II^[99, 103]

指数格式的加速效果一方面来源于大步长显式时间推进的优势,另一方面是由于与 Krylov 子空间近似的降维效果。从图 6 中可以看到,Krylov 子空间的大小增长速度远低于刚性方程组规模的增速。由此可知,在化学反应计算中应用指数格式在保证计算精度的同时可以显著提高计算速度。因此,其在燃烧 LES 中有很好的应用前景。指数格式求解器直接求解化学反应方程组,如果与查表类加速方法,如 ISAT 相结合,可以进一步降低化学反应计算时间,从而实现快速高精度的湍流燃烧数值模拟,从而使得详细化学反应机理用于实际发动机燃烧室湍流燃烧数值模拟成为可能,并以此指导湍流燃烧研究和燃烧器设计与实验。

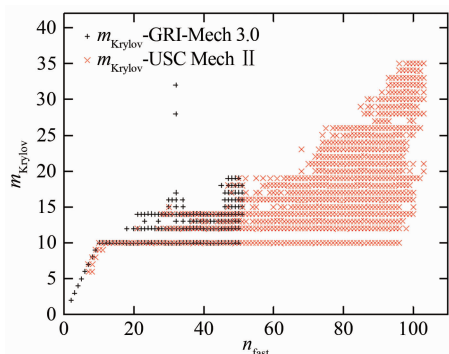


图6 使用 GRI-Mech 3.0^[102]和 USC Mech II^[103]机理时表1中算例 Ascm 和 Bscm 的 Krylov 子空间维数(m_{Krylov})随快方程数量(n_{fast})的变化^[99]

Fig.6 The dimension of the Krylov subspace (m_{Krylov} as a function of the number of fast equations (n_{fast}) for cases Ascm and Bscm shown in Table 1 with the mechanisms of GRI-Mech 3.0^[102] and USC Mech II^[99, 103]

3 结 论

在湍流燃烧数值模拟中使用详细化学反应机理可以显著提高燃烧反应计算精度,但是由此导致的计算量激增是阻碍大规模高精度燃烧数值模拟的主要因素之一。在计算过程中动态、自适应地进行化学反应机理简化可以获得一定的加速效果。然而,在并行燃烧数值模拟中,由于燃烧场中火焰反应区域的分布不均匀,处理器核心的负载极度不平衡,且核心之间需要进行必要的同步通信,加速效果在很大程度上不能充分发挥。相比之下,使用刚性求解器得到的加速将直接作用于每个处理器核心,更有利于整体计算效率提高。相比于常见的隐式格式以及 CoDAC 和 MTS 加速方法,在同等精度下,Krylov 子空间近似的指数积分格式对化学反应计算的加速效果更为显著,加速主要来源于指数格式的显式大时间步推进能力和 Krylov 子空间近似的降维效果。

为了进一步提高化学反应的求解速度,首先,可行的方法是以高效积分求解器为基础,紧密结合查表类方法,互相弥补 2 种方法的不足:用查表代替重复性计算,用高效积分补充表中的元素。其次,使用自适应网格以及自适应平衡处理器核心负载的算法,可以有效避免计算资源的空闲,提高整体计算效率。最后,燃烧化学反应的求解涉及的浮点数运算密集,较适合使用图形处理器架构进行运算,这也是燃烧数值模拟加速的一个发展方向。

致谢:感谢国家自然科学基金项目(91441131 和 U1738113)的支持。

参考文献:

- [1] Ihme M, Pitsch H. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model; 2. Application in LES of Sandia flames D and E [J]. Combustion and Flame, 2008, 155(1-2): 90-107.
- [2] Benim A C, Iqbal S, Meier W, et al. Numerical investigation of turbulent swirling flames with validation in a gas turbine model combustor[J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 110: 202-212.
- [3] Olbricht C, Stein O T, Janicka J, et al. LES of lifted flames in a gas turbine model combustor using top-hat filtered PFGM chemistry[J]. Fuel, 2012, 96(1): 100-107.
- [4] Donini A, Bastiaans R J M, van Oijen J A, et al. A 5-D implementation of FGM for the large eddy simulation of a stratified swirled flame with heat loss in a gas turbine combustor[J]. Flow Turbulence and Combustion, 2017, 98 (3): 887-922.
- [5] Zhang H, Ye T, Wang G, et al. Large eddy simulation of turbulent premixed swirling flames using dynamic thickened flame with tabulated detailed chemistry[J]. Flow Turbulence and Combustion, 2017, 98(3): 841-885.

