

DOI:10.13409/j.cnki.jdpme.20250216002

CoSim: 一个用于多过程、多相态及多尺度分析的 耦合模拟器*

徐文杰^{1,2}, 周 乾^{1,2}, 冯泽康^{1,2}, 张杨杨^{1,2},
王君豪^{1,2}, 陈雍之^{1,2}, 欧阳鹏浩^{1,2}

(1. 水圈科学与水利工程全国重点实验室, 北京 100084; 2. 清华大学水利水电工程系, 北京 100084)

摘要: 多过程、多相态、多尺度("3M")是自然界及工业、工程领域共同面临及亟待解决的问题。数值计算是现代科学研究和工程分析的重要范式。从"3M"的物理力学机制出发,以不同数值方法的优势为基础,发展耦合算法实现数值方法间的优势互补,形成以算法间的"耦合"为特色,并以GPU并行加速为支撑实现大规模、高性能计算分析,研发了新型的高性能数值计算平台—耦合模拟器(CoSim)。CoSim软件目前涵盖固体力学、流体力学及不同算法间的耦合,共16个求解器模块和1个CAE模块,突破了现有大部分软件集中于单一算法难以解决复杂"3M"问题模拟的瓶颈,有效地实现了岩土体及其它材料在"变形→渐进破坏→灾变"全过程中的连续-非连续、连续→破裂、流体-固体、细观-宏观的耦合分析,以更好地逼近复杂实际的物理力学过程,为解决复杂的"3M"问题提供了有效的新质生产力。

关键词: 耦合模拟器; 数值计算; 地质灾害; 耦合算法; 流-固耦合

中图分类号: TU443 **文献标识码:** A **文章编号:** 1672-2132(2025)02-0247-16

CoSim: A Coupling Simulator for Multi-process, Multi-phase, and Multi-scale Analysis

XU Wenjie^{1,2}, ZHOU Qian^{1,2}, FENG Zekang^{1,2}, ZHANG Yangyang^{1,2},
WANG Junhao^{1,2}, CHEN Yongzhi^{1,2}, OUYANG Penghao^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Hydrosience and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084;

2. Department of Hydraulic Engineering Tsinghua University, Beijing 100084)

Abstract: Multi-process, multi-phase, and multi-scale (or "3M") phenomena are critical challenges in nature systems and industrial and engineering fields. Numerical calculation serves as an essential paradigm in modern scientific research and engineering analysis. Starting from the physical-mechanical mechanisms of "3M" and leveraging the strengths of diverse numerical methods, this study developed coupled algorithms to achieve complementary advantages among these methods. A distinctive characteristic of "coupling" between algorithms was formed, supported by GPU parallel acceleration to enable large-scale, high-performance calculation analysis. This led to the development of a novel high-performance numerical calculation platform—Coupling Simulator (CoSim). Currently, the CoSim soft-

* 收稿日期:2025-02-16;修回日期:2025-02-20

基金项目:国家自然科学基金项目(52479102, 52079067)资助

作者简介:徐文杰(1978—),男,副教授,博导,博士。主要从事工程地质研究。E-mail: wenjiexu@tsinghua.edu.cn

ware includes solid mechanics, fluid mechanics, and couplings between different algorithms, with 16 solver modules and 1 CAE module in total. It overcame the limitations of most existing software that relied on single-algorithm approaches and struggled to simulate complex "3M" problems. Additionally, CoSim enabled coupled analyses—including continuous-discontinuous, continuum-to-fracture, fluid-solid, and micro-macro—for geotechnical and other materials throughout the entire process of "deformation→progressive failure→catastrophe". The software more accurately approximated complex real-world physical-mechanical behaviors, providing a powerful new-quality productivity for tackling intricate "3M" challenges.

Keywords: coupling simulator; numerical calculation; geological hazard; coupling algorithm; fluid-solid coupling

0 引言

岩土体的稳定及灾害动力学一直以来是岩土工程、工程地质等领域研究的热点。受成因类型及内外动力地质作用的影响,自然界中的岩土/地质体较一般材料更复杂,呈现显著的多过程(Multi-Process)、多相态(Multi-Phase)及多尺度^[1-2](Multi-Scale),即“3M”特性(图1)。实质上,“3M”不但是自然界,也是工业、国防、能源等领域普遍存在的现象和亟待解决的问题。

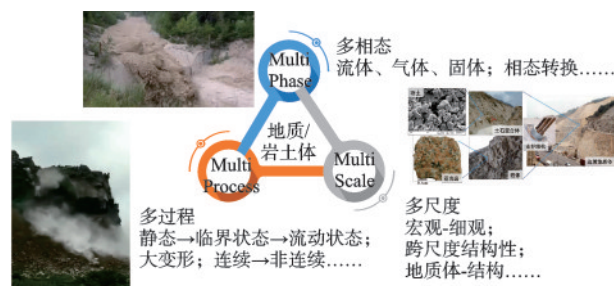


图1 岩土体/地质体的3M特性

Fig.1 “3M” characteristics of geotechnical / geological bodies

理论、试验和计算是现代科学研究和工程分析的三大范式^[3]。理论和试验为“3M”的研究和分析发挥了重要作用。然而,受现有理论方法和试验技术的限制,通常需要对“3M”问题进行不同程度的简化或假定。以地质灾害试验为例,目前大都集中在单一因素或单一过程的研究^[4-5],难以实现灾害链动力学全过程的试验。

随着数值算法的飞速发展,数值计算是岩土力学^[6-7]、工程稳定性^[8-9]及地质灾害^[10-15]等领域研究和分析的重要手段,同时在航空航天、国防、机械制造与工业工程、医药食品等各领域也取得了显著的成

效。正如美国数学家拉克斯所说“科学计算是关系到国家安全、经济发展和科技进步的关键性环节,是事关国家命脉的大事。”近年来,随着大数据、人工智能(Artificial Intelligence, AI)等的飞速发展,数据驱动及AI增强科学/工程(AI for Science/Engineering)已逐渐发展成为科学研究和工程分析的第四、第五范式。作为第三范式的数值计算,在第一、二范式和第三、四范式起着重要的桥梁作用,是后者的重要基础。

受现有数值方法的限制,常采用单一的数值方法、单一过程的分析,在计算中考虑某单个方面和因素,在复杂“3M”问题分析需要进行大量简化。近几年来,基于多种数值方法的耦合逐渐体现出其在解决复杂问题方面的优势,并取得了显著的成效。然而,现有耦合方法大部分基于不同的软件/程序间的耦合,而不同的软件/程序架构会对耦合功能及效率有显著的影响。

为进一步发展解决“3M”问题分析的数值方法,本文从其物理力学机制出发,以现有数值方法为基础,构建和发展不同方法间的耦合算法,并以GPU并行加速为支撑实现大规模、高性能计算,研发了新型的高性能数值计算软件-耦合模拟器(Coupling Simulator, CoSim)。本文将从软件架构、算法功能模块、典型应用及计算效率等方面进行阐述。

1 CoSim 基本框架

20世纪60年代以来,随着计算机软硬件的发展,不断涌现出一系列的数值方法(如FEM、DEM、MPM、SPH、LBM及FVM等),并成为求解科学和工程问题的重要工具。这些数值方法各有优势,然而难以“一统天下”解决“3M”问题。如,FEM在小

变形问题分析的计算精度和效率上都有很好的优势,而在大变形、尤其是破坏后计算则显得望尘莫及;相反地,DEM和MPM则在材料大变形及破裂计算方面有强大的优势,但在小变形方面则有其不足之处;FEM、DEM及MPM是固体计算中常用的数值方法,而SPH、LBM及FVM则是流体分析中常用的数值方法。

为从根本上解决“3M”问题分析,从地质体及材料的变形及灾变过程中的物理力学机制出发,以FEM、DEM、MPM、SPH、LBM及FVM等数值方法为基础,运用各自在固体和流体、连续和非连续、细观和宏观等方面的优势,构建和发展现有数值方法及不同方法间的耦合算法,以从根本上解决“3M”问题的分析(图2)。

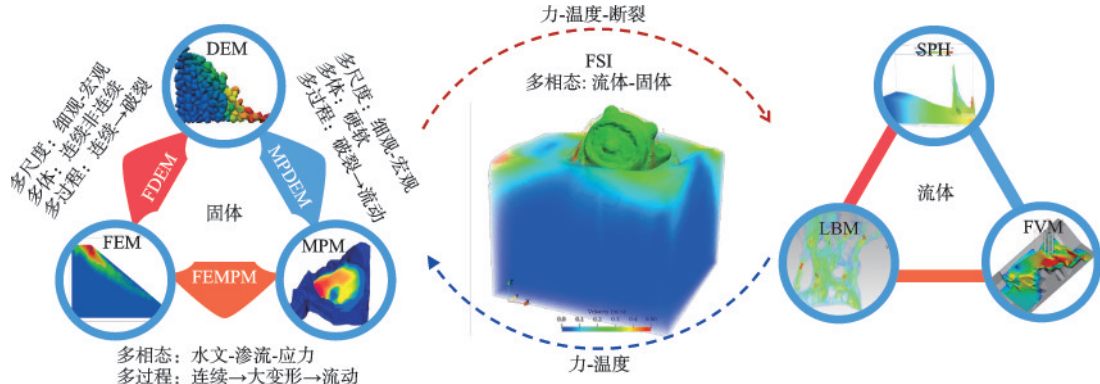


图2 CoSim中的耦合算法框架

Fig.2 Framework of coupled algorithms in CoSim

CoSim 主要包含前后处理(CAE, CoSim Analysis Environment)和求解器两个功能模块(图3),同时软件拥有良好的与外部第三方前、后处理器的接口,以实现复杂模型生成、用户自定义后处理等功能。

CoSim的求解器目前共包括16个算法功能模块(图3),算法基于GPU并行加速实现大规模、高效仿真;并通过Python进行封装,便于用户通过一些关键词(Keyword)编写计算脚本。

