

应用符号距离场的不规则颗粒离散元数值方法^{*}

杨校宇 溫童歌 曾祥远[†]

(北京理工大学 自动化学院,北京 100081)

摘要 提出了一种利用符号距离场(Signed Distance Field, SDF)检测颗粒间接触的不规则颗粒离散元仿真方法,用于分析不规则颗粒系统的动力学行为. 不规则颗粒的接触检测是关键难点,论文粗检测阶段通过均匀网格法检索邻居颗粒;精细接触检测则应用 SDF 隐式函数描述颗粒的不规则外形,对颗粒表面生成的体素网格符号距离进行线性插值,高效提取颗粒间接触特征信息. 利用颗粒塌落数值仿真与地面实验等工况的对比分析,验证了所提方法的有效性.

关键词 不规则颗粒, 离散元法, 符号距离场, 接触检测

中图分类号 TP391.9

文献标志码:A

Irregular Particle Discrete Element Method with Signed Distance Field Approach^{*}

Yang Xiaoyu Wen Tongge Zeng Xiangyuan[†]

(School of Automation, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract An irregular discrete element simulation method using signed distance field (SDF) to detect the contact between particles is proposed to analyze the dynamic behavior of irregular particle systems. The contact detection of irregular particles is the key difficulty. In the coarse detection stage, the neighbor particles were retrieved by the spatial sorting method. In fine contact detection, the SDF implicit function is used to describe the irregular shape of the particles, and the signed distance of the voxel grid generated on the surface of the particles is linearly interpolated to extract the contact characteristics of the particles efficiently. The effectiveness of the proposed method is verified by the comparison between numerical simulation and experiment of particle collapse.

Key words irregular particles, discrete element method, signed distance field, contact detection

引言

离散颗粒组成的系统在自然界、工业生产和日常生活中普遍存在^[1],对颗粒系统的物理机理认识一直吸引着学界不断思考与探索. 近年来数值模拟

手段在颗粒系统研究中不断进步,突破了实验研究在经济、实验条件及测量技术方面的制约. 其中,由 Cundall 和 Strack 于 1979 年提出的离散元法(Discrete Element Method, DEM)^[2]已被广泛采用.

传统离散元方法中颗粒采用的是球形模型,忽

2024-04-02 收到第 1 稿,2024-04-22 收到修改稿.

* 国家自然科学基金优秀青年基金(12222202), National Science Fund for Excellent Young Scholars of China(12222202).

† 通信作者 E-mail:zeng@bit.edu.cn

略了颗粒外形对系统介观结构和宏观行为的影响,无法捕捉颗粒不规则外形引起的某些特殊现象,例如颗粒姿态调整、颗粒之间的互锁、咬合等,也就无法揭示不规则颗粒微观动力学行为中的动力学机制与物理意义。实际上,不规则颗粒的接触情况要比球形接触复杂得多,如何准确进行不规则颗粒间接触检测,从而提供接触几何特征信息,成为开发不规则颗粒离散元方法的主要挑战。

针对不规则颗粒离散元颗粒系统计算难题,研究者们已开发了几种不规则颗粒的外形表述方法与相应的接触检测算法。例如, Favier 等提出的球簇法^[3], Ouadfel 等提出的连续函数表示法^[4]等。球簇法(Multi-Sphere Model, MSM)利用一定数量、具有不同重叠量的球形颗粒组合成一个非球形刚体单元。此类单元要达到要求的表面细度水平所需的球体数目可能十分庞大,并可能导致质量分布不均匀、内层弯矩解算的误差、计算效率低下等问题。连续函数表示法(Continuous Function Representation, CFR)可以用于光滑不规则颗粒的建模,如椭圆颗粒和椭球颗粒等,物体表面采用形如 $f(x, y)$ 或者 $f(x, y, z)$ 的函数进行隐式表示。不过,连续函数表示法目前仅限于对称颗粒建模,对于任意不规则形状的颗粒难以有效刻画,对颗粒表面函数进行解析或迭代求解时计算成本巨大,同时在确定接触法向上存在一定的误差。