- [6] Zhou X J, Jiang X, Martinez D M. The effects of chemical kinetic mechanisms on large eddy simulation (LES) of a nonpremixed hydrogen jet flame[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, 41(26): 11427-11440.
- [7] Srinivasan S, Menon S. Linear eddy mixing model studies of high karlovitz number turbulent premixed flames[J]. *Flow Turbulence and Combustion*, 2014, 93(2): 189-219.
- [8] Jangi M, Zhao X Y, Haworth D C, et al. Stabilization and liftoff length of a non-premixed methane/air jet flame discharging into a high-temperature environment: An accelerated transported PDF method[J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162(2): 408-419.
- [9] Elbahloul S, Rigopoulos S. Rate-Controlled Constrained Equilibrium (RCCE) simulations of turbulent partially premixed flames (Sandia D/E/F) and comparison with detailed chemistry [J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162(5): 2256-2271.
- [10] Raman V, Pitsch H. A consistent LES/filtered-density function formulation for the simulation of turbulent flames with detailed chemistry[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2007, 31: 1711-1719.
- [11] Popov P P, Pope S B. Large eddy simulation/probability density function simulations of bluff body stabilized flames[J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(12): 3100-3133.
- [12] Hiremath V, Lantz S R, Wang H F, et al. Computationally-efficient and scalable parallel implementation of chemistry in simulations of turbulent combustion [J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(10): 3096-3109.
- [13] Zhang H W, Garmory A, Cavaliere D E, et al. Large Eddy Simulation/Conditional Moment Closure modeling of swirl-stabilized non-premixed flames with local extinction [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2015, 35: 1167-1174.
- [14] Zhang H, Mastorakos E. Modelling local extinction in Sydney swirling non-premixed flames with LES/CMC[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36(2): 1669-1676.
- [15] Rittler A, Proch F, Kempf A M. LES of the Sydney piloted spray flame series with the PFGM/ATF approach and different sub-filter models[J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162(4): 1575-1598.
- [16] Minotti A, Bruno C, Cozzi F. A LES simulation of a CH₄/air microcombustor with detailed chemistry [J]. *Combustion Science and Technology*, 2011, 183(6): 554-574.
- [17] Fooladgar E, Chan C K, Nogenmyr K J. An accelerated computation of combustion with finite-rate chemistry using LES and an open source library for In-Situ-Adaptive Tabulation[J]. *Computers & Fluids*, 2017, 146: 42-50.
- [18] Lu T, Law C K. Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2009, 35(2): 192-215.
- [19] Brown P N, Byrne G D, Hindmarsh A C. VODE, a variable-coefficient ODE solver [J]. *Siam Journal on Scientific and Statistical Computing*, 1989, 10(5): 1038-1051.
- [20] Petzold L R. A description of DASSL: A differential/algebraic system solver [R]. Sandia National Laboratories, SAND82-8637, 1982.
- [21] Liu Z, Han W, Kong W, et al. LES modelling of turbulent non-premixed jet flames with correlated dynamic adaptive chemistry[J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2018, 22(4): 694-713.
- [22] Tonse S R, Moriarty N W, Frenklach M, et al. Computational economy improvements in PRISM[J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2003, 35(9): 438-452.
- [23] Li G Y, Hu J S, Wang S W, et al. Random sampling-high dimensional model representation (RS-HDMR) and orthogonality of its different order component functions[J]. *Journal of Physical Chemistry A*, 2006, 110(7): 2474-2485.
- [24] Li G, Rabitz H, Hu J, et al. Regularized random-sampling high dimensional model representation (RS-HDMR)[J]. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2008, 43(3): 1207-1232.
- [25] Pope S B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation [J]. *Combustion Theory and Modelling*, 1997, 1(1): 41-63.
- [26] Yang B, Pope S B. Treating chemistry in combustion with detailed mechanisms - In situ adaptive tabulation in principal directions premixed combustion[J]. *Combustion and Flame*, 1998, 112(1-2): 85-112.
- [27] Contino F, Jeanmart H, Lucchini T, et al. Coupling of in situ adaptive tabulation and dynamic adaptive chemistry: An effective method for solving combustion in engine simulations [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(2): 3057-3064.
- [28] Sun W, Won S H, Ju Y. In situ plasma activated low temperature chemistry and the S-curve transition in DME/oxygen/helium mixture[J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(8): 2054-2063.
- [29] Lefkowitz J K, Uddi M, Windom B C, et al. In situ species diagnostics and kinetic study of plasma activated ethylene dissociation and oxidation in a low temperature flow reactor[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2015, 35(3): 3505-3512.
- [30] Peters N, Kee R J. The computation of stretched laminar methane air diffusion flames using a reduced 4-step mechanism [J]. *Combustion and Flame*, 1987, 68(1): 17-29.
- [31] Chen J Y. A general procedure for constructing reduced reaction mechanisms with given independent relations[J]. *Combustion Science and Technology*, 1988, 57(1-3): 89-94.
- [32] Ju Y, Niioka T. Reduced kinetic mechanism of ignition for nonpremixed hydrogen/air in a supersonic mixing layer[J]. *Combustion and Flame*, 1994, 99(2): 240-246.
- [33] Law C K. *Combustion physics*[M]. New York: Cambridge University Press, 2006.
- [34] Lam S H, Goussis D A. The CSP method for simplifying kinetics[J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 1994, 26(4): 461-486.
- [35] Maas U, Pope S B. Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space[J]. *Combustion and Flame*, 1992, 88(3): 239-264.
- [36] Lu T F, Law C K. A directed relation graph method for mechanism reduction [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2005, 30: 1333-1341.
- [37] Lu T F, Law C K. On the applicability of directed relation graphs to the reduction of reaction mechanisms[J]. *Combustion and Flame*, 2006, 146(3): 472-483.
- [38] Sun W T, Chen Z, Gou X L, et al. A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(7): 1298-1307.
- [39] Gou X L, Chen Z, Sun W T, et al. A dynamic adaptive chemistry scheme with error control for combustion modeling with a large detailed mechanism[J]. *Combustion and Flame*, 2013, 160(2): 225-231.
- [40] Wang W, Gou X L. An improved path flux analysis with multi generations method for mechanism reduction[J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2016, 20(2): 203-220.

