

ReaxRed 1.0 操作手册

ReaxRed 1.0 程序是碳氢燃料燃烧反应动力学机理的自动简化程序，目前 ReaxRed 1.0 分为 3 个简化子程序 `autods`、`autodr` 和 `autoqss`，共包含 6 种机理简化方法：DRG^[1]、DRGEP^[2]、Revised-DRG^[3]（对应 DRGMAX）、PFA^[4]、FPT^[5] 和基于 CSP 重要性指标的反应移除方法和基于 CSP 的准稳态方法^[6]。自动简化程序使用 Intel 编译器^[7]编译，在 Linux 系统上运行。

ReaxRed 1.0 程序的公开版本可以发邮件至 `xyli@scu.edu.cn`、`wangf@scu.edu.cn` 邮箱，我们会及时处理，感谢您的使用与建议。

一、使用流程

1. 程序的安装：将下载的文件 `reaxred-dist.tgz` 用“`tar xzf reaxred-dist.tgz`”命令解压后会产生文件夹 `reaxred-dist`，这个文件夹中包含 `autods`、`autodr` 和 `autoqss` 3 个子文件夹。3 个子文件夹中程序应均为可执行状态，如果不是的话，可使用 `compile` 文件将程序变为可执行状态。先用“`chmod +x compile`”命令将 `compile` 变成可执行文件。然后运行“`./compile`”命令，将文件夹中的其它文件变成可执行文件。使用过程中不要移动或删除这些文件。
2. 准备：运行该程序之前，首先建立工作目录，然后将需要简化的目标机理所对应的动力学文件和热力学文件分别命名为 `detail.inp` 和 `detail.dat`，并将其拷贝到工作目录下，最后根据需要将 `autods`、`autodr` 或者 `autoqss` 文件夹下的全部可执行文件拷贝到工作目录下即可。
3. 运行：在工作目录下直接用命令“`./autods`”、“`./autodr`”或“`./autoqss`”即可开始运行，运行过程中按照程序的指示，输入相应的参数，即可实现对详细机理的自动简化功能。
4. 建议：先使用子程序 `autods` 得到物种数最少的且最优的框架机理，然后在该框架机理的基础上运行子程序 `autodr` 得到物种数、反应数均是最少且最优的框架机理。如果需要进一步简化，可以在最后使用 `autoqss` 程序得到全局简化机理。

二、autods 介绍

1. 该子程序的功能是在详细机理中删除不重要物种及其相关的反应，从而得到简化的框架机理。该子程序包含了 DRG^[1]、DRGEP^[2]、Revised-DRG^[3]（对应 DRGMAX）、PFA^[4] 四种主流的简化方法，以及本课题组提出的 FPT 方法^[5]，在指定一种简化方法后对详细机理开始简化。简化的抽样点来源于 `sample` 的输出文件 `sample.data`（`sample` 是在 `chemkin2.0`^[8]中 `senkin`^[9]模块的基础上，

为实现多种条件下批量自动模拟点火而编写的 Fortran 程序)。该子程序运行结束后，可以给出与详细机理吻合较好的框架机理。

2. 该程序需要四个输入文件 in.sam、in.drg0、thres.dat 和 method.dat，这些文件可以提前做好，放在该工作目录下，也可以按照程序运行过程中的要求，在运行过程中输入相应参数即可。程序会从初始阈值（阈值的数量级为 10^{-4} ）开始运行，运行结束后增加一个步长进入下一轮的简化，直到阈值达到终止阈值，程序将结束运行，简化完成。

3. in.sam 内容如下：

```

CONP                                ! 表示该模拟过程是恒压条件下
EQUI  0.5  1.0  1.5                  ! 不同的当量比（可以多个）
FUEL  C2H4                            1.000 ! 燃料名称    摩尔百分比
OXID  O2                               0.210 ! 氧化物      摩尔百分比
OXID  N2                               0.790 ! 氧化物      摩尔百分比
PRES  1   10                          ! 压力条件（可以多个）
TEMP  4   1000.0  1600.0              ! 输入三数字，分别表示所要模拟的
                                       点火温度的数目、最低的起始温度，
                                       最高起始温度（在这个例子中，表
                                       示做四次温度不同的点火模拟，初
                                       始温度分别为 1000K、1200K、
                                       1400K、1600K），
END                                    ! 结束标志

```

这里三个当量比、两个压力、四个温度，那么 sample 程序就会运行 $3*2*4=24$ 个条件下的点火。sample 运行的一些信息会写到 out.sam 文件中。

