

# DeepFlame: 基于深度学习和高性能计算的反应流模拟开源平台\*

毛润泽<sup>1,2</sup>, 吴子恒<sup>1,2</sup>, 王迎瑞<sup>3</sup>, 徐嘉阳<sup>2</sup>, 章 严<sup>4</sup>, 陈 帆<sup>1,2</sup>

(1. 北京大学工学院, 北京 100871; 2. 北京科学智能研究院, 北京 100080;

3. 上海商汤智能科技有限公司, 上海 200233; 4. 中物院高性能数值模拟软件中心, 北京 100088)

**摘要:**近年来,深度学习被广泛认为是加速反应流模拟的一种可靠的方法。近期开发了一个名为 DeepFlame 的开源平台,可以在模拟反应流过程中实现对机器学习库和算法的支持。基于 DeepFlame,成功地采用深度神经网络来计算化学反应源项,并对该平台进行了高性能优化。首先,为了充分发挥深度神经网络(DNN)的加速潜力,本研究实现了 DeepFlame 对 DNN 多卡并行推理的支持,开发了节点内分割算法和主从通信结构,并完成了向图形处理单元(GPU)和深度计算单元(DCU)的移植。此外,还基于 Nvidia AmgX 库在 GPU 上实现了偏微分方程求解和离散稀疏矩阵构造。最后,对 CPU-GPU/DCU 异构架构上的新版本 DeepFlame 的计算性能进行了评估。结果表明,仅利用单个 GPU 卡,在模拟具有反应性的 Taylor Green 涡(TGV)时可以实现的加速比达到 15。

**关键词:**计算流体力学;反应流动;深度神经网络;图形计算处理器;偏微分方程

**中图分类号:**TP391.9

**文献标志码:**A

**doi:**10.3969/j.issn.1007-130X.2024.08.001

## DeepFlame: An open-source platform for reacting flow simulations empowered by deep learning and high-performance computing

MAO Run-ze<sup>1,2</sup>, WU Zi-heng<sup>1,2</sup>, WANG Ying-rui<sup>3</sup>, XU Jia-yang<sup>2</sup>, ZHANG Yan<sup>4</sup>, CHEN Zhi<sup>1,2</sup>

(1. College of Engineering, Peking University, Beijing 100871; 2. AI for Science Institute, Beijing 100080;

3. Shanghai SenseTime Intelligent Technology Co., Ltd., Shanghai 200233;

4. CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation, Beijing 100088, China)

**Abstract:** In recent years, deep learning has been widely recognized as a reliable approach to accelerate reacting flow simulations. In our recent work, we have developed an open-source platform named DeepFlame, which supports machine learning libraries and algorithms during the simulation of reacting flows. Leveraging DeepFlame, we have successfully employed deep neural networks (DNNs) to compute chemical reaction source terms. In this work, we focus on optimizing the platform for high-performance. Firstly, to fully harness the acceleration potential of DNNs, we implement support for multi-GPU parallel inference in DeepFlame, developing intra-node partitioning algorithms and a master-slave communication structure, and complete the migration to Graphics Processing Units (GPUs) and Deep Computing Units (DCUs). Furthermore, we implement the solution of partial differential equations and the construction of discrete sparse matrices on GPUs based on the Nvidia AmgX library. Finally, we evaluate the computational performance of the updated DeepFlame on a CPU-GPU/DCU heterogeneous architecture. The results indicate that using a single GPU card alone can achieve a maximum speedup of up to 15 times when simulating a reactive Taylor Green Vortex (TGV).

**Key words:** computational fluid dynamics; reacting flows; deep neural network; graphics computing

\* 收稿日期:2024-03-10;修回日期:2024-05-16

基金项目:国家自然科学基金(52276096,92270203,523B2062);光合基金 C (202302032372)

通信作者:陈帆(chenzhi@pku.edu.cn)

通信地址:100871 北京市海淀区北京大学工学院

Address: College of Engineering, Peking University, Haidian District, Beijing 100871, P. R. China

unit; partial differential equations

## 1 引言

反应流计算流体力学是发展先进能源与动力系统的重要技术。然而,在实际设备中,湍流流动和化学反应强烈耦合,模拟实际发动机工况下的多尺度、多相和多组分物理化学过程仍然是一个科学挑战。此外,在强湍流中模拟具有完全尺度和组分的反应流(称为直接数值模拟 DNS(Direct Numerical Simulation))需要相当大的计算资源。简化的建模方法,如雷诺平均 Navier-Stokes RANS(Reynolds-Averaged Navier-Stokes)方法和大涡模拟 LES(Large Eddy Simulation),主要依赖统计学或拓扑模型来施加物理假设以加速模拟。然而,这些模型的泛化能力一直是限制反应流模拟实际应用的主要问题。