- [41] He K, Androulakis I P, Ierapetritou M G. On-the-fly reduction of kinetic mechanisms using element flux analysis[J]. Chemical Engineering Science, 2010, 65(3): 1173-1184.
- [42] Androulakis I P, Grenda J M, Bozzelli J W. Time-integrated pointers for enabling the analysis of detailed reaction mechanisms[J]. Aiche Journal, 2004, 50(11): 2956-2970.
- [43] Zhang S, Broadbelt L J, Androulakis I P, et al. Comparison of biodiesel performance based on HCCI engine simulation using detailed mechanism with on-the-fly reduction[J]. Energy & Fuels, 2012, 26(2): 976-983.
- [44] Gao X, Yang S, Sun W. A global pathway selection algorithm for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms[J]. Combustion and Flame, 2016, 167: 238-247.
- [45] Schwer D A, Lu P, Green W H. An adaptive chemistry approach to modeling complex kinetics in reacting flows[J]. Combustion and Flame, 2003, 133(4): 451-465.
- [46] Liang L, Stevens J G, Farrell J T. A dynamic multi-zone partitioning scheme for solving detailed chemical kinetics in reactive flow computations [J]. Combustion Science and Technology, 2009, 181(11): 1345-1371.
- [47] Liang L, Stevens J G, Raman S, et al. The use of dynamic adaptive chemistry in combustion simulation of gasoline surrogate fuels[J]. Combustion and Flame, 2009, 156(7): 1493-1502.
- [48] Ren Z, Xu C, Lu T, et al. Dynamic adaptive chemistry with operator splitting schemes for reactive flow simulations[J]. Journal of Computational Physics, 2014, 263: 19-36.
- [49] Liang L, Stevens J G, Farrell J T. A dynamic adaptive chemistry scheme for reactive flow computations [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, 32(1): 527-534.
- [50] Yang H T, Ren Z Y, Lu T F, et al. Dynamic adaptive chemistry for turbulent flame simulations[J]. Combustion Theory and Modelling, 2013, 17(1): 167-183.
- [51] Ren Z Y, Liu Y F, Lu T F, et al. The use of dynamic adaptive chemistry and tabulation in reactive flow simulations [J]. Combustion and Flame, 2014, 161(1): 127-137.
- [52] Liang Y W, Pope S B, Pepiot P. A pre-partitioned adaptive chemistry methodology for the efficient implementation of combustion chemistry in particle PDF methods[J]. Combustion and Flame, 2015, 162(9): 3236-3253.
- [53] 刘再刚, 杨帆, 孔文俊. 基于 CO-DAC 的合成气反应极限分析[J]. 燃烧科学与技术, 2017, 23(1): 61-67.
Liu Z G, Yang F, Kong W J. Reaction limit analysis of syngas based on CO-DAC method[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2017, 23(1): 61-67.
- [54] Oluwole O O, Ren Z, Petre C, et al. Decoupled species and reaction reduction: An error-controlled method for Dynamic Adaptive Chemistry simulations[J]. Combustion and Flame, 2015, 162(5): 1934-1943.
- [55] Sun W, Gou X, El-Asrag H A, et al. Multi-timescale and correlated dynamic adaptive chemistry modeling of ignition and flame propagation using a real jet fuel surrogate model[J]. Combustion and Flame, 2015, 162(4): 1530-1539.
- [56] Aceves S M, Martinez-Frias J, Flowers D L, et al. A decoupled model of detailed fluid mechanics followed by detailed chemical kinetics for prediction of iso-octane HCCI combustion[R]. SAE Technical Paper, 2001-01-3612, 2001.
- [57] Goldin G M, Ren Z, Zahirovic S. A cell agglomeration algorithm for accelerating detailed chemistry in CFD [J]. Combustion Theory and Modelling, 2009, 13(4): 721-739.