4. autods 中的 5 种方法都是基于 DRG 的思想，其输入文件名字为 in.drg0。该文件中主要包含对重要物种的选择，为了保证运行顺利，重要物种中建议包含燃料，氧化物，产物等。输入文件 in.drg0 形式如下：

```

THRES  0.997                          !阈值标识  阈值大小
SPEC                                       !物种的标识
C2H4                                       !重要物种
N2                                           !重要物种
O2                                           !重要物种
CO2                                          !重要物种
H2O                                          !重要物种
END                                          !结束标识

```

运行过程中，程序会提示要求输入简化方法选项，输入相应数字后按回车键即可选取简化方法。简化过程自动进行的，无需人为操作。

5. thres.dat 形式如下

```

0.001  ! 初始阈值

```

0.001 ! 阈值的步长

0.2 ! 终止阈值

6. method.dat 形式如下

```
1 ! 选择的简化方法对应的标识（这里内容为 1，表示选择了 DRG
! 方法进行简化）
! 'DRG, choose 1'
! 'DRGEP, choose 2'
! 'DRGMAX, choose 3'
! 'PFA, choose 4'
! 'FPT, choose 5'
```

7. 运行结束后会生成 output.dat, 该文件包括简化的详细过程(包含运行了第几次简化, 删除的物种数目, 生成的框架机理与详细机理的点火时间的相对误差 ($\mathcal{E} = |t_{\text{detailed}} - t_{\text{skeletal}}| / t_{\text{detailed}}$)), 以此文件中物种数较少, 相对误差较小且在模拟条件下均能点火的框架机理作为最好的框架机理。此外还生成一些以“简化方法”开头的输出文件及其它文件, 内容如下:

方法-2delete-阈值.dat (删除的物种)

方法-阈值-物种数-反应数-最大误差-平均误差.inp (生成的框架机理)

方法-阈值-igtime.dat (框架机理的点火延迟时间)

igtime-detail.dat (详细机理的点火延迟时间)

igtimeRE.dat (框架机理和详细机理点火时间的相对误差)。

三、autodr 介绍

1. 该子程序以 Lu 和 Law 等提出的基于 CSP 重要性指标的反应移除方法^[6]为基础, 进一步对 autods 程序生成的框架机理进行简化, 删除不重要的反应, 进一步得到生成反应数目最少的最优框架机理。在运行该程序之前要把 autods 生成的框架机理改名为 skeletal.inp, 将其和详细机理的 detail.dat 拷贝到工作目录, 并将 autods 运行产生的 igtime-detail.dat 文件拷贝到工作目录。
2. 该程序需要两个输入文件 in.sam 和 thres.dat。in.sam 的输入可参考 autods 部分的介绍。thres.dat 文件中阈值的数量级为 10^{-4} 。这些文件可以提前做好, 放在工作目录下, 也可以在 autodr 程序运行时按照提示输入。程序会从初始阈值开始运行, 运行结束后增加一个步长进入下一轮的简化, 直到阈值达到终止阈值, 程序结束运行, 简化完成。
3. 运行结束后会生成 output.dat, 该文件包括简化的详细过程(包含运行了第几次简化, 删除的反应, 生成的框架机理与详细机理点火时间的相对误差, 以此文件中反应数较少, 相对误差较小且在模拟条件下均能点火的框架机理作为最好的框架机理。此外还生成一些以“CSPDR”开头的输出文件及其它文件, 内容如下:

CSPDR-阈值-物种数-反应数-最大误差-平均误差.inp (生成的框架机理)

CSPDR-阈值-删除的反应数-delreaction.dat (删除的反应)

CSPDR-阈值-igtime.dat (框架机理的点火延迟时间)

igtimeRE.dat (框架机理和详细机理点火时间的相对误差)。

四、autoqss 介绍

1. 该子程序以 Lu 和 Law 等提出的基于 CSP 的准稳态近似方法(QSSA)为基础, 进一步对 autods 和 autodr 程序生成的框架机理进行简化, 删除不重要的反应, 进一步得到生成反应数目最少的最优框架机理。在运行该程序之前要把 autods 或者 autodr 程序生成的框架机理改名为 CSPDR.inp, 并将其和详细机理的热力学文件 detail.dat 和详细机理模拟的点火延迟时间 igtime-detail.dat 以及 senk-qss 文件夹拷贝到工作目录。
2. 简化工作开始之前, 该子程序同样要用 sample 对 autods 程序生成的框架机理 CSPDR.inp 在同样工况下进行点火的模拟。
3. 该程序需要 3 个输入文件 in.sam、input 和 thres.dat。in.sam 的参数设置与之前的相同,

input 的内容是:

TLIF 0.00001000 ! 这个值是一个伪值, 不能起到控制作用, 但是需要

thres.dat 的内容与之前的文件有点区别:

1.0D-5 ! 设置快慢模式的分界点

1.0D-5 ! 初始阈值

1.1 ! 阈值步长

1.0 ! 终止阈值, 可以大于 1.0

输入文件参考前面的相关介绍。这些文件可以提前准备好, 放在该工作目录下, 也可以在程序运行时按照提示输入。程序会从初始阈值 (阈值的数量级为 10^{-5}) 开始运行, 运行结束后增加一个步长进入下一轮的简化, (此时的步长是倍数的关系, 不是增加的关系, 每次运行的阈值是前一个阈值的 1.1 倍) 直到阈值达到终止阈值, 程序将结束运行, 简化完成。

4. 运行完 sample 后, 会出现 igtime-CSPDR.dat 等文件, 然后 csp-sample 程序会开始对 CSPDR.inp 的模拟结果进行分析, 会得到 out.csp、qssa-sample.dat 等文件。其中 qssa-sample.dat 文件是非常重要的文件, 它里面的内容是所有物种在慢模式空间下的特征值及其对应的物种。接着运行 qssacode 会在指定的阈值下, 从 qssa-sample.dat 文件中选择准稳态物种(物种对应的特征值小于阈值的情况下, 被认定为准稳态物种), 然后进行准稳态近似处理, 得到全局简化机理 newmech.inp 和对应的 reduced.code(计算物种生成速率的子程序, 对应 CHEMKIN 2.0 的函数库 cklib.f 中的 CKWYP.f)。在得到简化机理

newmech.inp 之后, sample-qss 会对简化机理在 in.sam 下进行模拟, 并与详细机理读取初始阈值, 阈值的步长, 终止阈值, 程序会从初始阈值开始运行, 运行一个循环后增加一个步长进入下一轮的简化, 直到阈值达到终止阈值, 程序将结束运行, 简化完成。

5. 运行过程中要注意, 程序从 qssa-sample.dat 中选择的准稳态物种之后, 得到的简化机理出现了误差明显增大, 或者简化机理没有办法在 senkin 中求解(表现的就是 senkin 程序停止), 这种情况下, 我们可以找到是哪一个物种被选取之后发生了以上情况, 确定之后从 qssa-sample.dat 文件中找到该物种的哪一行, 然后删除这一行, 并保留空行, 然后更改阈值文件 thres.dat 中的第二行数值, 从新开始运行即可。
6. 运行结束后会生成 output.dat (简化过程的详细经过, 包含运行了第几次简化, 选定的准稳态物种个数, 生成的简化机理与详细机理的点火时间的相对误差), CSPqssa-阈值-准稳态物种个数-reduced.f (指定阈值下对生成的简化机理中物种的生成速率的子程序 CKWYP.f), CSPqssa-阈值-物种数-最大误差-平均误差.inp (生成的简化), CSPqssa-阈值-igtime.dat (简化机理的点火延迟时间), CSPqssa-阈值-准稳态物种的个数-qssaspec.dat (指定阈值下准稳态物种)。

参考文献:

- (1) DRG 方法, Proceedings of the Combustion Institute 30 (2005) 1333–1341
- (2) DRGEP 方法, Combustion and Flame 154 (2008) 67–81
- (3) Revised-DRG 方法, Energy Fuels 24 (2010) 6283–6293
- (4) PFA 方法, Combustion and Flame 157 (2010) 1298–1307
- (5) Liu, A. K.; Jiao, Y.; Li, S. H.; Wang F.; Li X. Y., Energy Fuels, 2014, 28, 5426-5433.
- (6) CSP 重要性指标的反应移除方法, Combustion and Flame 154 (2008) 153–163
- (7) <https://registrationcenter.intel.com/RegCenter/NComForm.aspx?ProductID=1523>
- (8) Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A.. Chemkin-II A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics, Sandia Report, SAND89-8009, Sandia National Laboratories, 1989.
- (9) Lutz A. E., Kee R. J., Miller J. A., Senkin, A FORTRAN program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis, SANDIA National Laboratories Report, SAND87-8248, Livermore, CA, 1990.