
华东师大首次实现燃料燃烧高精度计算机模拟

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11932.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

华东师大首次实现燃料燃烧高精度计算机模拟。

华东师范大学化学与分子工程学院朱通团队结合人工智能算法、量子化学理论以及分子动力学方法，实现了燃料燃烧的高精度计算机模拟，在原子尺度和亚飞秒时间分辨率下获得了甲烷燃烧的化学反应网络。该成果近日发表于《自然—通讯》。

航空发动机是国防、交通等领域的核心装备，反应了一个国家的科技和工业能力。只有掌握先进的航空发动机技术，才能使我国在航空航天领域与发达国家的竞争中获得优势地位。掌握燃料燃烧的本质和基础理论，发现和阐明航空发动机燃烧过程的基本规律和其中涉及的物理化学机制，是我国在发动机设计领域追赶直至超越发达国家的必要条件。

发动机工作在高温高压的严苛工况下，很难通过实验手段对其进行全景式的定量研究。而传统计算模拟方法无法正确高效地处理燃烧过程中剧烈化学反应带来的大量反应路径的量子化学计算。

基于人工神经网络的深度学习方法为构建具有量子化学精度、同时十分高效的模拟算法提供了可能。该论文共同通讯作者之一的朱通副研究员告诉《中国科学报》，这项研究专门为燃烧反应设计了数据库构建方案，采用神经网络模型在0.1飞秒的分辨率下对甲烷燃烧过程进行了长达1纳秒的反应分子动力学模拟。

据介绍，在该团队近期开发的ReacNetGenerator软件的帮助下，该工作不仅复现了多年来积累的甲烷燃烧骨架反应机理，还发现了数百个中间反应路径，揭示了甲烷燃烧的完整反应网络。

目前我们团队正将该方法应用于碳烟的生成机理、航空煤油的热解以及含能材料的起爆机理研究中。该论文共同通讯作者之一的张增辉教授表示，该方法的进一步发展还有望为有机合成路径的

逆分析提供新的思路。相关算法已集成至DP-GEN软件中供用户使用。

该工作得到了国家自然科学基金重大研究计划培育项目、科技部重点研发计划、国家级大学生创新创业训练计划和华东师范大学超算中心的支持。（来源：中国科学报黄辛）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-020-19497-z>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：朱通等 来源：《自然—通讯》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发