CAE模块是CoSim的用户交互式图形界面,具有强大的前、后处理功能,涵盖了各个分析步骤设置,如:导入和创建几何模型、网格划分和粒子生成、赋予材料属性、创建分析步、设定边界及荷载条件、提交分析及计算监控和结果后处理等。

2 固体分析模块

CoSim的固体分析主要包括FEM、DEM和MPM三种数值方法,分别用于材料及结构的连续小变形、材料的破裂及刚体和颗粒系统动力学、连续大变形及流动问题分析等领域。此外,SPH模块中也拥有多种用于固体计算分析的本构模型。

2.1 有限元(FEM)模块

建立在连续介质力学基础上的FEM其基本思想可追溯到20世纪40年代R. Courant^[16]的工作。目前FEM的理论已趋于成熟,成为应用最为广泛、成效最为显著的计算方法。根据FEM的求解方法,可以分为显式(Explicit)和隐式(Implicit)两种。为便于与其它模块的耦合,目前,CoSim采用显式求解为主,并基于显式中心差分法来进行时间积分,采用中心单点积分,不需要集成总体刚度矩阵,因此非常适合GPU并行计算,并大大节省存储空间和提升求解效率。CoSim-FEM拥有多种常用材料

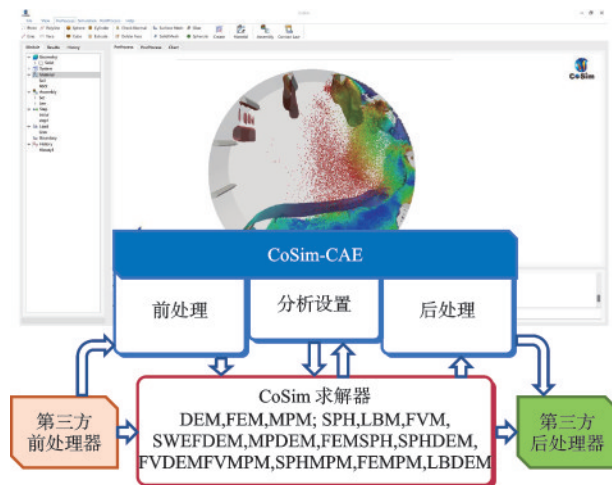


图3 CoSim的功能模块

Fig.3 Functional modules of CoSim

本构模型及描述岩土体变形特征的应变软化模型(图4)。

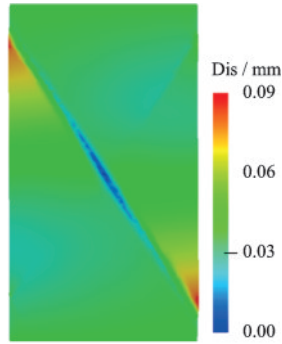


图4 基于 CoSim-FEM 的岩石单轴压缩

Fig.4 Uniaxial compression simulation of rock sample using CoSim-FEM

2.2 离散元 (DEM) 模块

DEM 最早由 P. A. Cundall^[17] 提出的一种非连续介质力学数值方法,它基于刚性假设将计算域离散为一系列的颗粒/块体,运用牛顿第二定律通过显式中心差分法得到各个颗粒/块体的位移及相互接触力等信息。在 DEM 每个计算时步,需要对所有颗粒进行接触检测、计算接触力和接触力矩,并更新颗粒位置和速度。接触检测是 DEM 中耗时相对较多的环节,包括粗检测和精细检测两步,计算得到相接触两个颗粒的接触点、接触法线方向、嵌入深度等,用于接触力和接触力矩求解。在采用 DEM 时,颗粒几何形态及接触本构模型至关重要。

CoSim-DEM 中常用的颗粒/单元形态包括球体 (Sphere)、凸多面体 (Poly) 及三角单元 (Mesh),其它任意几何体 (三角网、复杂多面体等) 均可通过上述单元构成的“簇”来表征 (图 5(a))。在 CoSim-DEM 中的几何体 (Geometry) 包括:①面 (Surface),通过一系列的三角形构成的三角单元系统 (System) 表征;②实体 (Solid),通过三角单元系统 (System) 或紧密接触的多面体/球构成的单元集 (或簇) 系统 (System) 表征 (图 5(b))。

为实现上述不同类型的几何单元/颗粒间的接触计算,CoSim-DEM 的几何接触包括球-球 (Sphere-Sphere)、球-多面体 (Sphere-Poly)、多面体-多面体 (Poly-Poly)^[18]、球-面 (Sphere-Mesh) 及多面体-面 (Poly-Mesh) 五种几何接触类型 (图 6)。为提升单元/颗粒间的接触检测效率,除了包含传统的栅格法接触搜索算法外,还引入层次包围体

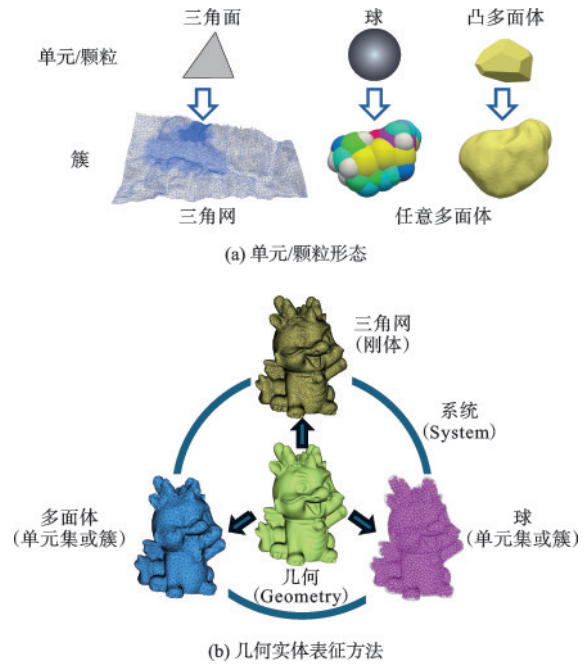


图5 CoSim-DEM 的单元类型及几何表征方法

Fig.5 Element types and geometric characterization methods in CoSim-DEM

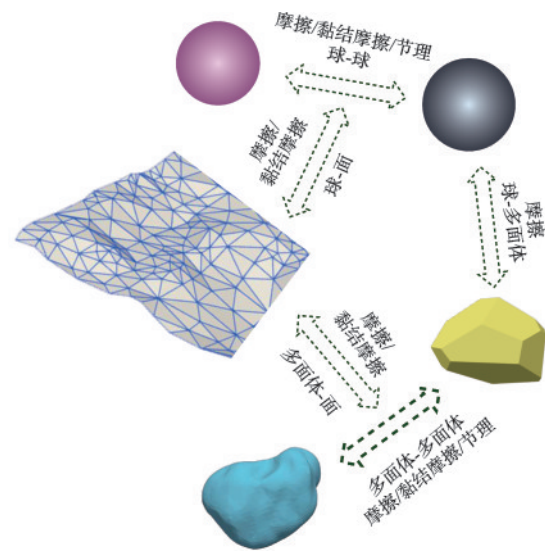


图6 CoSim-DEM 几何接触类型

Fig.6 Geometrical contact types of CoSim-DEM

(Bounding Volume Hierarchy, BVH) 法实现尺寸极端差异、饼状/棒状等颗粒的高效接触搜索。

目前,CoSim-DEM 的接触本构模型包括摩擦 (Frictional)、黏结-摩擦 (Cohesive Frictional)、节理 (JointMat) 三大类接触本构 (图 6)。同时,摩擦和黏结-摩擦接触本构中可通过设置摩擦弱化模型 (Fric-Rection) 实现部分材料摩擦系数的速度弱化效应。图 7 显示了 CoSim-DEM 中的球-球黏结摩擦接触本构模型,模型中考虑了球颗粒间接触的拉、剪、扭、

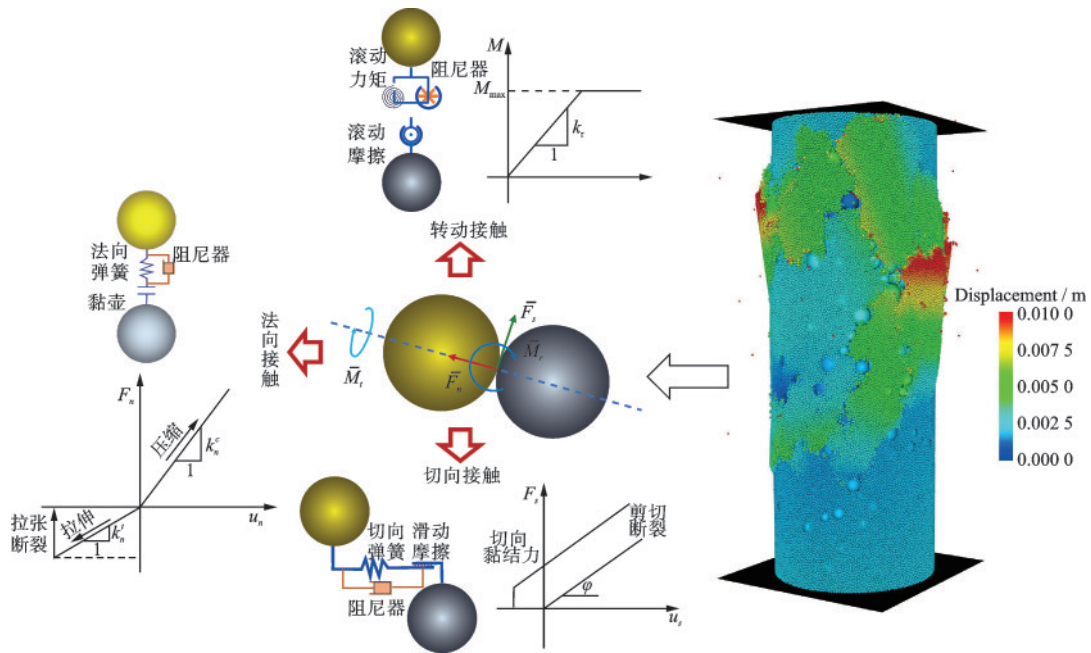


图7 球颗粒间黏结-摩擦接触本构模型

Fig.7 Cohesive-frictional contact constitutive model between spherical particles

弯四种强度特征,同时为模拟部分材料宏观的拉伸和压缩模量的差异性,颗粒间法向接触的拉伸和压缩刚度可以不同。法向抗拉强度(F_{max}^n)定义为法向黏聚力(C_n)的函数:

$$F_{max}^n = C_n A_i \quad (1)$$

根据摩尔-库伦准则,抗剪切强度(F_{max}^s)定义为切向黏聚力(C_s)和摩擦角(φ)的函数:

$$F_{max}^s = F_n \tan \varphi + C_s A_i \quad (2)$$

针对块体 DEM 接触,CoSim-DEM 中提出了一种考虑接触面渐进破坏的黏结-摩擦接触本构模型^[15](图 8)。计算域被离散为一系列面-面接触的块体系统,相邻块体的面-面接触强度包括法向粘结、切向粘结和摩擦。为实现接触面的渐进断裂,根据两块体接触面的角点、形心及临边中点构成的四边形,将接触面划分为 n 个子面(n 为接触面的角点数),每个子面的形心作为各子面的接触点,从而将接触面分解为以各个子面的面积为接触面积、以子面形心为接触点的“点接触”(图 8①)。当构成接触面的所有“子面”发生断裂时,该接触面发生断裂,块体间的接触计算转化体接触计算(图 8②)。

为了模拟块体运动中由于碰撞、摩擦等进一步破碎的现象,CoSim-DEM 提出了一种四面体转换为球颗粒的破裂模型,即,若块体与相邻块体的摩擦耗能达到某一阈值(FricEnergy),四面体将转换为 5 个紧密接触且处于粘结状态的内切球颗粒(图 9),

直到在外荷载作用下再次断裂。

CoSim-DEM 目前在边坡稳定、地质灾害(链)动力学、岩石/岩体力学、颗粒力学、岩体地下工程及矿山工程等领域有了较好的应用(图 10)。

2.3 物质点法(MPM)模块

物质点法(MPM)是 D. Sulsky 等^[19]在质点网格法(PIC)^[20]及流体隐式粒子法(FLIP)^[21]的基础上发展起来,近些年来不断发展与完善被应用于许多领域。该法将计算域离散为一系列物质点(MP),每个物质点代表一个子域,并携带固体物质的质量、速度、应力、应变等。MPM 中无需划分网格,充分利用了拉格朗日和欧拉的结合在处理材料大变形中具有显著优势,通过背景网格求解动量方程,并通过插值函数与对应 MP 建立联系:一方面,实现 MP 到背景网格结点的信息映射,MP 将质量、动量、外力及内力传递到结点上,结点以此进行积分并更新动量和合力,称为 P2G;另一方面,实现结点到质点的信息映射,将其更新信息返回到质点上,以此更新质点速度及其位置,称为 G2P。CoSim-MPM 中包含线性插值函数物质点法(Liner)、广义插值物质点法^[22](uGIMP)及基于 B 样条插值的完全拉格朗日物质点法(TLMPM)^[23]。

为了描述材料的应力应变关系,通过建立本构模型方程体现材料在外力作用下的变形特征。

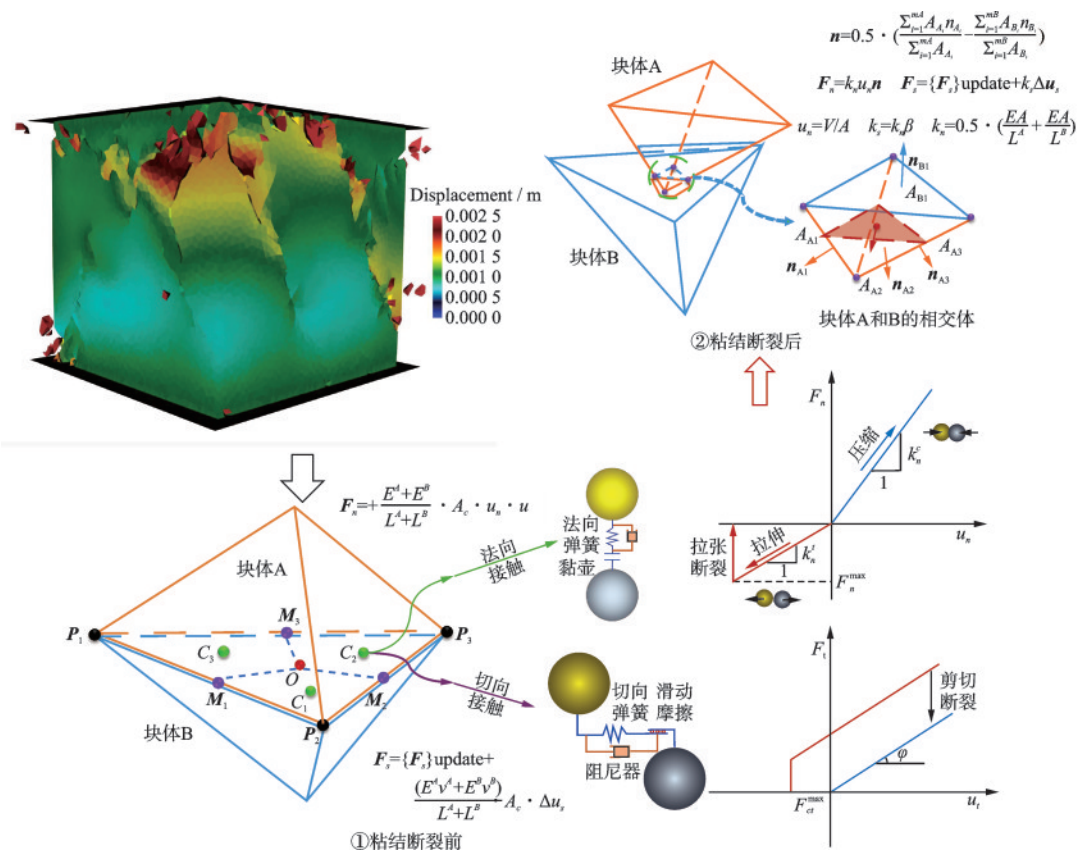


图8 块体间黏结-摩擦接触本构模型

Fig.8 Cohesive-frictional contact constitutive model between blocks

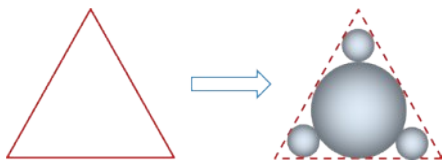


图9 CoSim-DEM中块体破裂示意

Fig.9 Schematic diagram of block breakage in CoSim-DEM

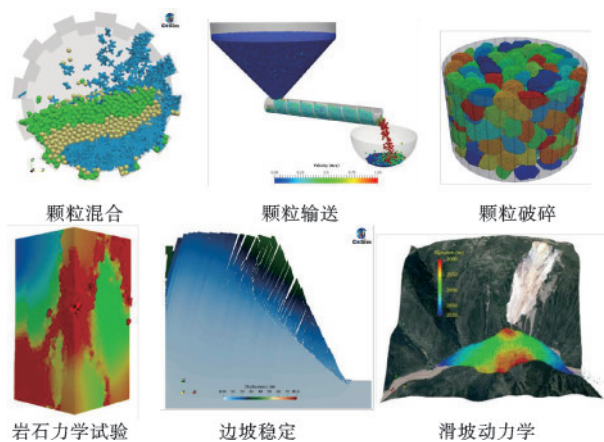


图10 CoSim-DEM 典型应用场景

Fig.10 Typical application scenarios of CoSim-DEM

CoSim-MPM^[24] 包含多种固体(如,弹性、弹塑性、Drucker-Prager等)和流体(如,NewtonFluid、

Non-NewtonFluid等)的本构模型。同时,基于D-P模型和 μ -I模型的各自的优缺点,提出了岩土体大变形的跨状态本构模型,即修正的DP- μ (I)模型,以计算滑坡、泥石流等灾害过程中岩土体“小变形→大变形→失稳破坏→高速流动→堆积”不同阶段的力学行为。该模型通过引入临界密度项,判断土体所处状态,从而实现状态转换。图11显示了材料状态转换过程示意图:①为准静态,材料处于DP弹塑性阶段;②为当前时步下达到临界密度值;③为修正应力及体积,两个阶段均表现为无应力状态,不同的是阶段③可能在下一时步下仍处于负压状态(即 $\sigma_m < 0$),质点不会进入阶段④,而是继续保持无应力状态,对应滑坡过程中岩土体转化为碎屑的过程;④为大变形后的中间态或流动态,认为材料经历应力释放后不具备抗拉强度,处于 μ (I)粘塑性模型。

图12显示了基于提出的修正DP- μ (I)模型进行的尾矿库三维失稳灾害过程分析,可较好地实现尾矿料从变形→流动→堆积的全过程分析。

2.4 固体耦合算法模块

针对FEM、DEM及MPM在处理连续体小变

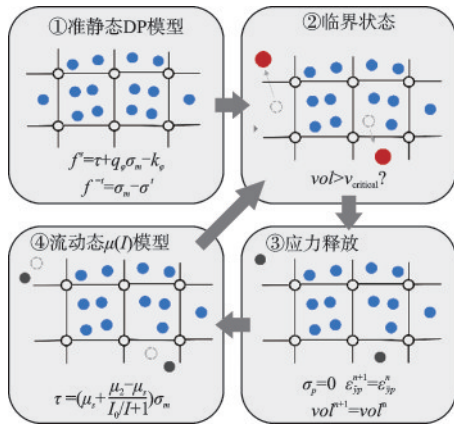


图 11 修正的 DP- $\mu(I)$ 模型中材料状态转换过程

Fig.11 Schematic diagram of material state transition process in modified DP- $\mu(I)$ model