- [58] Xie W, Lu Z, Ren Z, et al. Dynamic adaptive chemistry via species time-scale and Jacobian-aided rate analysis [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2017, 36(1): 645-653.
- [59] Li Z, Lewandowski M T, Contino F, et al. Assessment of on-the-fly chemistry reduction and tabulation approaches for the simulation of moderate or intense low-oxygen dilution combustion[J]. Energy & Fuels, 2018, 32(10): 10121-10131.
- [60] Xie W, Lu Z, Ren Z, et al. Dynamic adaptive acceleration of chemical kinetics with consistent error control[J]. Combustion and Flame, 2018, 197: 389-399.
- [61] Zhou D, Tay K L, Li H, et al. Computational acceleration of multi-dimensional reactive flow modelling using diesel/biodiesel/jet-fuel surrogate mechanisms via a clustered dynamic adaptive chemistry method[J]. Combustion and Flame, 2018, 196: 197-209.
- [62] Zhou L, Zhong L, Qin W, et al. Application of cell agglomeration algorithm coupled with dynamic adaptive chemistry for transient engine simulation of diesel fuel [J]. Fuel, 2018, 234: 1313-1321.
- [63] Imren A, Haworth D C. On the merits of extrapolation-based stiff ODE solvers for combustion CFD[J]. Combustion and Flame, 2016, 174: 1-15.
- [64] Yang S, Ranjan R, Yang V, et al. Parallel on-the-fly adaptive kinetics in direct numerical simulation of turbulent premixed flame[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2017, 36(2): 2025-2032.
- [65] Perini F, Galligani E, Reitz R D. A study of direct and Krylov iterative sparse solver techniques to approach linear scaling of the integration of chemical kinetics with detailed combustion mechanisms[J]. Combustion and Flame, 2014, 161(5): 1180-1195.
- [66] Lu T F, Law C K, Yoo C S, et al. Dynamic stiffness removal for direct numerical simulations[J]. Combustion and Flame, 2009, 156(8): 1542-1551.
- [67] Gou X L, Sun W T, Chen Z, et al. A dynamic multi-timescale method for combustion modeling with detailed and reduced chemical kinetic mechanisms [J]. Combustion and Flame, 2010, 157(6): 1111-1121.
- [68] Zhou D, Yang W. A heterogeneous multiscale method for stiff combustion chemistry integration in reactive flows [J]. Combustion and Flame, 2018, 188: 428-439.
- [69] Gao Y, Liu Y, Ren Z, et al. A dynamic adaptive method for hybrid integration of stiff chemistry [J]. Combustion and Flame, 2015, 162(2): 287-295.
- [70] Hochbruck M, Ostermann A. Exponential integrators[J]. Acta Numerica, 2010, 19: 209-286.
- [71] Tangman D Y, Gopaul A, Bhuruth M. Exponential time integration and Chebychev discretisation schemes for fast pricing of options[J]. Applied Numerical Mathematics, 2008, 58(9): 1309-1319.
- [72] Hochbruck M, Honig M, Ostermann A. Regularization of nonlinear III-posed problems by exponential integrators[J]. ESAIM-Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 2009, 43(4): 709-720.
- [73] Tokman M, Loffeld J. Efficient design of exponential-Krylov integrators for large scale computing[J]. Procedia Computer Science, 2012, 1(1): 229-237.
- [74] Gaudreault S, Pudykiewicz J A. An efficient exponential time integration method for the numerical solution of the shallow water equations on the sphere[J]. Journal of Computational Physics, 2016, 322: 827-848.