围绕上述难题,本文开发了一种基于符号距离场(Signed Distance Field, SDF)的不规则颗粒离散元数值仿真方法,该方法在传统 DEM 的框架基础上结合离散函数表示法^[5]扩展而来。符号距离场在计算机图形学、计算机视觉和实时渲染等领域有广泛的应用。本文将符号距离场引入离散元方法架构,解除了颗粒基元的外形约束,打破了传统离散元法仅能处理球形颗粒的局限性。该方法的优势在于可以描述任意不规则颗粒外形,同时在颗粒接触检测方面能够有效提取不规则颗粒间的接触特征信息,如接触点、法线方向、侵入深度等。

论文第1节详细介绍基于SDF的不规则颗粒离散元法基本原理以及求解流程,第2节通过数值仿真算例和地面实验阐明方法的有效性,涵盖颗粒碰撞、颗粒群塌落滞留工况。针对颗粒群塌落滞留情况,论文详细探讨了颗粒形状对休止角的影响规律,数值模拟结果与实验测量结果具有良好一致性,验证了本文方法的有效性。

1 应用 SDF 的不规则颗粒离散元法基本原理

颗粒间接触检测是不规则颗粒离散元方法的研究难点。本节首先介绍利用 SDF 开展颗粒间快速接触检测的算法原理,包括不规则颗粒几何形状建模、系统参考坐标系及相互转换关系、接触检测方法。其次在此基础上,建立颗粒系统接触力学模型和颗粒运动的动力学方程,最后给出应用 SDF 的不规则颗粒离散元法的总体流程。

1.1 颗粒建模

采用多面体模型及符号距离场模型对颗粒进行建模,如图 1 所示。多面体模型^[6]用三角形网格描述颗粒几何形状特征,颗粒的三角形网格顶点位置由从颗粒质心出发指向各顶点的一系列向量定义;颗粒的三角形网格面由各个顶点的连接关系定义;每个颗粒在空间中的位置由从某一个固定参考系(如惯性坐标系)的原点到该颗粒质心的向量定义,由此可以实现颗粒形态的显式描述。

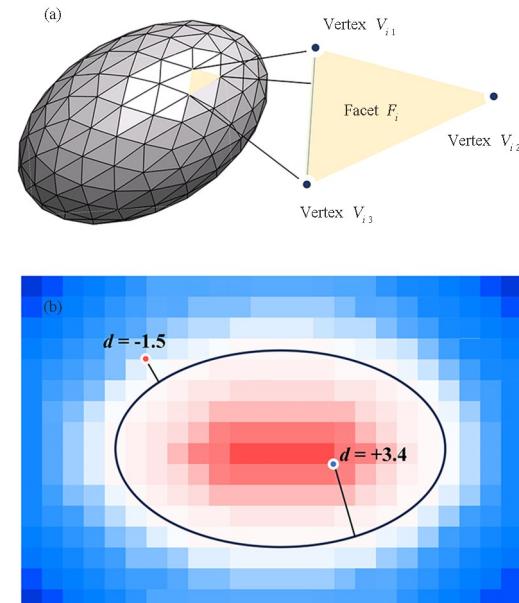


图 1 多面体模型与 SDF 模型示意图:(a) 多面体模型;颗粒的几何特征表达;(b) SDF 模型;颗粒及其带符号距离场(二维示意图)

Fig. 1 Diagram of polyhedron model and SDF model:
(a) Polyhedron model: geometric characterization of particles;
(b) SDF model: particle and the signed distance fields (2D diagram)

同时,本文引入 SDF 作为一种新的形状模型应用于颗粒系统的分析中。SDF 是一种隐式形状模型,属于离散函数表示法中的一种,利用一系列带有特定关联信息的边界节点来表示粒子形状。对于空间内某一点, SDF 模型返回该查询点相对于