为了解决准确性与效率之间的两难困境,近年来机器学习领域的迅速发展,为加速具有准确模型和详细化学的反应流模拟带来了新的可能。自 20 世纪 90 年代开始,就有很多研究人员开始了机器学习在反应流科学计算领域中的应用尝试<sup>[1-5]</sup>。其中,为了发挥深度神经网络推理相比传统迭代算法在计算效率方面的优势,一个重要的方向是利用深度神经网络求解反应流 CFD(Computational Fluid Dynamics)领域中最耗时的化学反应系统。然而,由于化学反应系统具有多尺度、刚性强的特点,经过十几年的发展,一直没有得到泛化性好、准确度高的深度神经网络。在 2022 年,我们的合作团队 Zhang 等人<sup>[6]</sup>提出了一种新的采样方法 DeepCK 来收集多尺度燃烧数据。相关的文献<sup>[7]</sup>表明,基于多尺度采样方法训练得到的神经网络可以准确地预测化学反应速率,且在一定的压力和温度范围下具有一定的泛化特性。

尽管机器学习在反应流科学计算中有着巨大的潜力,但由于缺乏能够同时耦合流体动力学、机器学习和化学反应动力学的高性能科学计算平台,相关的发展仍然有限。基于这一动机,本团队开发了一个名为 DeepFlame 的开源反应流 CFD 平台<sup>[7]</sup>,其具备利用最先进的机器学习算法和库的能力,同时具有较优的计算性能。简要说,DeepFlame 整合了相关的开源库来组织计算任务:用于求解一般连续流体流动问题的工具和函数从 OpenFOAM 中调用或派生,具体包括流场数据结

构、数值离散化、线性求解器的迭代、基于 MPI 的并行计算以及预处理/后处理;化学机理 I/O,多组分热化学数据结构和属性计算由开源化学反应动力学库 Cantera 处理;深度学习方面的支持则由 libTorch(Torch C++ API)完成,目前其在 DeepFlame 中用于处理输入/输出张量格式数据以及推理深度神经网络模型。此外,大规模科学计算依赖于现代高性能计算 HPC(High Performance Computing)平台,而现代超级计算机具有不同的架构设计与硬件平台,具备丰富的多样性。目前,DeepFlame 支持通用的 CPU/GPU 异构架构以及中国科学院曙光 CPU/DCU 架构。为了充分发挥 GPU 的性能优势,DeepFlame 中的神经网络推理部分已经实现了对 GPU 平台的兼容,同时提出了适应计算流体力学领域进程级并行逻辑的多卡神经网络推理方法。对于反应流科学计算中最大的热点——化学反应速率计算,相比于传统使用刚性常微分方程求解,DeepFlame 中利用 GPU 耦合神经网络的方式可以为整个计算过程提供最多 2 个量级的加速效果。此外,偏微分方程 PDE(Partial Differential Equations)数值求解是计算流体力学中最广泛应用的计算模式。针对这一部分,DeepFlame 基于 Nvidia AmgX 在 GPU 上对稀疏矩阵的离散构造以及线性方程组的求解进行了适配和优化,同样取得了 1 个量级的加速效果。

## 2 DeepFlame 理论模型与框架介绍

这里简要介绍 DeepFlame 中核心的反应流科学计算控制方程与深度神经网络,详细的内容可查阅文献<sup>[7]</sup>。

### 2.1 控制方程

对于  $N$  组分的可压反应流体系统,其质量、动量、组分和能量守恒方程可以使用张量标识法表示成如式(1)~式(4)所示:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho Y_a}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_a}{\partial x_i} = -\frac{\partial \rho Y_a V_{a,i}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_a \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho H)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i H)}{\partial x_i} = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} u_i) \quad (4)$$

在张量标识法中,符号的下标表示张量的阶数。其中,  $t$  表示时间;  $\mathbf{u}_i$  和  $\mathbf{x}_i$  分别为笛卡尔坐标系下  $i$  方向的速度和坐标;  $\rho$  表示混合物的密度;  $p$  表示压力。在式(2)中,  $\tau_{ij}$  表示应力张量,其由斯托克斯公式计算。在式(3)中,  $Y_\alpha$  和  $\dot{\omega}_\alpha$  分别表示组分  $\alpha$  的质量分数和净反应速率。  $\mathbf{V}_{\alpha,i}$  表示组分  $\alpha$  在  $i$  方向上的扩散速度,其由费克扩散定律计算。在式(4)中,  $H = h + 1/2$  表征总焓(绝对焓+动能),  $q_i$  表示在  $i$  方向上的能量流。