- [75] Moler C, Van Loan C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later[J]. Siam Review, 2003, 45(1): 3-49.
- [76] Higham N J. The scaling and squaring method for the matrix exponential revisited[J]. Siam Journal on Matrix Analysis and Applications, 2005, 26(4): 1179-1193.
- [77] Saad Y. Analysis of some Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator[J]. Siam Journal on Numerical Analysis, 1992, 29(1): 209-228.
- [78] Sidje R B. Expokit: A software package for computing matrix exponentials[J]. Acm Transactions on Mathematical Software, 1998, 24(1): 130-156.
- [79] Niesen J, Wright W M. Algorithm 919: A Krylov subspace algorithm for evaluating the phi-functions appearing in exponential integrators[J]. Acm Transactions on Mathematical Software, 2012, 38(3): 1-19.
- [80] Lord G J, Stone D. New efficient substepping methods for exponential timestepping [J]. Applied Mathematics and Computation, 2017, 307: 342-365.
- [81] Vo H D, Sidje R B. Implementation of variable parameters in the Krylov-based finite state projection for solving the chemical master equation[J]. Applied Mathematics and Computation, 2017, 293: 334-344.
- [82] Bisetti F. Integration of large chemical kinetic mechanisms via exponential methods with Krylov approximations to Jacobian matrix functions[J]. Combustion Theory and Modelling, 2012, 16(3): 387-418.
- [83] Curtis N J, Niemeyer K E, Sung C-J. An investigation of GPU-based stiff chemical kinetics integration methods [J]. Combustion and Flame, 2017, 179: 312-324.
- [84] 刘再刚, 孔文俊. 求解刚性燃烧化学反应系统的 Krylov 子空间中的指数积分法[J]. 工程热物理论, 2018, 39(9): 2062-2071.
- Liu Z G, Kong W J. An exponential integrator in Krylov subspace to solve stiff combustion chemical reaction system[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2018, 39(9): 2062-2071.
- [85] 刘再刚, 隋春杰, 韩文虎, 等. 基于 CO-DAC 反应机理简化的非预混射流火焰的大涡模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2018, 24(1): 39-45.
- Liu Z G, Sui C J, Han W H, et al. LES for turbulent non-premixed jet flame with CO-DAC reduction[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2018, 24(1): 39-45.
- [86] Barlow R S, Frank J H, Karpets A N, et al. Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure [J]. Combustion and Flame, 2005, 143(4): 433-449.
- [87] Yang S, Wang X J, Yang V, et al. Comparison of flamelet/progress-variable and finite-rate chemistry LES models in a preconditioning scheme[R]. AIAA-2017-0605, 2017.
- [88] Yang S, Wang X J, Yang V, et al. Comparison of finite-rate chemistry and flamelet/progress-variable models II: Sandia Flame E[R]. AIAA-2018-1427, 2018.
- [89] Yang S, Ranjan R, Yang V, et al. Sensitivity of predictions to chemical kinetics models in a temporally evolving turbulent non-premixed flame[J]. Combustion and Flame, 2017, 183: 224-241.