目标颗粒的符号距离,符号距离定义为查询点到颗粒表面的最短距离.在不丧失一般性的情况下,若点位于颗粒表面内部,则带符号距离为正,否则为负,如图 1(b)所示,由此取 SDF 的零等值面可以方便地表示粒子表面.本文使用开源 SDFGen^[7]算法工具构建颗粒 SDF 模型,基于均匀性离散化的准则(例如固定网格间隔 Δx)将物体所在空间进行离散,建立围绕在目标体周围、单元格大小为 Δx 的三维均匀网格,形成了一个简洁有序的网格节点集合,包含网格点坐标 $[\alpha, \beta, \gamma]^T$ 及其对应的距离值 $d_{\alpha, \beta, \gamma}$,其中 $d_{\alpha, \beta, \gamma}$ 表示场点(颗粒表面某一节点)到目标表面的带符号最短距离.后续解算中利用已存储的带符号距离进行三维插值,便可对当前网格节点进行距离评估.

1.2 SDF 接触检测方法

在进行颗粒动力学行为分析计算前,必须引入合适的坐标系.对于两个接触颗粒 i, j 之间的相对状态信息(如位置、速度、角速度、姿态等)需要进行坐标系变换统一到同一坐标系中才能进行正确的解算处理.

本文使用三个参考坐标系描述某一不规则颗粒 j 在颗粒 i 附近的运动:定义惯性坐标系 I ,包括标准正交轴 $\{\hat{I}_1, \hat{I}_2, \hat{I}_3\}$;定义颗粒 i 本体系 Γ ,原点位于目标颗粒 i 质心,标准正交轴 $\{\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_3\}$ 与颗粒 i 惯性主轴一致;定义颗粒 j 本体坐标系 P ,原点位于颗粒 j 质心,标准正交轴 $\{\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3\}$ 与颗粒 j 惯性主轴对齐,如图 2(a) 中所示坐标系.在颗粒 i 的本体系中,颗粒 j 相对于颗粒 i 的位置由式(1)给出.

$$\mathbf{r}_{ij} = R_I^i \cdot (\mathbf{r}_j^I - \mathbf{r}_i^I) \quad (1)$$

其中 $\mathbf{r}_i^I, \mathbf{r}_j^I$ 是颗粒 i, j 在惯性系中的位置坐标,符号 R_I^i 是由惯性坐标系 I 变换到颗粒 i 本体系的方向余弦矩阵,可以由颗粒姿态四元数推导得出.

在颗粒 i 本体系中,颗粒 j 相对于颗粒 i 的相对速度由式(2)给出.

$$\mathbf{v}_{ij} = (-\boldsymbol{\omega}_{li}^i \times R_I^i \cdot (\mathbf{r}_j^I - \mathbf{r}_i^I) + R_I^i \cdot (\mathbf{v}_j^I - \mathbf{v}_i^I)) \quad (2)$$

其中 $\boldsymbol{\omega}_{li}^i$ 表示颗粒 i 角速度在自身本体系中的投影.

颗粒 j 相对于颗粒 i 的相对角速度在颗粒 i 本体系中的分量由式(3)给出.

$$\boldsymbol{\omega}_{ij} = \boldsymbol{\omega}_j^i - \boldsymbol{\omega}_i^i = (R_I^i \cdot R_j^I \cdot \boldsymbol{\omega}_j^i) - \boldsymbol{\omega}_i^i \quad (3)$$

其中 $\boldsymbol{\omega}_i^i$ 和 $\boldsymbol{\omega}_j^i$ 分别对应颗粒 i, j 角速度在各自本体系中的投影. $\boldsymbol{\omega}_j^i$ 是颗粒 j 在颗粒 i 本体系中的角速度.

为提高接触检测的效率和精度,本文将接触检测分为粗接触检测和精细接触检测两个阶段.粗接触检测是快速识别出目标颗粒的邻近颗粒,避免遍历系统中所有颗粒进行接触判断.精细接触检测阶段是准确计算不规则颗粒接触对之间的接触点、法线方向、侵入深度等接触特征信息,这是接触力和接触力矩分析的基础.