## 2.2 化学源项

本节主要介绍 DeepFlame 中化学源项的计算方法。其中,包含  $N$  个组分和  $M$  个反应的化学反应动力学系统可以用式(5)表示:

$$\sum_{a=1}^N \nu'_{aj} \mathcal{M}_a \rightleftharpoons \sum_{a=1}^N \nu''_{aj} \mathcal{M}_a \quad \text{for } j = 1, \dots, M \quad (5)$$

其中,  $\mathcal{M}_a$  表示组分  $\alpha$ ,  $\nu'_{aj}$  和  $\nu''_{aj}$  表示组分  $\alpha$  在反应  $j$  中的平衡系数。其中,组分  $\alpha$  的反应速率可以用式(6)计算获得:

$$\frac{dY_\alpha}{dt} = W_\alpha \sum_{j=1}^M (\nu''_{aj} - \nu'_{aj}) \left\{ K_{fj} \prod_{a=1}^N \left( \frac{\rho Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{\nu'_{aj}} - K_{rj} \prod_{a=1}^N \left( \frac{\rho Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{\nu''_{aj}} \right\} \quad (6)$$

其中,  $W_\alpha$  为组分  $\alpha$  的摩尔质量,  $K_{fj}$  和  $K_{rj}$  分别为反应  $j$  的正逆反应系数,通常情况下,化学源项  $\dot{\omega}_\alpha$  在式(3)中是基于式(6)形成的大规模刚性常微分方程 ODEs (Ordinary Differential Equation) 系统计算得出的。广泛研究表明,这种 ODEs 系统的计算成本在反应流动模拟中占据绝对的主导地位,甚至超过了流体方程计算成本的 100 倍。因此,为了避免直接求解化学 ODEs 系统,本文训练了具有 3 个隐藏层的全连接深度神经网络(DNN)来解决化学源项。简而言之, DNN 的输入向量  $\mathbf{x}(t) = \{T(t), P(t), \mathcal{F}(Y_\alpha(t))_{a=1, \dots, n}\}$  表示时间  $t$  时温度、压力和每种物种的质量分数。操作符  $\mathcal{F}$  表示 Box-Cox 变换 BCT (Box-Cox transformation), 旨在将质量分数从低阶量转换为  $O(1)$  量级。DNN 的输出是在相对较大的时间步长(约  $1 \mu\text{s}$ )内输入  $\mathbf{x}$  的变化量,并可以进一步用于获得化学源项  $\dot{\omega}_\alpha$ 。此外,为了使网络在保证准确性的前提下还具有不错的泛化能力, Mao 等人<sup>[7]</sup> 分别训练了 3 个 DNN 来预测预燃阶段、点火阶段和点火后阶段的反应速率。如图 1 所示,每个单元中的点火阶段是通过局部温度 ( $T$ ) 和放热速率 ( $HRR$  (Heat Release Rate), 标记为  $\dot{Q}$ ) 来确定的。需要注意的

是,当计算区域不属于这 3 个阶段的条件时化学反应通过 SUNDIALS 软件包提供的 CVODE (C Variable-Coefficient Ordinary Differential Equation Solver) 计算的,因为此时计算成本很低。

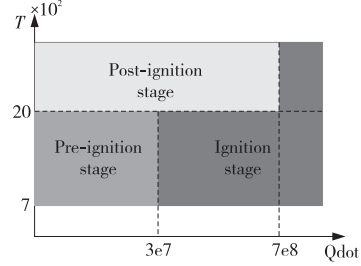


Figure 1 The criterion responsible for determining the ignition stage to choose the corresponding neural network

图 1 点火区间(神经网络选择基准)的定义方式

## 3 DeepFlame 理论模型与框架介绍

本节列举 2 个反应流中的经典问题来验证结果的正确性。

### 3.1 零维点火问题

零维点火问题是一个重要的评估化学源项计算精度的问题。图 2 比较了利用 Cantera 和 DeepFlame 在恒压条件下得到的氢自燃结果。此处采用了 Evans 等人<sup>[8]</sup> 开发的化学机理,包含 8 个物种和 16 个可逆反应。在本算例中,  $\text{H}_2$ /空气混合物的初始条件(温度、压力和当量比)设置为  $T = 1400 \text{ K}$ ,  $p = 1 \text{ atm}$  和  $\phi = 1$ 。从图 2 可以看出, DeepFlame 利用 DNN 和 CVODE 都能够准确捕捉到  $T$ 、 $p$  和  $Y$  的演化。总之,该案例验证了在 DeepFlame 中利用 AI for Science 方法求解化学反应源项的可靠性。