- [90] Wu K, Contino F, Yao W, et al. On the application of tabulated dynamic adaptive chemistry in ethylene-fueled supersonic combustion[J]. Combustion and Flame, 2018, 197: 265-275.
- [91] Contino F, Lucchini T, D'errico G, et al. Simulations of advanced combustion modes using detailed chemistry combined with tabulation and mechanism reduction techniques[J]. SAE International Journal of Engines, 2012, 5: 185-196.
- [92] Zhou L, Lu Z, Ren Z Y, et al. Numerical analysis of ignition and flame stabilization in an n-heptane spray flame [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015, 88: 565-571.
- [93] Lu Z, Zhou L, Ren Z Y, et al. Effects of spray and turbulence modelling on the mixing and combustion characteristics of an n-heptane spray flame simulated with dynamic adaptive chemistry [J]. Flow Turbulence and Combustion, 2016, 97(2): 609-629.
- [94] Huang Y, Lu Z, Zheng L. Study of $\text{SiCl}_4/\text{H}_2/\text{O}_2$ chemical kinetics and its application to fused silica glass synthesis[J]. Combustion Science and Technology, 2018, 190(10): 1861-1885.
- [95] Shi Y, Liang L, Ge H-W, et al. Acceleration of the chemistry solver for modeling DI engine combustion using dynamic adaptive chemistry (DAC) schemes[J]. Combustion Theory and Modelling, 2010, 14(1): 69-89.
- [96] Lu L, Lantz S R, Ren Z, et al. Computationally efficient implementation of combustion chemistry in parallel PDF calculations[J]. Journal of Computational Physics, 2009, 228(15): 5490-5525.
- [97] Stewart G W. A Krylov-Schur algorithm for large eigenproblems [J]. Siam Journal on Matrix Analysis and Applications, 2002, 23(3): 601-614.
- [98] Hochbruck M, Lubich C, Selhofer H. Exponential integrators for large systems of differential equations[J]. Siam Journal on Scientific Computing, 1998, 19(5): 1552-1574.
- [99] Liu Z G, Consalvi J L, Kong W J. An exponential integrator with Schur-Krylov approximation to accelerate combustion chemistry computation[J]. Combustion and Flame, 2019, 203: 180-189.
- [100] Lu L Y, Pope S B. An improved algorithm for in situ adaptive tabulation[J]. Journal of Computational Physics, 2009, 228(2): 361-386.
- [101] Perini F, Galligani E, Reitz R D. An analytical Jacobian approach to sparse reaction kinetics for computationally efficient combustion modeling with large reaction mechanisms [J]. Energy & Fuels, 2012, 26(8): 4804-4822.
- [102] Smith G P, Golden D M, Frenklach M, et al. GRI-Mech 3.0. [EB/OL]. (1999-07-30) [2018-08-27]. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.
- [103] Wang H, You X, Joshi A V, et al. USC Mech Version II: High-Temperature Combustion Reaction Model of $\text{H}_2/\text{CO}/\text{C}_1\text{-C}_4$ Compounds. [EB/OL]. (2007-05) [2018-08-27]. http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm.

作者简介:



刘再刚(1991-),男,河北石家庄人,博士研究生。研究方向:燃烧化学反应机理简化加速计算。通信地址:北京市北四环西路11号中国科学院工程热物理研究所(100190)。E-mail: zaigangliu@foxmail.com

(编辑:李金勇)