在粗接触检测阶段,将整个计算域划分为一系列边长为 l 的单元网格室,根据每个颗粒在惯性系下的质心坐标位置将其分配到相应位置单元格中.根据边界球的最大半径确定单元格边长,即 $l = 2 \cdot \max\{R_i\}, (i=1, 2, 3, \dots, n)$,这一长度的设置保证了任意两个颗粒的接触只会发生在同一单元格内或是两两相邻的单元格内.同时,将 SDF 模型及多面体模型描述的不规则颗粒用最小外接球包围起来,作为颗粒形状的第一近似来缩小搜索范围.每个不规则颗粒 i 边界包围球的半径 $R_i (i=1, 2, 3, \dots, n)$ 由式(4)确定:

$$R_i = \max\{(\|\mathbf{o}_i - \mathbf{r}_{ik}\|)\} \quad (4)$$

其中 n 为颗粒总数.符号 \mathbf{o}_i 表示第 i 个不规则颗粒的质心坐标, \mathbf{r}_{ik} 表示以三角形网格表面表述的颗粒顶点坐标.图 2(a)给出了第 i 和第 j 个粒子的质心及其边界球.

进一步,采用均匀网格空间排序法确定颗粒之间的邻接关系.假设颗粒 i 的边界包围球所在单元格为目标单元格,将目标颗粒 i 的边界包围球与同一单元格及相邻邻接单元格内的颗粒边界包围球半径进行比较.若一对颗粒间的质心距离大于两颗粒边界球半径之和,颗粒间不发生接触,否则,颗粒的边界球发生接触.对于边界球接触的颗粒对,继续执行精细接触检测,检测边界球内部的颗粒之间是否相互接触.每个迭代步骤中同时更新颗粒的位置坐标、三维空间索引以及单元格的上下限.这种方法避免了实际并未发生接触的颗粒之间的接触检测,极大地减少了粗接触检测阶段的计算量^[8].

在精细接触检测阶段,如图 2(b)所示,对于边界包围球重叠的邻接颗粒,颗粒 i 使用 SDF 模型描述,颗粒 j 采用多面体模型中离散的一组节点

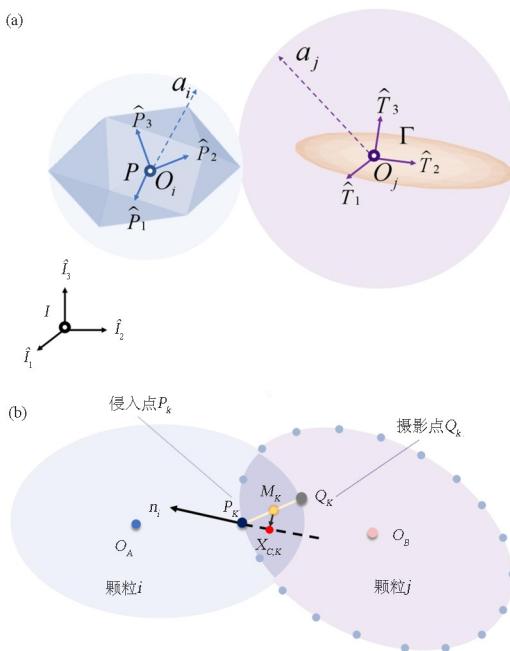


图 2 基于 SDF 方法的接触检测:(a) 颗粒间粗接触检测: 坐标系、不规则颗粒及其包围球;(b) 颗粒间精细接触检测: 接触点、法线方向
Fig. 2 Contact detection based on SDF method;(a) Coarse contact detection between particles: reference frames, irregular particles and their bounding spheres;(b) Fine contact detection between particles: contact point and normal direction

(即颗粒三角形网格顶点)进行描述. 由此, 可以将颗粒 i, j 是否接触的问题转化为颗粒 j 是否存在一个表面节点侵入颗粒 i 内部的问题^[9]. 通过计算节点到颗粒表面的符号距离, 根据其符号便可检测接触并得到接触特征信息.