### 3.2 二维泰勒格林涡

接下来将在高维算例中验证 DNN 的可靠性。不同于零维算例,高维算例中涉及流动的影响,复杂的对流和扩散作用使得神经网络的输入更加多样,因此更加考验了神经网络的泛化性。3D reactive TGV 是最近在燃烧仿真社区构建的用于验证反应流 DNS 代码的基准案例,其可以很好地表征复杂流动与非预混火焰的相互作用<sup>[9]</sup>。本节算例是基于三维反应流泰勒格林涡 TGV (Taylor-Green Vortex) 构建的二维简化版本。

该算例的计算域被划分为  $512^2$  个等距网格,以完全解析火焰前缘。该算例模拟的物理时间为  $t = 0.25 \text{ ms}$  (一个漩涡周期参考时间),采用的机

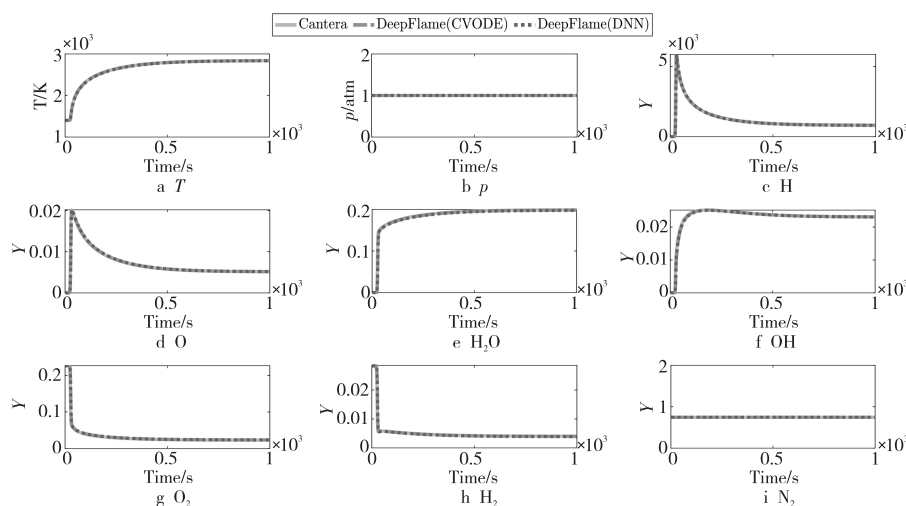


Figure 2 Zero-dimensional constant-pressure autoignition results comparison between Cantera and DeepFlame (with CVODE and DNN integrators)

图2 Cantera 与 DeepFlame 零维等压自点火计算结果比较

理包括 9 个组分和 12 个可逆反应<sup>[10]</sup>。图 3a 展示了使用 DNN 化学求解器计算得到的  $Y_{H_2}$  和  $T$  的轮廓;图 3b 展示了 DNN 和 CVODE 之间的定量比较,其中  $t = 0.25$  ms 时沿  $y$  中心线的  $Y_{H_2}$  和  $T$  的曲线显示出很好的一致性。需注意,图中的  $L$  表示计算域的特征长度,在实验中  $L = 2\pi$  mm。