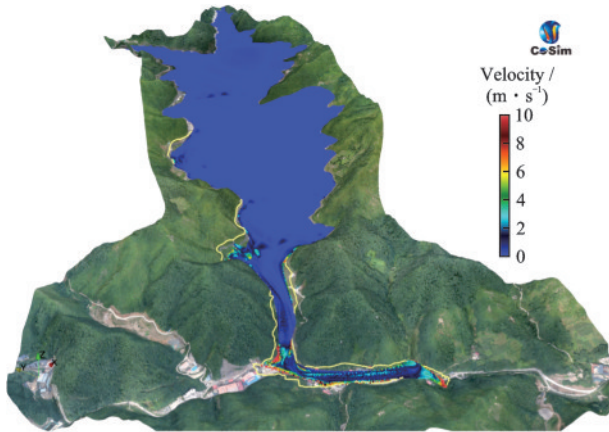


图 12 CoSim-MPM在某尾矿库失稳过程分析中的应用

Fig.12 Application of CoSim-MPM in instability analysis of a tailings dam

形、破裂、大变形及流动等方面各自的优势和不足，CoSim 中发展了 FEM-DEM、MPM-DEM 以及 FEM-MPM-DEM 耦合算法。

2.4.1 FEM-DEM 耦合模块—CoSim-FEDEM

CoSim-FEDEM 模块包含了多尺度力学、连续→非连续/破裂及连续体-非连续体三种耦合方法(图 13)。在多尺度力学算法中,有限元积分点上应力-应变关系采用 DEM 三轴数值试验获取,在一定程度上克服了 FEM 计算时在本构模型选取的不足,同时较好地表征材料在应力变形过程中细观结构的演化特征。连续→破裂分析方法,主要是基于 A.Munjiza 等^[25]提出的有限离散单元法(FDEM)算法,克服仅用 DEM 时块体/单元为刚体的不足。

CoSim-FDEM 中的连续体-非连续体耦合算法,主要用于解决可变形连续体与大变形或散体/可破裂不连续体的相互作用。算法中:在连续变形

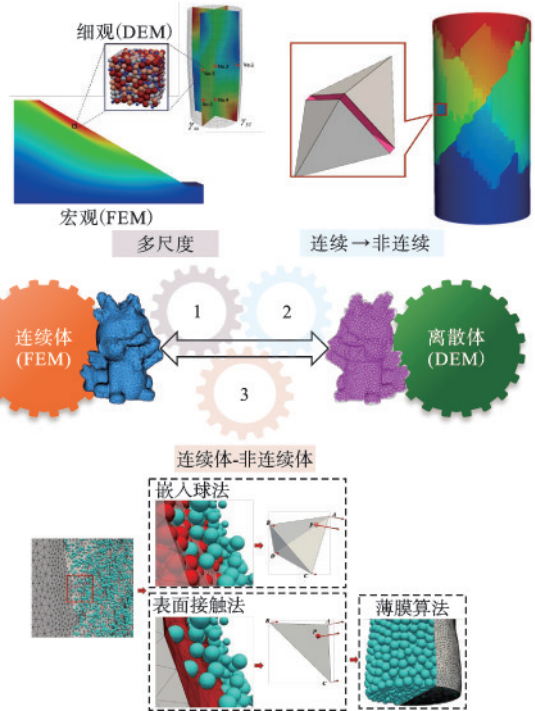


图 13 CoSim 的 FEM-DEM 耦合模块功能

Fig.13 FEM-DEM coupling module functions in CoSim

求解域采用 FEM、在大变形或不连续变形求解域采用 DEM,通过界面实现 FEM 与 DEM 域的耦合,主要包含两类界面算法(图 13)。

(1) 嵌入球法

分别采用 DEM 与 FEM 模拟材料的非连续区和小变形区,在连续域 FEM 的表面层单元中嵌入 DEM 球颗粒作为连续与非连续部分信息传递界面,在计算中嵌入球随连续体变形,并与非连续部分接触,嵌入球所受接触力将以外力的形式施加于有限元节点上,适用于 DEM 和 FEM 域为两个连续的区域分析工况。对于四面体内任一嵌入球,其受力将依据其球心 P 在单位内的位置分配给各节点:

$$F^A = F^P \frac{V_{PBDC}}{V_{ABDC}} \quad (3)$$

(2) 表面接触法

表面接触法主要用于连续域与非连续域具有不连续接触的情况,根据连续体域的 FEM 单元(实体单元或壳单元)表面形成随 FEM 的变形的三角网并与非连续的 DEM 接触,三角网单元所受的接触力将根据接触点 P 在三角形的位置作为外力分配到 FEM 各节点:

$$F^A = F^P \frac{A_{PBC}}{A_{ABC}} \quad (4)$$

图 14 显示了基于 CoSim-FDEM 的连续-非连

续算法开展的土体静力触探及三轴试验研究。在静力触探(图 14(a))中,近场(探头直径三倍内)采用 DEM 实现了土体大变形及锥尖周围土体的细观结构演化分析,远场采用 FEM 实现小变形及应力传递分析,采用“嵌入球法”实现 FEM 和 DEM 域耦合。在三轴试验中(图 14(b)),采用“表面接触法”将 FEM 膜单元模拟的橡皮膜与 DEM 模拟土体试样进行“非连续”耦合,实现“柔性”围压边界施加和加载过程中土体大变形及膜与土体的相互作用分析。

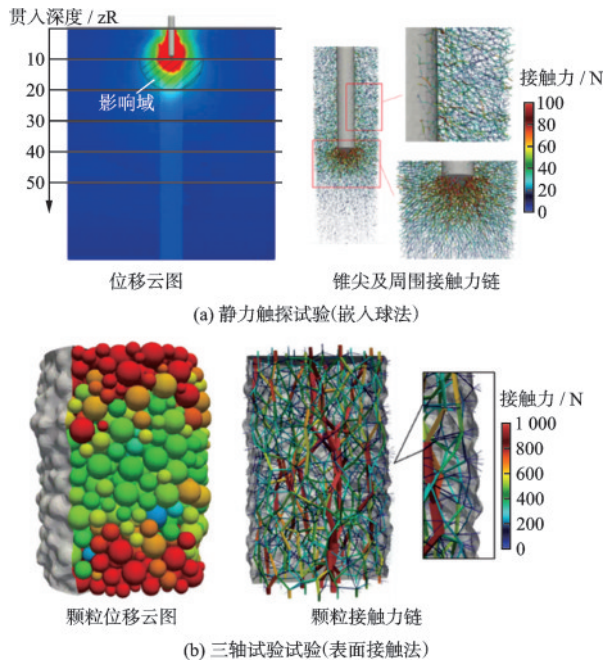


图 14 CoSim-FDEM 的连续-非连续典型案例

Fig.14 Typical continuum-discontinuum cases in CoSim-FDEM

2.4.2 MPM-DEM 耦合模块

MPM 在模拟连续体的大变形及流动问题时有天生的优势,而在模拟复杂的接触问题时存在一定的不足;相反地,DEM 在模拟接触方面有强大的优势。为了实现 MPM 计算中的复杂接触问题,CoSim 中的 MPM-DEM 耦合算法可以分为两大类。

(1) 物质点与刚性边界耦合

CoSim 提出了一种基于 MPM-DEM 耦合的质点-表面局部接触计算方法(图 15),该方法将被刚性边界的三角面单元切割的背景网格单元标记为局部边界网格单元,如果物质点运动至该单元区域内,则需将物质点转换为等体积的 DEM 球颗粒,采用 DEM 算法中的“球-三角面”接触算法进行物质点

与边界的接触力及接触强度计算。

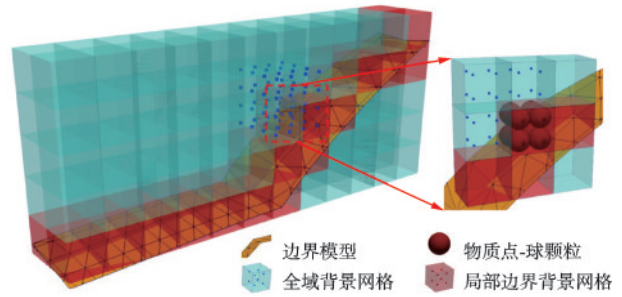


图 15 物质点与复杂边界相互作用示意

Fig.15 Schematic diagram of material point interaction with complex boundaries

图 16 显示了 CoSim-MPDEM 在弃渣场边坡稳定性及灾害动力学分析中的应用。弃渣体采用 MPM 表征,地形及临近的高速公路桥桩基础用三角网表征,该法可以精细化分析地形对弃渣土体运动的影响以及弃渣体失稳对桥桩的冲击荷载。

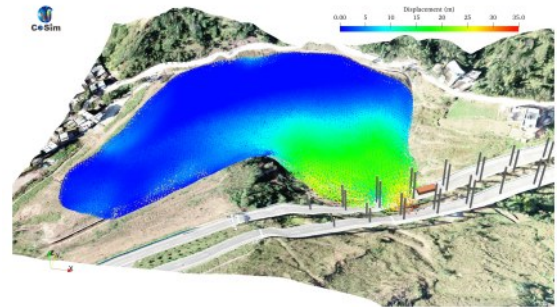


图 16 基于 CoSim-MPDEM 的弃渣场稳定及失稳灾害分析
Fig.16 Stability and instability hazard analysis of a waste dump using CoSim-MPDEM

(2) 物质点与块体耦合

用 MPM 描述连续体、DEM 描述散体,当检测到物质点位于与 DEM 块体相交的背景网格时,物质点将被激活为等体积 DEM 球颗粒,进而将 DEM 中“球-多面体”的接触算法引入(图 17)^[26],实现连续可变形体的物质点与 DEM 块体之间接触计算。