图 3 中给出了 SDF 方法精细接触检测的几何表达. 场点(颗粒表面某一节点)到目标颗粒表面的

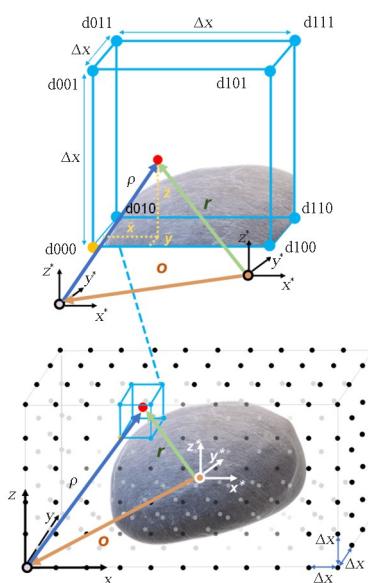


图 3 颗粒间精细接触检测:符号距离场几何描述

Fig. 3 Fine contact detection between particles: geometric description of the signed distance field

距离通过场点周围三维空间的八个体素网格点的符号距离进行线性插值计算得出^[10], 即

$$d(\mathbf{r}) = a_0 + a_1 \bar{x} + a_2 \bar{y} + a_3 \bar{z} + a_4 \bar{x}\bar{y} + a_5 \bar{y}\bar{z} + a_6 \bar{x}\bar{z} + a_7 \bar{x}\bar{y}\bar{z} \quad (5)$$

其中, $0 \leq \bar{x}, \bar{y}, \bar{z} \leq 1$ 是场点 \mathbf{r} 在当前单元网格内的正则化坐标, 即

$$\bar{\mathbf{r}} = [\bar{x} \quad \bar{y} \quad \bar{z}]^T = \frac{\boldsymbol{\rho}}{\Delta x} - \text{floor}\left(\frac{\boldsymbol{\rho}}{\Delta x}\right) \quad (6)$$

式(5)中的 $a_0 \sim a_7$ 参数是场点 \mathbf{r} 周围八个网格点对应的符号距离 $d_{\alpha, \beta, \gamma}$ 的线性组合, 即

$$\begin{aligned} a_0 &= d_{000} \\ a_1 &= d_{100} - d_{000} \\ a_2 &= d_{010} - d_{000} \\ a_3 &= d_{001} - d_{000} \\ a_4 &= d_{000} - d_{100} - d_{010} + d_{110} \\ a_5 &= d_{000} - d_{010} - d_{001} + d_{011} \\ a_6 &= d_{000} - d_{100} - d_{001} + d_{101} \\ a_7 &= -d_{000} + d_{100} + d_{010} + d_{001} - d_{110} - d_{011} - \\ &\quad d_{101} + d_{111} \end{aligned} \quad (7)$$

其中, d_{000} 点的三维索引由 $\text{floor}(\boldsymbol{\rho}/\Delta x)$ 得出.

根据场点到目标颗粒表面的距离符号来判断颗粒是否接触, 若距离符号为负, 则当前场点(颗粒 j 某一节点)未接触颗粒 i , 不进行后续解算, 并跳至颗粒 j 的下一节点进行接触判断; 若符号为正, 则该点位于颗粒 i 内部, 即两颗粒发生接触, 将该距离数值视作颗粒 j 某三角形表面网格顶点侵入目标颗粒 i 的侵入深度 $d_{n,k}$.

接触点处的法向量可以通过 SDF 模型的归一化梯度计算得出^[11], 如式(8)所示:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{N}}(\mathbf{r}) &= \frac{\nabla d(\mathbf{r})}{||\nabla d(\mathbf{r})||} \\ \nabla d(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} a_1 + a_4 \bar{y} + a_6 \bar{z} + a_7 \bar{y}\bar{z} \\ a_2 + a_4 \bar{x} + a_5 \bar{z} + a_7 \bar{x}\bar{z} \\ a_3 + a_5 \bar{y} + a_6 \bar{x} + a_7 \bar{x}\bar{y} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

定义颗粒接触点位于通过场点 P_k 、沿颗粒 i 法线 \mathbf{n}_i 方向的延长线 $l_{c,k}$ 上, 如图 2(b)所示. 对于某侵入点 P_k , 首先求出侵入点 P_k 和侵入点在颗粒 i 表面投影点 Q_k 的中点 M_k , 接触点定义为该中点在线段 $l_{c,k}$ 上的投影点 $x_{c,k}$, 计算式如下:

$$\mathbf{x}_{c,k} = \mathbf{x}_{P_k} + \eta \mathbf{n}_k \quad (9)$$

式中, 下标 k 表示顶点索引序号, 参数 η 通过投影

关系计算得到.