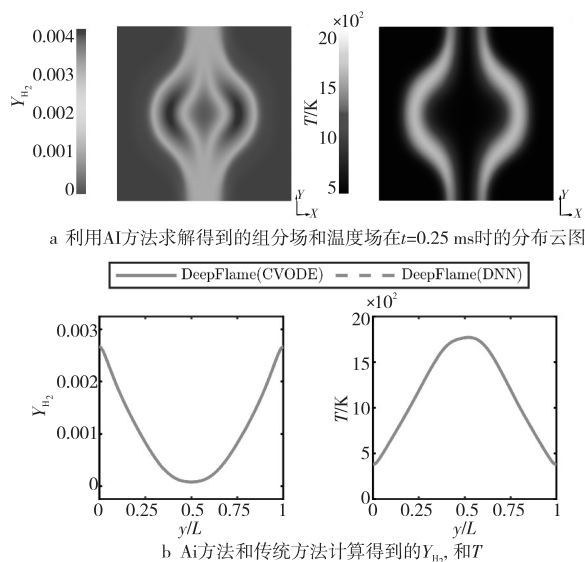


Figure 3 The simulation result of 2D reactive TGV

图3 二维泰勒格林涡仿真结果

## 4 GPU 实现与优化

### 4.1 多卡神经网络推理

在计算流体力学领域,最常用的并行方式是采用 domain decomposed 的方式通过划分计算域进行并行计算。因此,在并行实现的过程中均采用粒

度较大的进程级并行,即每个 CPU 核都会独立的执行一个进程。同样,OpenFOAM 也采用这种方式进行并行,因此当进行并行多卡推理时,存在着多进程对应单卡的情况。为了支持多 GPU,本文将全局通信器分割为节点内通信器,并根据节点上可用的 GPU 卡数进一步划分节点内通信器。最终获得的通信器称为本地通信器,其中包括一个 GPU 和多个 CPU。在本地通信器中,本文引入主从结构以减少 CPU-GPU 通信的开销。节点内部采用 MPI 共享内存通信方式来减小 CPU 之间的通信开销。具体来说,在 DeepFlame 中,采用了“Problem”和“Solution”数据结构来存储单元信息。“Problem”主要包含每个单元的  $P$ 、 $T$  和  $Y_a$  用于构建 DNN 的输入。“Solution”主要包含每个单元获得的放热速率和反应速率。开始时,所有 MPI rank 需要根据图 4 来分配特定的神经网络,并因此在每个 rank 中构建“GPUProblemList”和“CPUProblemList”。接下来,如果每个本地通信器中包含 4 个 CPU,则选择其中的一个作为子主节点,负责从本地通信器中的其他 rank 收集“GPUProblemList”,并将其发送到 GPU,接收推理结果组成的“GPUSolutionList”,接着将其分发给其他 CPU。此外,子主节点还负责根据为 3 个不同的深度神经网络设置的  $T$  和  $\dot{Q}$  阈值重新组装“GPUProblemList”,并将数据结构转换为适用于 Torch 的格式。为了提高仿真效率,在使用 CVODE 求解器时,工作节点之间采用动态负载平衡 DLB(Dynamic Load-Balance)来平衡化学负载,其具体实现采用开源软件 DLBFoam<sup>[11]</sup>中使用的