图 18 显示了采用 CoSim-MPDEM 开展的块石冲击结构和滑坡冲击房屋破坏的仿真分析。图 18(a)采用 DEM 模拟刚性的块石、MPM 模拟可以大变形的钢结构,实现了高速块石撞击作用下结构的大变形、冲击荷载等;图 18(b)采用 MPM 模拟滑坡、块体 DEM 及粘结-摩擦接触模型模拟房屋、地形面采用三角网精细化表征,有效实现了滑坡启动→运动→

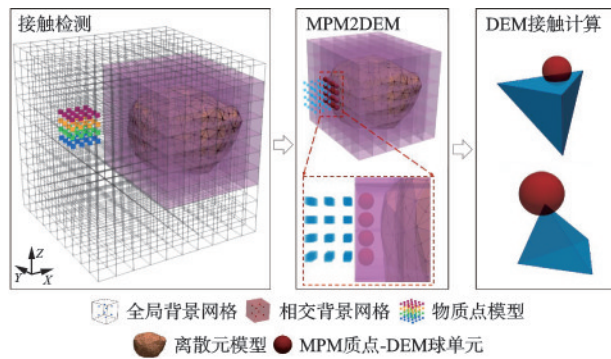
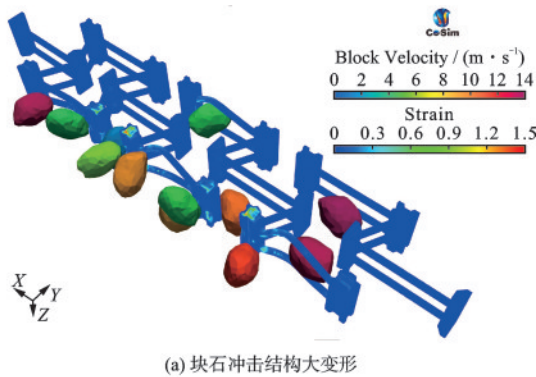
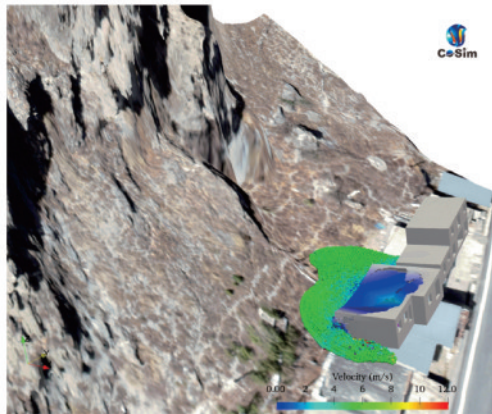


图 17 物质点与DEM块体接触算法

Fig.17 Contact algorithm of material points and DEM blocks



(a) 块石冲击结构大变形



(b) 滑坡冲击房屋破裂

图 18 CoSim-MPDEM在地质灾害冲击破坏方面的应用
Fig.18 Application of CoSim-MPDEM in impact failure analysis of geological hazards

冲击房屋破坏、堆积等灾害全过程的模拟。

2.4.3 FEM-MPM-DEM 耦合模块

为解决材料在外荷载作用下的大变形→破裂及灾变过程分析,发展了FEM-MPM-DEM耦合算法^[27](图 19),并集成到CoSim-FEMPM模块。算法中,FEM的单元大小需与物质点背景网格基本一致。在每步迭代中,检查单元的等效塑性应变,若其超过临界阈值,则该单元将不再参与FEM计算,

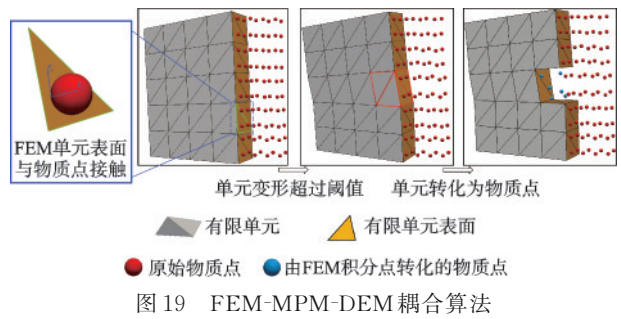
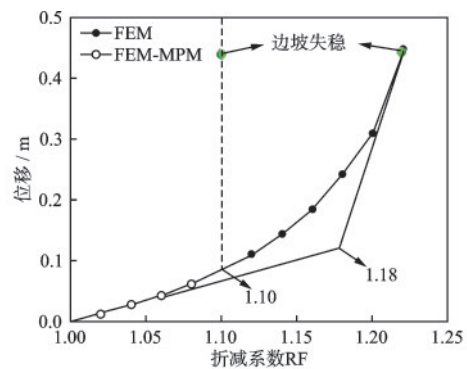


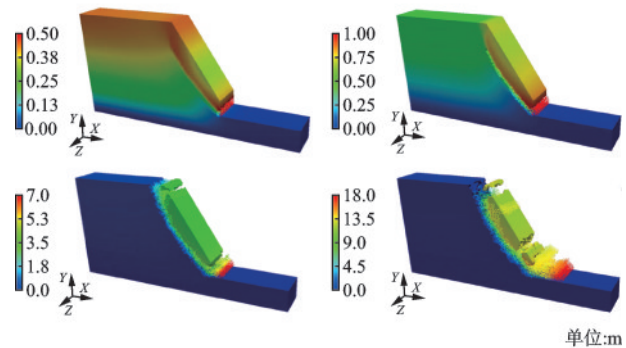
图 19 FEM-MPM-DEM 耦合算法
Fig.19 Coupling algorithm of FEM-MPM-DEM

并激活对应积分点处的物质点并继承相应的应力应变、速度等信息。为模拟材料破坏后的离散接触行为,采用DEM的球-面接触算法,将物质点视为球颗粒与FEM单元的表面进行接触计算得到接触力。

图 20 显示了采用CoSim-FEMPM及强度折减法得到边坡稳定性分析结果。从中可看出,当折减系数增长到1.1时,采用FEM-MPM耦合法得到的边坡位移急剧增加,对应于图 20(b)较好地揭示了边坡的破裂和解体机理、滑动面位置等信息;而采用FEM强度折减法是难以考虑非线性破裂过程,边坡变形随折减系数增加呈现连续增加趋势,在稳定系数的确定方面也较为不清晰。



(a) 坡顶位移随折减系数的变化



(b) 边坡破坏过程中位移云图

图 20 CoSim-FEMPM斜坡稳定性分析中的应用
Fig.20 Application of CoSim-FEMPM in slope stability analysis

3 流体分析模块

CoSim 的流体分析模块包括光滑粒子流体动力学 (SPH)、有限体积法 (FVM) 及格子布尔兹曼法 (LBM) 三种常用流体分析方法, 同时 MPM 中也拥有牛顿流、非牛顿流等本构模型适用于流体力学分析。此外, 还拥有浅水波方程求解器 (CoSim-SWE), 用于流域尺度上的洪水动力学分析。本节仅对 SPH、FVM 和 LBM 模块进行简单介绍。

3.1 光滑粒子流体动力学 (SPH) 模块

作为一种纯拉格朗日无网格粒子法, SPH 将分析域离散为一系列的粒子, 每个粒子具有其所在位置处的材料性质 (如, 质量、密度、速度等)。通过求解流体动力学控制方程, 得到与粒子相关的流体变量随时间的变化, 并通过核函数在相邻粒子进行插值。核函数是决定 SPH 的重要因素之一, 决定了 SPH 的内插精度和数值稳定性。

CoSim-SPH 模块在计算流程、计算方法均具有较高的自由度, 拥有多种核函数 (如, Wendland 函数、三次样条函数等)、边界类型 (如, 虚粒子法、半解析法等) 及材料本构模型 (如, 牛顿流体、非牛顿流体、HBP 及 Drucker-Prager 等), 用于流体动力学 (图 21) 及固体大变形等问题。为了提升对复杂问题的分析能力和效率, 拥有多 GPU 并行方法, 可在小型工作站上实现上亿级粒子的大规模仿真^[28]。

3.2 有限体积法 (FVM) 模块

CoSim-FVM 是基于有限体积法的流体力学分析模块 (图 22)。FVM 的基本控制方程为 Navier-Stokes 方程, 其核心是将连续的微分方程转化为一

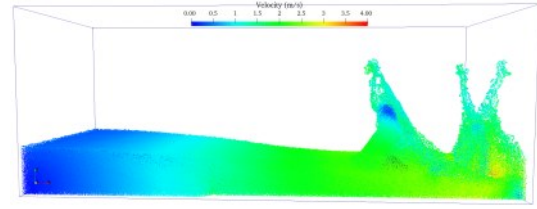


图 21 基于 CoSim-SPH 的溃坝撞击分析

Fig.21 Application of CoSim-SPH in dam failure impact analysis

组可以通过数值求解的离散方程。CoSim-FVM 采用流体体积分法 (VOF) 和接触角算法实现多相流体计算, 表面张力 (\vec{F}_s) 计算采用 CSF 模型求解:

$$\vec{F}_s = \sigma \kappa \nabla \alpha \quad (5)$$

式中, σ 为表面张力系数; κ 为表面曲率。

CoSim-FVM 可较好地实现不同尺度下的单一流、多相流体动力学分析 (图 23), 用于研究和分析流体动力学行为。

3.3 格子布尔兹曼法 (LBM) 模块

格子布尔兹曼法 (LBM) 最初由 F. Higuera 等^[29]于 1989 年提出, X. W. Shan 等^[30]在 1993 年引入了流体动力学相互作用, 使得其在流体力学领域得到了广泛应用。与基于宏观 Navier-Stokes 方程的流体力学方法不同, LBM 是一种介观尺度的数值方法, 其基本思想是将在空间和时间上连续变化的流场离散为格子。每个格点代表一个流体质点 (或流体微团), 并用密度分布函数描述其属性。因此, 可以将速度空间中的格点速度基于宏观统计的物理量进行离散, 分布函数 f 离散为 $\{f_1, f_2, \dots, f_N\}$, N 为格点速度的类型数 (CoSim-LBM 中采用 D3Q19 模型, 即 $N=19$)。基于每个格点的密度分布函数, 可积分得到宏观上流场的压力场、速度场、密度场。每个格点只需要自身以及周围的格点密度分布函