综上,应用符号距离场的离散元方法在采用多面体模型显式刻画不规则颗粒外形的情况下,成功避免了原多面体方法中使用拉普拉斯方程遍历所有三角形侧面判定接触的复杂计算^[11],还可同时给出接触颗粒对间的接触特征信息,为大规模不规则颗粒计算提供了可能.

1.3 颗粒动力学模型

颗粒间接触时采用 Hertz 接触模型描述法向接触力^[12],采用正则化库仑摩擦定律刻画切向接触力,颗粒间的相对位移远小于颗粒自身尺度.其中,非线性黏弹模型将颗粒之间的接触近似为非线性弹簧与黏滞阻尼减震器,则作用在颗粒 i 单个接触点上的弹性恢复力为:

$$\mathbf{F}_{cn,k_elastic} = -k_{n,k}d_{n,k}\mathbf{n}_k \quad (10)$$

其中 $k_{n,k}$ 为刚度系数,由颗粒 i, j 的杨氏模量 v_i, v_j ,泊松比 Y_i, Y_j ,颗粒包围球半径 r_i, r_j 以及法向接触形变量 $d_{n,k}$ 决定:

$$k_{n,k} = \frac{4}{3} \left[\frac{Y_i Y_j}{Y_j(1 - \nu_i^2) + Y_i(1 - \nu_j^2)} \right] \cdot \sqrt{\frac{R_i R_j}{R_i + R_j}} \cdot d_{n,k} \quad (11)$$

弹性恢复力表达式中包含了法向接触形变量 $d_{n,k}$,这也反映了 Hertz 接触理论的非线性特点.

除去弹性恢复力,由于实际过程中颗粒碰撞发生在非理想条件下,接触过程中的能量耗散将会引起粘滞耗散力:

$$\mathbf{F}_{cn,k_damping} = C_{n,k}\mathbf{v}_{n,k} \quad (12)$$

其中, $C_{n,k}$ 为法向阻尼系数,由颗粒材料的刚度系数 $k_{n,k}$ 、恢复系数 ϵ_n 以及颗粒 i, j 的质量 m_i, m_j 决定:

$$C_{n,k} = \frac{\ln \epsilon_n}{\sqrt{\ln^2 \epsilon_n + \pi^2}} \cdot \sqrt{\frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \cdot 5 \cdot k_{n,k}} \quad (13)$$

变量 $\mathbf{v}_{n,k}$ 为法向相对速度:

$$\mathbf{v}_{n,k} = (\mathbf{n}_k \cdot \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{n}_k \quad (14)$$

结合式(10)和式(12),作用在颗粒 i 单个接触点上的法向黏弹力可以写为:

$$\mathbf{F}_{cn,k} = -k_{n,k}d_{n,k}\mathbf{n}_k + C_{n,k}\mathbf{v}_{n,k} \quad (15)$$

颗粒材料法向接触力的力学性质主要由相应的弹性系数 $k_{n,k}$ 和阻尼系数 $C_{n,k}$ 控制,可体现颗粒材

料在受到外界压力作用时的强度特性和能量耗散能力.

采用基于正则化库仑摩擦定律的切向接触模型^[13],如果滑移速度低于某一很小的速度阈值,那么摩擦力会以二次项形式衰减,以避免静摩擦力的定值状态.碰撞颗粒对之间单个接触点上的切向接触力由切向相对速度大小:

$$v_{t,k} = \|\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_{n,k} \cdot \mathbf{n}_k\| \quad (16)$$

以及法向接触力幅值决定:

$$\mathbf{F}_{ct,k} = \begin{cases} \mu \cdot F_{cn,k} \cdot \frac{\mathbf{v}_{t,k}}{v_{t,k}}, & v_{t,k} \geq v_\epsilon \\ \mu \cdot F_{cn,k} \cdot \frac{\mathbf{v}_{t,k}}{v_\epsilon} \cdot (2 - \frac{v_{t,k}}{v_\epsilon}), & v_{t,k} < v_\epsilon \end{cases} \quad (17)$$