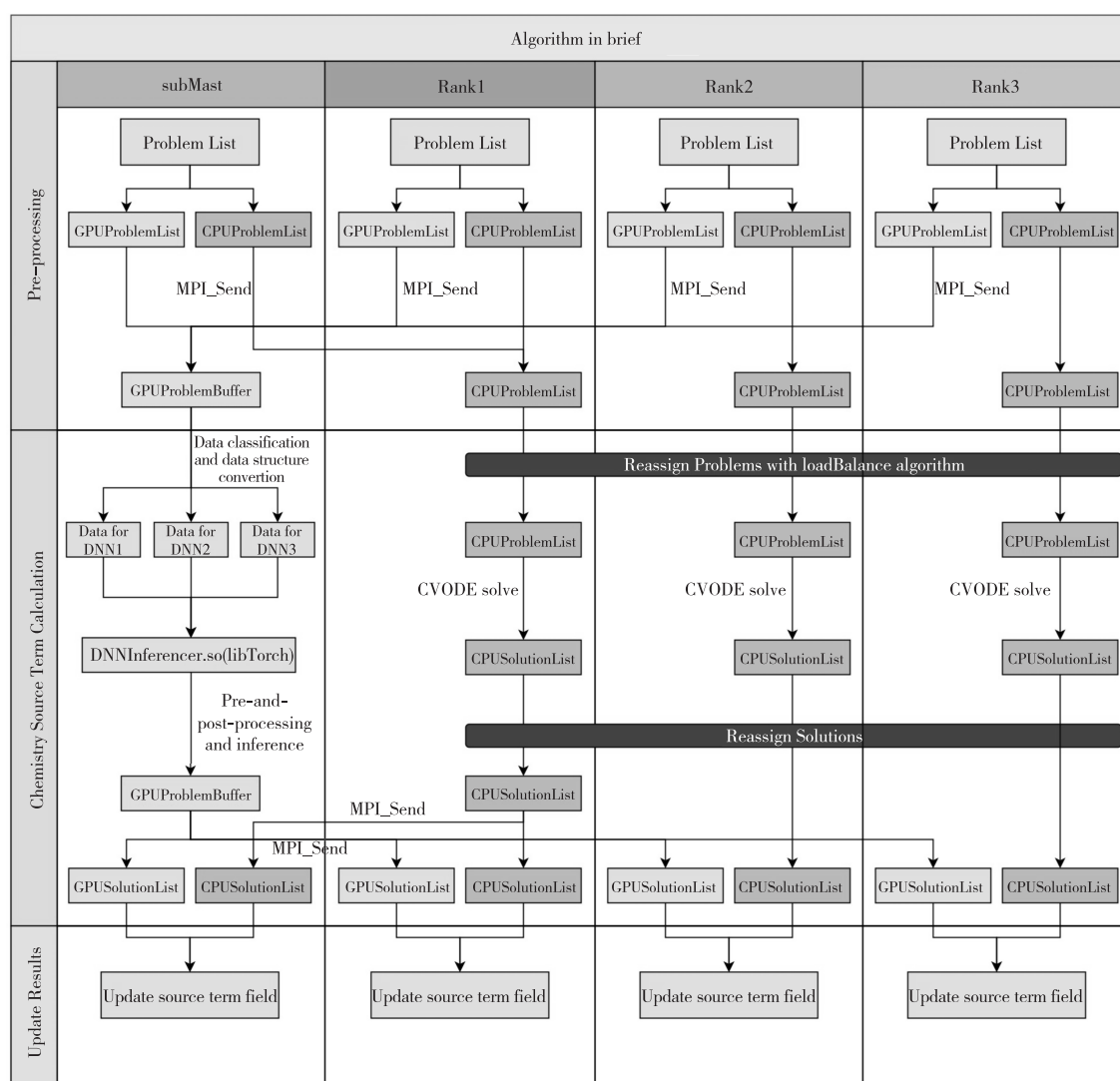


Figure 4 Flowchart of the algorithm that enables parallel computation of DNN on one node with 4 CPUs and 1 GPU

图4 节点内有4个CPU和1个GPU的DNN并行推理算法流程图

方法。

接下来将展示AI方法耦合GPU为反应流数值计算带来的加速效果。针对3.2节介绍过的2D reactive TGV算例,本节将对比4个CPU和1个GPU的计算性能。图5显示了基于3种不同架构的性能分析结果。左边的柱状图代表在CPU架构上使用传统CVODE求解器的性能,而右边的柱状图代表在GPU架构上采用DNN求解器计算化学源项后的性能。除了化学源项外,还显示了求解组分方程(YEqn)、压力泊松方程(pEqn)、质量守恒和动量方程(UEqn)以及热物理参数更新(correctThermo)所花费的成本。可以看出,尽管不同架构上的性能有所差异,但采用DNN可以在化学源项计算上实现最高97倍的加速和总体15倍的加速。由于Intel i7-12700KF是专为单节点计算而设计的,因此从NVIDIA3070Ti获得的加速相

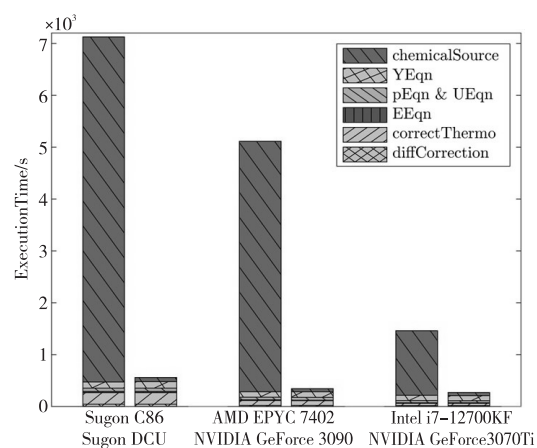


Figure 5 Comparison of performance of the 2D reactive TGV on different platforms using

AI method and traditional method

图5 2D反应TGV算例在不同平台上利用AI方法和传统方法的性能对比

对较低。结果表明,此时求解化学源项的计算成本明显降低,PDE 求解过程成为了新的热点。

## 4.2 偏微分方程求解

偏微分的求解过程主要包括 2 个环节,首先是基于控制方程和有限体积离散方法构建稀疏矩阵,接着再利用线性求解器求解构造的稀疏线性系统。在反应流计算中,一方面由于离散方式与矩阵构造方式较为复杂,另一方面由于线性系统较容易收敛,这 2 个环节的耗时比较接近。因此,在 DeepFlame 中,本文耦合了 Nvidia AmgX 线性求解器<sup>[12,13]</sup>,用于加速线性方程组的求解,同时基于 CUDA 核函数在 GPU 上实现了离散和稀疏矩阵的构造。对于后者,本文主要进行了以下优化来提升其在 GPU 上的性能:

(1)合并常用的离散计算模式。OpenFOAM 在之前的实现中为了确保通用性,对于每一种离散形式都单独进行了实现,因此引入了大量额外的循环累加操作。在 DeepFlame 中,将常用的计算模型进行了合并,在保证通用性的同时极大地提升了性能。