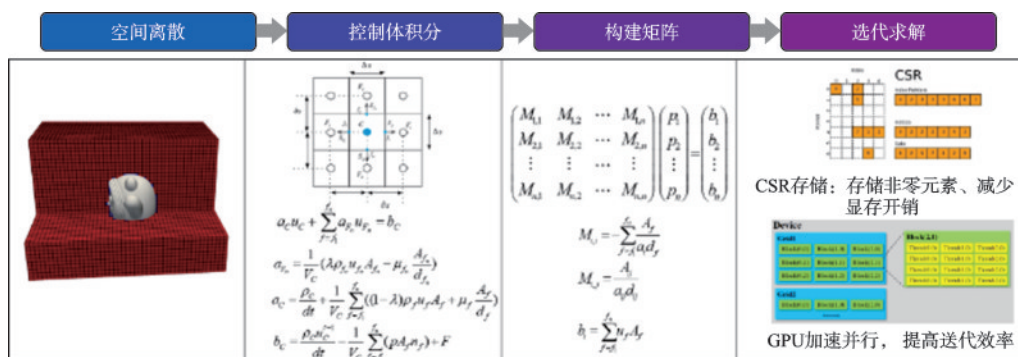


图 22 CoSim-FVM 算法流程图

Fig.22 Flowchart of CoSim-FVM algorithm

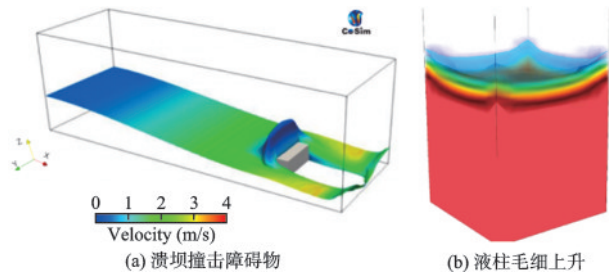


图 23 CoSim-FVM 典型应用场景

Fig.23 Typical application scenarios of CoSim-FVM

数即可进行计算,因此 LBM 能够方便地实现并行计算。

为实现气-液两相流模拟发展了 LBM-VOF 法(图 24),算法中液体和气体格点的体积分数分别为 1 和 0,在 LBM 迁移过程中,分布函数不能在气体和液体格子之间直接传递。格点的质量分数为 M ,由格点的密度和体积分数的乘积得到,气体格点的 M 为 0,液体格点的 M 与对应格点密度相同。气体格点和液体格点中间有一层界面格点,界面格点将完全隔离气体和液体格点,其 M 计算如下:

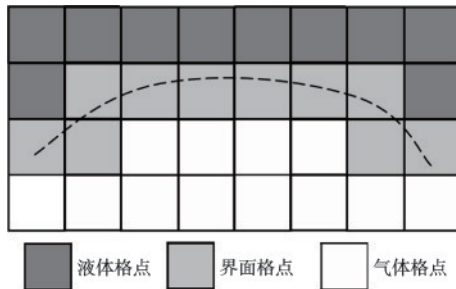


图 24 LBM-VOF 气-液界面示意

Fig.24 Schematic diagram of gas-liquid interface in LBM-VOF

$$M(r,t) = \rho(r,t) \cdot \varphi(x,t) \quad (14)$$

式中, φ 为流体体积分数。

图 25 显示了 CoSim-LBM 在溃坝分析中的应用,为验证在模拟气-液两相流方面的优势,在水柱

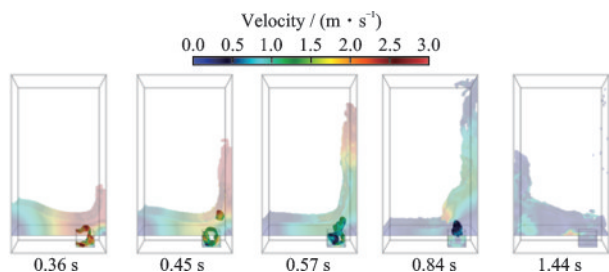


图 25 CoSim-LBM 的 VOF 模型在溃坝分析中的应用

Fig.25 Application of CoSim-LBM's VOF model in dam failure analysis

右侧设置一个凹槽。从不同时刻计算结果可看出,在重力作用下水柱开始向右坍塌,由于流速较快在右侧底部设置的凹槽中形成“气腔”;之后,“气腔”逐渐上浮、分裂和减小,并最终被回落的水流充满。

4 流-固耦合分析模块

CoSim 凭借在耦合方面的先天优势,目前已拥有数十种流-固耦合方法(图 26),以解决不同领域面临的问题。其中 SPH、MPM 均包含有流体和固体的本构模型,因此可自身实现流-固耦合分析。此外,FVM-FEM、FVM-SPH 耦合算法后续将陆续研发。在流体与固体的耦合过程中,流体的运动将对固体产生驱动力,而固体作为流体的边界对流体的运动起阻碍作用。因此,基于流体力学与固体力学的“流-固”耦合,实质上是流体的作用力进行积分,得到流体对固体的作用力;而固体的相关信息包含在与其作用的流体动力学方程中,计算固体对流体的作用。本节将以 SPH-DEM、FVM-DEM 及 FVM-MPM 三个流-固耦合模块的算法及功能为例进行介绍。

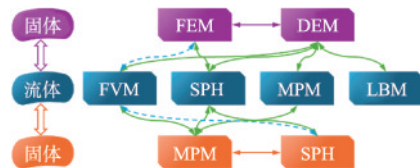


图 26 CoSim 软件的流-固耦合算法

Fig.26 Fluid-solid coupling algorithms in CoSim

4.1 SPH-DEM 耦合模块

在 SPH-DEM 耦合算法中(图 27):①将 DEM 颗粒表面离散化为 SPH 粒子,基于统一的对 SPH 核函数的求解,计算 SPH 粒子间的相互作用及后续迁移,在这个过程中,每一个 DEM 颗粒所离散的 SPH 粒子的位置固定(即不参与迁移),基于对每一组颗粒离散 SPH 粒子的总受力进行积分,得到每个 DEM 颗粒受到流体作用力和力矩,作为外力添加到 DEM 循环计算中;②DEM 计算得到颗粒的速度、角速度、位置信息,通过耦合模块将相应颗粒的 ID、位置、速度和角速度传递给 SPH。

CoSim-SPHDEM 模块是基于 SPH 和 DEM 两个模块分别进行流体力学和固体力学计算,并通过耦合算法模块实现两者间的信息传递,可实现球

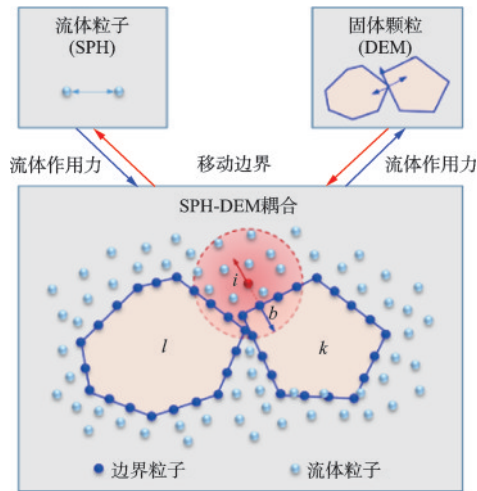


图 27 SPH-DEM 耦合算法框架

Fig.27 Framework of SPH-DEM coupling algorithm

体、多面体等 DEM 颗粒/单元与 SPH 的耦合仿真。

图 28 显示了基于 CoSim-SPHDEM 开展的库岸滑坡涌浪灾害链过程分析。采用 DEM 模拟滑坡的失稳、破裂过程,而采用 SPH 模拟库水的动力学过程,充分利用了 DEM 和 SPH 各自的优势,从而精细化实现了滑坡入水产生涌浪、及库水对滑坡运动的强流-固耦合作用,为滑坡涌浪灾害(链)评估分析提供了可靠的方法^[14]。

4.2 FVM-DEM 耦合模块

CoSim-FVDEM 模块充分利用 FVM 模块及 DEM 模块在流体力学和复杂颗粒/块体力学分析方

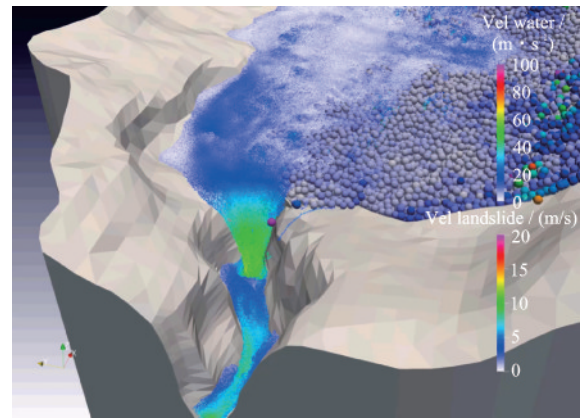


图 28 CoSim-SPHDEM 在滑坡涌浪灾害链分析中的应用
Fig.28 Application of CoSim-SPHDEM in landslide-induced surge disaster chain analysis

面各自的优势,而发展的 FVM-DEM 耦合分析模块,所有计算模块均在 GPU 上运行,解决了 CPU 和 GPU 之间的数据传输耗时问题,大大提高了程序的仿真计算效率(图 29)。算法支持解析法、未解析耦合法以及解析-未解析混合耦合法,突破了传统技术只能进行单一粒度或颗粒模拟的限制,可精准实现气、液、固三相之间复杂的力学及热传导分析。