(2)改造 OpenFOAM 原生的数据存储格式。OpenFOAM 在构造矩阵的时候使用了其自己定义的 lduMatrix 格式,分别用存储矩阵中的上三角、对角和下三角数据。该矩阵格式在构造和使用时都存在着写冲突的问题<sup>[14]</sup>。因此,如图 6 所示直接用 CSR(Compressed Row Storage)格式来存储矩阵。该方式能解决矩阵构造时存在的写冲突,有利于 GPU 上线程级并行的高效实现。

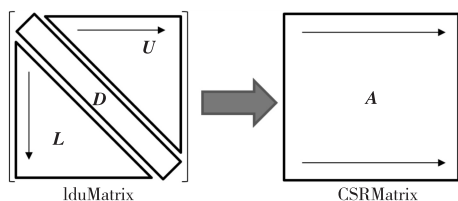


Figure 6 Conversion of sparse matrix formats

图 6 稀疏矩阵格式转化

(3)优化设备端数据存储。本文使用了如图 7 所示的数据管理方式实现的时间步间、方程间的数据重用降低 CPU 与 GPU 之间数据重用带来的性能损耗。

此外,对于边界问题,本文同样采用了重排的方法来解决原有数据结构在进行线程级并行时存在的写冲突。对于该部分优化,本文针对 3.2 节中介绍的 3D TGV 算例对比了 1 个 CPU 和 1 个 GPU 的计算性能,其具体结果如图 8 所示。图 8

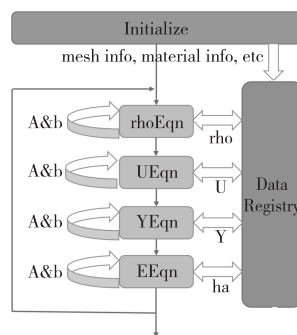


Figure 7 Data management logic on device

图 7 设备上的数据管理逻辑

中  $\rho Eqn$  表示密度方程,  $UEqn$  表示动量方程的求解耗时,  $YEqn$  表示组分方程,  $EEqn$  表示能量方程。此外,这里构造了 2 个不同大小的算例来验证 GPU 的加速潜力。从图 8 中首先可以看到反应流 CFD 中 PDE 的一些求解特性:(1)反应流 CFD 涉及化学反应,因此组分众多,描述组分对流扩散效应,得到组分方程( $YEqn$ )是耗时最多的部分;(2)相比于线性方程组的求解,反应流 CFD 中的离散过程,即稀疏矩阵构造部分也非常复杂,因此两者耗时接近,对于离散过程的优化在反应流 CFD 中是必要的。此外,图 8 中也展示了在 GPU 上的实现方法带来的加速效果。可以看出,目前的移植和优化可以实现 1 个量级的加速效果。

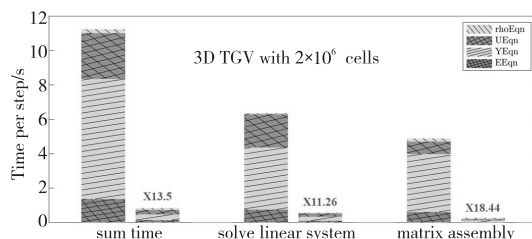


Figure 8 The performance of the PDE solving process in DeepFlame

图 8 DeepFlame 中 PDE 求解过程的加速效果。

## 5 结束语

本文介绍了本团队开发的耦合深度学习框架的反应流科学计算平台 DeepFlame 及其在 GPU 异构平台上的移植和高性能优化,并最终利用标准算例展示了 AI 和高性能优化带来的性能提升。总的来说,利用 AI for Science 算法本文方法在反应流数值模拟中的化学源项计算方面上获得了 2 个量级的加速效果,在异构平台上的移植优化获得了 1 个量级的加速效果。未来将对整个计算逻辑在 GPU 上进行进一步的移植优化,同时会进行并