CoSim-FVDEM 为各类流固耦合工程问题提供了细致、全面的解决方案。如,岩土颗粒材料的渗流及渗透破坏过程(图 30(a));化工领域三相流化床中颗粒的运动、传热与反应过程(图 30(b));多相流作用下颗粒介质的动力学特性(图 30(c));流体装备与流体动力学的的相互作用(图 30(d)),从

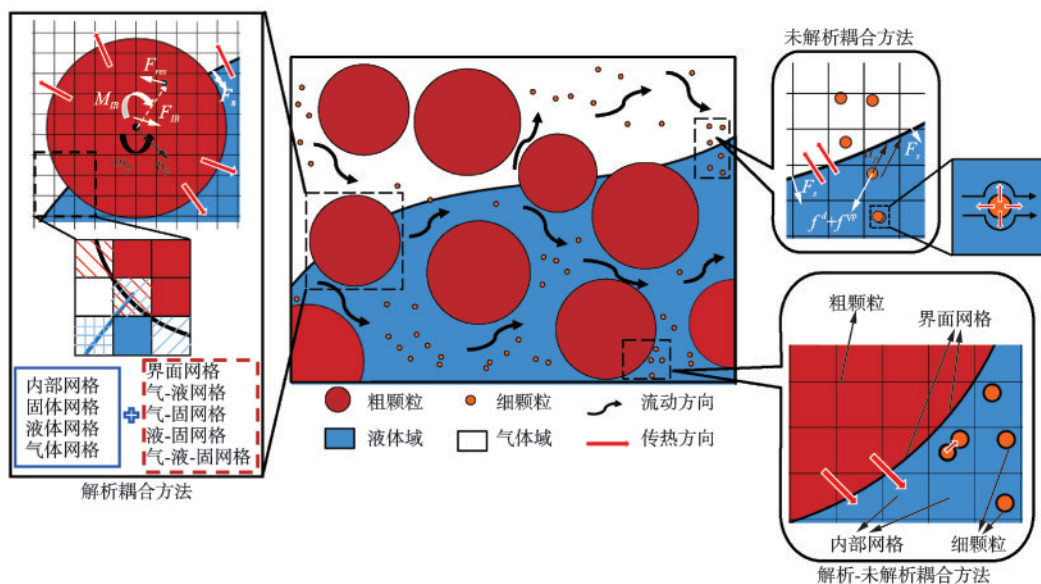


图 29 CoSim-FVDEM 算法示意图

Fig.29 Schematic diagram of CoSim-FVDEM algorithm

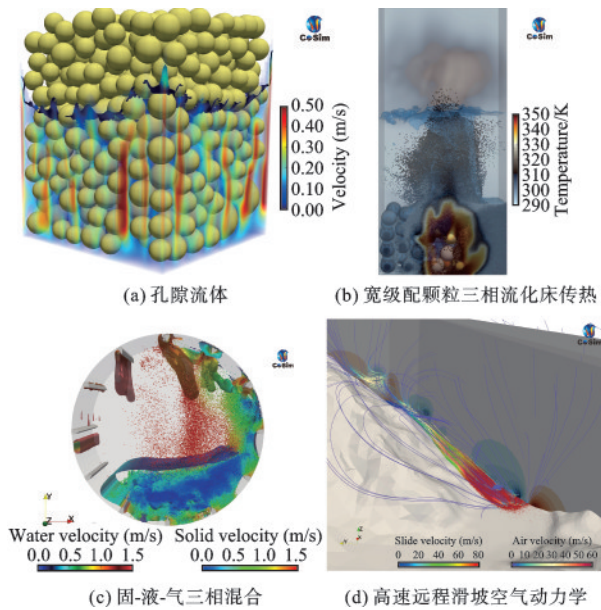


图 30 CoSim-FVDEM 典型案例应用

Fig.30 Typical applications of CoSim-FVDEM

而为优化设备设计与工艺参数提供指导等。

4.3 FVM-MPM 耦合模块

CoSim-FVMPM 模块是基于 FVM 在流体及 MPM 在材料大变形、破坏和颗粒流等问题上的优势而发展的 FVM-MPM 耦合算法,以实现多相体系中复杂流-固耦合问题分析。同时,基于 FVM 提出了自由流体和多孔介质内的流体流动的统一分析方法(图 31),在自由流体区域流体的控制方程为 Navier-Stokes(N-S)方程,在多孔介质区域流体的饱和-非饱和渗流控制方程采用 Darcy-Brinkman-Stokes(DBS)方程:

$$\frac{\partial(\rho_f \epsilon_f u_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \epsilon_f u_f u_f) = -\epsilon_f \nabla p + \epsilon_f \nabla \cdot \tau_f + \rho_f \epsilon_f g + F \quad (15)$$

式中, ϵ_f 是流体的体积分数,对应于多孔介质孔隙度; F 是固体对流体的作用力,包括渗透力和毛细力。

随着固体的变形,多孔介质的孔隙度、渗透系

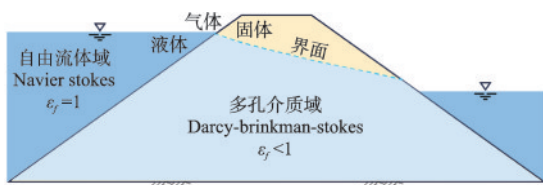


图 31 自由流体与多孔介质渗流耦合示意图

Fig.31 Schematic diagram of free fluid-porous medium seepage coupling

数等特性会相应改变,进而导致流体的流动特性也随之变化。在这一过程中,流体与固体之间通过孔隙度、渗透系数的实时更新以及耦合力的有效传递,实现了紧密的流固耦合相互作用。

CoSim-FVMPM 为解决流体与固体的多物理场分析提供了很好的支撑,如:岩土体的饱和-非饱和渗流、溃坝、渗流-侵蚀、固结、边坡稳定性分析与灾害动力学模拟等(图 32)。

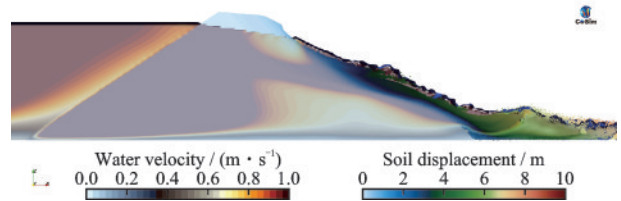


图 32 CoSim-FVMPM 典型应用场景(溃坝)

Fig.32 Typical application scenario of CoSim-FVMPM (dam failure)

5 计算效率分析

CoSim 是一个基于 GPU 加速并行的高性能计算软件,所有算法在统一架构下研发,各求解器模块由对应的计算引擎控制,并提供 Python 接口以便灵活调用,也为不同算法间高效耦合提供基础。

本节以 CoSim-DEM 为例,通过颗粒系统的滚筒混合模拟对软件计算效率进行分析。滚筒直径 2 m,厚度 1 m,球颗粒为 2 万个,滚筒转速为 1 弧度/秒。在本节中使用不同尺寸三角网格构建的两个滚筒模型(图 33),以验证算法在处理尺寸极端差异颗粒/网格方面的效率况,并对传统的网格搜索法、改进网格搜索法以及 BVH 法^[31]进行对比。在改进的网格搜索法中,接触搜索的网格为动网格并与滚筒同步转动。同时分析 GPU 硬件对计算效率的影响。表 1 显示了采用的计算参数。

图 34、图 35 分别显示了计算得到的滚筒内颗粒的速度分布,及不同算法下的计算耗时。从计算结果来看,滚筒网格模型对颗粒速度分布基本没有影响,而对计算耗时分布影响较大。从图 35 可以看出,球颗粒与三角形单元的细接触检测有较高的耗时,当粗接触检测所得邻居列表中存在较多没有实际接触的三角形单元时,在后续细接触检测阶段将有更高的计算开销用于排除这些额外的接触。因此,在粗接触检测阶段尽可能多地筛除无实际接

触的邻居以形成质量更好的邻居列表将有效地提高计算效率。对比两种包围盒检测方式,球-包围盒法比球-面法所得的邻居列表质量更优(图35)。对比两种网格搜索法,改进的网格搜索法相比传统网格法在网格尺寸不均的模型中如预期表现出更高的计算效率,这是由于在改进的算法中通过三角形

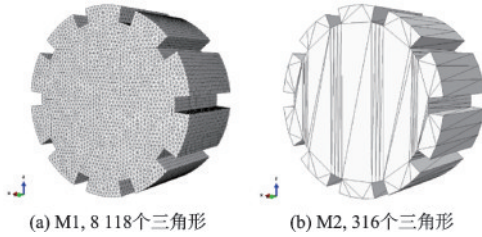


图33 滚筒模型

Fig.33 Rotary drum models

表1 滚筒试验计算参数

Table 1 Calculation parameters for drum test

计算参数	球体颗粒	滚筒
密度/($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	2 800	—
弹性模量/MPa	50	100
泊松比	0.3	0.3
静摩擦角/($^\circ$)	5.0	0.0
动摩擦角/($^\circ$)	5.0	0.0

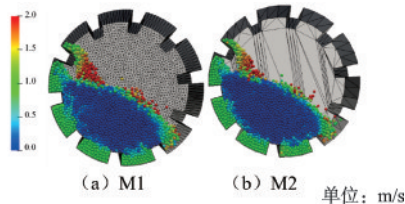


图34 稳定后的滚筒内球颗粒速度分布

Fig.34 Steady-state velocity distribution of spherical particles in rotary drum

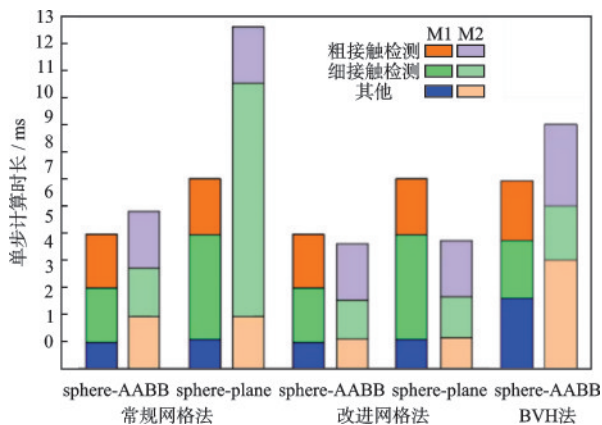


图35 采用不同粗接触检测方法 & BVH算法的单步耗时
Fig.35 Single-step calculation time using different coarse contact detection methods and BVH algorithm

离散,搜索网格的网格尺寸远小于传统网格法,从而球颗粒在遍历相邻搜索网格内时与更少数量的三角形进行了检测。而在传统的网格法中,由于网格尺寸不小于最大的三角形的尺寸,因此在M2算例中搜索网格的数量仅为 $8(2\times 2\times 2)$,每个球颗粒将与所有三角形进行粗接触检测,所得球颗粒的邻居列表质量也较差。

对于网格尺寸均匀的M1模型,由于传统的网格法与改进方法的搜索网格尺寸是一致的,所以有几乎一样的计算效率。

对于BVH方法,不同模型在细接触检测阶段的耗时与改进的网格搜索方法近似,表明两者都能获得高质量的邻居列表,但BVH法在构建层次搜索结构上花费了更多的时间。因此,改进的网格搜索法在这三种方法中有最优的计算效率。此外,不同GPU设备计算效率有较大的差异,例如Tesla V100的计算效率约为Tesla K40的5倍,但不同设备在各阶段的耗时基本一致。

6 小结

数值计算已成为当前及未来科学研究和工程分析的重要范式。近30年来,也诞生了一批大型的工业软件,为解决科学和工程问题发挥了重要作用。然而纵观现有工业软件,大都集中在单一的数值方法,在解决多过程、多相态及多尺度(“3M”)等复杂问题方面,有时鞭长莫及。从“3M”的物理力学机制出发,充分利用不同数值方法的优势,构建领先算法,对解决自然界及工业界面临的相关难题具有重要的意义。

CoSim根植于地质体及材料的变形破裂和致灾的物理力学机理,充分利用不同数值计算方法的优势,发展不同计算方法间的耦合算法实现数值方法间的优势互补,形成以“力-位移/应变-热”协调为核心,以算法间的“耦合”为特色,突破了现有大部分计算软件集中于单一算法难以解决复杂“3M”问题模拟的瓶颈,实现了岩土体及其他材料的连续-非连续、连续→破裂、流体-固体、细观-宏观的耦合分析,以更好地逼近其实际的物理力学过程。同时,软件以GPU加速并行技术为支撑,在统一的计算框架下突破学科和算法壁垒,有效实现了算法的大规模、高效耦合分析。

CoSim软件目前涵盖固体力学、流体力学的6

种数值计算方法以及不同算法间的耦合,共16个求解器模块和1个CAE模块;同时,软件通过Python进行封装,从而使得用户方便通过一些关键词实现计算分析脚本的编写,实现复杂功能。软件应用涵盖领域涉及岩土工程、地质灾害、土木工程、矿山工程、水文水质、山洪灾害、地球科学、石油工程、工业工程、机械工程、化工及国防军事等,为解决复杂“3M”问题分析提供了有效的新质生产力。

参考文献:

- [1] 徐文杰,许强. 岩土材料细观结构量化表述方法研究-以土石混合体为例[J]. 岩石力学与工程学报, 2012, 31(3): 499-506.
Xu W J, Xu Q. Study of quantitative description methods of geomaterial meso-structure- taking soil rock mixture for example[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2012, 31(3): 499-506. (in Chinese)
- [2] 伍法权,王思敬,潘别桐. 统计岩体力学(SMRM)-岩体工程地质力学的传承与发展[J]. 工程地质学报, 2022, 30(1):1-20.
Wu F Q, Wang S J, Pan B T. Statistical mechanics of rock masses (SMRM) -Inheriting and developing of engineering geomechanics of rock masses [J]. Journal of Engineering Geology, 2022, 30(1):1-20. (in Chinese)
- [3] 姜海波,赵云鹏,程忠庆. 解析法及其在复杂问题研究中的地位和作用-以风力机气动设计为例[J]. 系统科学学报, 2014, 22(1): 56-59.
Jiang H B, Zhao Y P, Cheng Z Q. Analytical method and its status and function in complex problem research [J]. Journal of Systems Science, 2014, 22(1): 56-59. (in Chinese)
- [4] Turnbull B, Elisabeth T Bowman, McElwaine Jim N. Debris flows: Experiments and modelling [J]. Comptes Rendus Physique, 2015, 16(1):86-96.
- [5] Miao F S, Wu Y P, ÁkosTörök, et al. Centrifugal model test on a riverine landslide in the Three Gorges Reservoir induced by rainfall and water level fluctuation [J]. Geoscience Frontiers, 2022, 13(3):101378.
- [6] Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies [J]. Geotechnique, 1979, 29(1): 47-65.
- [7] Xu W J, Wang S, Zhang H Y, et al. Discrete element modelling of a soil-rock mixture used in an embankment dam [J]. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2016, 86: 141-156.
- [8] Griffiths D V, Lane P A. Slope stability analysis by finite elements[J]. Geotechnique, 1999, 49(3):387-403.
- [9] 徐文杰,王立朝,胡瑞林. 库水位升降作用下大型土石混合体边坡流-固耦合特性及其稳定性研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2009, 28(7): 1491-1498.
Xu W J, Wang L C, Hu R L. Fluid-solid coupling characteristics and stability analysis of soil-rock mixture slope in rising and drawdown of reservoir water levels [J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2009, 28(7): 1491-1498. (in Chinese)
- [10] Serrano P A, Murillo J, Garc'a N P. A finite volume method for the simulation of the waves generated by landslides [J]. Journal of Hydrology, 2009, 373(3-4): 273-289.
- [11] Uchida T, Nishiguchi Y, Nakatani K, et al. New numerical simulation procedure for large-scale debris flows (Kanako-LS) [J]. International Journal of Erosion Control Engineering, 2013, 6(2):58-67.
- [12] Boon C W, Houlsby G T, Utili S. New insights into the 1963 Vajont slide using 2D and 3D distinct-element method analysis [J]. Geotechnique, 2014, 64(10):800-816.
- [13] He S, Liu W, Ouyang C, et al. A two-phase model for numerical simulation of debris flows [J]. Natural Hazards and Earth System Sciences, 2014, 2: 2151-2183.
- [14] Xu W J, Zhou Q, Dong X Y. SPH-DEM coupling method based on GPU and its application to the landslide tsunamis. Part II: Reproduction of the Vajont Landslide Tsunami [J]. Acta Geotechnica, 2022, 17:2101-2119.
- [15] Xu W J, Xu Q, Liu G Y, et al. A novel parameter inversion method for an improved DEM simulation of a river damming process by a large-scale landslide [J]. Engineering Geology, 2021, 293:106282.
- [16] Courant R. Variational method for solutions of problems of equilibrium and vibrations [J]. Bulletin of the American Mathematical, 1943, 49:1-23.
- [17] Cundall P A. A computer model for simulating progressive large scale movements in blocky rock systems. // Proceedings of the Symposium of the International Society for Rock Mechanics, Society for Rock Mechanics (ISRM). France:[s.n.],1971, II-8.
- [18] Liu G Y, Xu W J, Qian Z. Contact overlap calculation algorithms and benchmarks based on blocky discrete element method [J]. International Journal of Geomechanics, ASCE, 2022, 22(12): 04022227
- [19] Sulsky D, Chen Z, Schreyer H L. Particle method for history-dependent materials [J]. Computer Methods in

- Applied Mechanics and Engineering, 1994, 118(1-2): 179-196.
- [20] Harlow F. The particle-in-cell computing method for fluid dynamics[J]. Methods for Computational Physics, 1964, 3: 319-343.
- [21] Brackbill J, Ruppel H. FLIP: A method for adaptively zoned, particle-in-cell calculations of fluid flows in two dimensions [J]. Journal of Computational Physics, 1986, 65(2):314-343.
- [22] Bardenhagen S G, Kober E M. The generalized interpolation material point method[J]. Computer Modeling in Engineering and Sciences, 2004, 5: 477-496.
- [23] Alban de Vaucorbeil, Vinh Phu Nguyen, Hutchinson-Christopher R. A total-lagrangian material point method for solid mechanics problems involving large deformations [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 360: 112783.
- [24] Feng Z K, Xu W J. GPU Material Point Method (MPM) and its application on slope stability analysis [J]. Bulletin of Engineering Geology and the Environment, 2021, 80: 37-5449.
- [25] Munjiza A, Owen D R J, Bicanic N. A combined finite-discrete element method in transient dynamics of fracturing solids [J]. Engineering Computations, 1995, 12(2):145-174.
- [26] Feng Z K, Xu W J, Kaleem Ullah Jan Khan. A GPU based Hybrid Material Point and discrete Element Method (MPDEM) algorithm and validation [J]. Computers and Geotechnics, 2023, 159: 105462.
- [27] Zhou Q, Xu W J, Feng Z K. A coupled FEM-MPM GPU-based algorithm and applications in geomechanics in geomechanics [J]. Computers and Geotechnics, 2022, 151: 104982.
- [28] Zhou Q, Xu W J, Dong X Y. SPH-DEM coupling method based on GPU and its application to the landslide tsunamis. Part I: reproduction of the vajont landslide tsunamis [J]. Acta Geotechnica, 2022, 17: 2101-2119.
- [29] Higuera F, Succi S, Benzi R. Lattice gas dynamics with enhanced collisions [J]. European Physics Letter, 1989, 9: 339-352.
- [30] Shan X W, Chen H D. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components [J]. Physical Review E, 1992, 47: 1815.
- [31] Lubbe R, Xu W J, Wilke D N, et al. Analysis of parallel spatial partitioning algorithms for GPU based DEM [J]. Computers and Geotechnics, 2020, 125: 103708.

(本文编辑:池营营)