行优化,推进 DeepFlame 向大规模异构平台移植。

### 参考文献:

- [1] Christo F C, Masri A R, Nebot E M. Artificial neural network implementation of chemistry with PDF simulation of  $H_2/CO_2$  flames[J]. *Combustion and Flame*, 1996, 106(4): 406-427.
- [2] Blasco J A, Fueyo N, Dopazo C, et al. Modelling the temporal evolution of a reduced combustion chemical system with an artificial neural network[J]. *Combustion and Flame*, 1998, 113(1-2): 38-52.
- [3] Sen B A, Menon S. Turbulent premixed flame modeling using artificial neural networks based chemical kinetics[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32(1): 1605-1611.
- [4] Wan K, Barnaud C, Vervisch L, et al. Chemistry reduction using machine learning trained from non-premixed micro-mixing modeling: Application to DNS of a syngas turbulent oxy-flame with side-wall effects[J]. *Combustion and Flame*, 2020, 220: 119-129.
- [5] Chen Z X, Iavarone S, Ghiasi G, et al. Application of machine learning for filtered density function closure in MILD combustion[J]. *Combustion and Flame*, 2021, 225: 160-179.
- [6] Zhang T H, Yi Y X, Xu Y F, et al. A multi-scale sampling method for accurate and robust deep neural network to predict combustion chemical kinetics [J]. *Combustion and Flame*, 2022, 245: 313-326.
- [7] Mao R Z, Lin M Q, Zhang Y, et al. DeepFlame: A deep learning empowered open-source platform for reacting flow simulations[J]. *Computer Physics Communications*, 2023, 291: 108842.
- [8] Evans J S, Schexnayder Jr C J. Influence of chemical kinetics and unmixedness on burning in supersonic hydrogen flames [J]. *AIAA Journal*, 1980, 18(2): 188-193.
- [9] Abdelsamie A, Lartigue G, Frouzakis C E, et al. The Taylor-Green vortex as a benchmark for high-fidelity combustion simulations using low-Mach solvers[J]. *Computers & Fluids*, 2021, 223: 104935.
- [10] Boivin P, Jiménez C, Sánchez A L, et al. An explicit reduced mechanism for  $H_2$ -air combustion[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(1): 517-523.
- [11] Tekgül B, Peltonen P, Kahila H, et al. DLBFoam: An open-source dynamic load balancing model for fast reacting flow simulations in OpenFOAM[J]. *Computer Physics Communications*, 2021, 267: 108073.
- [12] Naumov M, Arsaev M, Castonguay P, et al. AmgX: A library for GPU accelerated algebraic multigrid and preconditioned iterative methods [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2015, 37(5): S602-S626.
- [13] Chuang P Y, Barba L A. AmgXWrapper: An interface between PETSc and the NVIDIA AmgX library[J]. *The Jour-*

nal of Open Source Software, 2017, 2(16): 280.

- [14] Bielawski R, Barwey S, Prakash S, et al. Highly-scalable GPU-accelerated compressible reacting flow solver for modeling high-speed flows[J]. *Computers & Fluids*, 2023, 265: 105972.

### 作者简介:



**毛润泽**(1998-),男,陕西安康人,博士生,研究方向为反应流数值模拟、AI for science 和高性能计算。**E-mail:** maorz1998@stu.pku.edu.cn

**MAO Run-ze**, born in 1998, PhD candidate, his research interests include simulation of reacting flow, AI for science, high-performance computing.



**吴子恒**(1999-),男,浙江金华人,科研助理,研究方向为反应流数值模拟、AI for science 和高性能计算。**E-mail:** up-tonwu@163.com

**WU Zi-heng**, born in 1999, research assistant, his research interests include simulation of reacting flow, AI for science, high-performance computing.



**徐嘉阳**(1999-),女,黑龙江大庆人,研究员,研究方向为反应流数值模拟、AI for science 和高性能计算。**E-mail:** jx278@cantab.ac.uk

**XU Jia-yang**, born in 1999, research fellow, his research interests include simulation of reacting flow, AI for science, high-performance computing.



**章严**(1994-),男,湖南岳阳人,助理研究员,研究方向为高性能并行计算研究。**E-mail:** zhang\_yan2@iapcm.ac.cn

**ZHANG Yan**, born in 1994, associate research fellow, his research interests include high-performance parallel computing.



**陈帜**(1991-),男,湖南衡阳人,研究员,研究方向为反应流数值模拟、AI for science 和高性能计算。**E-mail:** chenzhi@pku.edu.cn

**CHEN Zhi**, born in 1991, research fellow, his research interests include simulation of reacting flow, AI for science, high-performance computing.

# 计算机工程与科学杂志社

## 《计算机工程与科学》稿件录用通知单

稿件编号: 2024HY0011

毛润泽; 吴子恒; 王迎瑞; 徐嘉阳; 章 严; 陈 帆 同志:

您好!

您的来稿《DeepFlame: 基于深度学习和高性能计算的反应流模拟开源平台》经审定已被本刊录用, 具体刊出时间以排刊时间为准。在论文正式刊出之前, 如果作者的通信地址或联系电话有变动, 请及时与本刊编辑部联系, 以便能准确地将样刊和稿费寄给您。

联系电话: (0731) 87002567

E-Mail: jsjgcykx@vip.163.com

本刊网址: joces.nudt.edu.cn

感谢您对本刊工作的支持! 欢迎您继续把有关最新研究成果和研究动态的论文投向本刊。

此致

敬礼

《计算机工程与科学》杂志社

总编辑

2024年4月23日