根据颗粒间法向接触模型以及切向接触模型,对于颗粒 i, j 上的单个接触点,总的接触力和接触力矩如下式所示:

$$\mathbf{F}_{ck,i} = \mathbf{F}_{cn,k} + \mathbf{F}_{ct,k}, \mathbf{F}_{ck,j} = -\mathbf{F}_{ck,i} \quad (18)$$

$$\mathbf{M}_{ck,i} = \mathbf{r}_{T_i X_k} \times \mathbf{F}_{ck,i},$$

$$\mathbf{M}_{ck,j} = (\mathbf{r}_{T_i X_k} - \mathbf{r}_{T_i T_j}) \times \mathbf{F}_{ck,j} \quad (19)$$

对于两个不规则颗粒的接触,通常会存在多个接触点.两个颗粒间所有接触点的平均接触力和接触力矩如式(20)所示:

$$\mathbf{F}_{ci} = \frac{\sum_{k=1}^{Num} \mathbf{F}_{cki}}{Num}, \mathbf{F}_{cj} = \frac{\sum_{k=1}^{Num} \mathbf{F}_{ckj}}{Num},$$

$$\mathbf{M}_{ci} = \frac{\sum_{k=1}^{Num} \mathbf{M}_{cki}}{Num}, \mathbf{M}_{cj} = \frac{\sum_{k=1}^{Num} \mathbf{M}_{ckj}}{Num} \quad (20)$$

其中,符号 Num 代表接触点的总数.公式(20)中,接触力 $\mathbf{F}_{ci}, \mathbf{F}_{cj}$ 和接触力矩 $\mathbf{M}_{ci}, \mathbf{M}_{cj}$ 均在颗粒 i 本体坐标系中进行表示.在计算颗粒系统运动行为时,需要将颗粒 i, j 所受的接触力 $\mathbf{F}_{ci}, \mathbf{F}_{cj}$ 通过坐标变换转换到惯性坐标系中进行表示,颗粒 j 所受力矩 \mathbf{M}_{cj} 也应变换至颗粒 j 的本体坐标系中进行表示.

仿真中颗粒的运动遵循牛顿第二定律,状态动力学方法为^[14]

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F}_c + \mathbf{F}_{ext}$$

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = (\mathbf{I}\boldsymbol{\omega}) \times \boldsymbol{\omega} + \sum \mathbf{M}_c + \mathbf{M}_{ext}$$

$$d\mathbf{q}/dt = 1/2 \cdot B(\mathbf{q}) \cdot [0 \quad \boldsymbol{\omega}]^T \quad (21)$$

其中, m 和 \mathbf{I} 分别为颗粒的质量和转动惯量, $d\mathbf{v}/dt$

和 $d\omega/dt$ 分别为平动加速度和角加速度. $\sum \mathbf{F}_c$ 和 $\sum \mathbf{M}_c$ 表示接触颗粒之间作用产生的接触力和接触力矩; \mathbf{F}_{ext} 是外力, 即颗粒所受重力和墙壁对颗粒施加的墙壁力, \mathbf{M}_{ext} 是外力产生的力矩.

颗粒的姿态采用四元数 \mathbf{q} 进行描述. 在四元数 \mathbf{q} 的微分方程中, 符号 $\mathbf{B}(\mathbf{q})$ 表示由四元数 \mathbf{q} 生成的反对称矩阵, 计算公式为

$$\mathbf{B}(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} q_0 & -q_1 & -q_2 & -q_3 \\ q_1 & q_0 & -q_3 & q_2 \\ q_2 & q_3 & q_0 & -q_1 \\ q_3 & -q_2 & q_1 & q_0 \end{bmatrix} \quad (22)$$

1.4 不规则颗粒离散元法的求解流程

基于 SDF 处理不规则颗粒离散元的主要过程包括初始化、粗接触检测、精细接触检测、接触力计算、运动状态更新五个主要阶段. 方法流程如图 4 所示, 首先对模拟场景进行初始化, 设置原始颗粒、边界的初始状态以及设置各种物理参数.

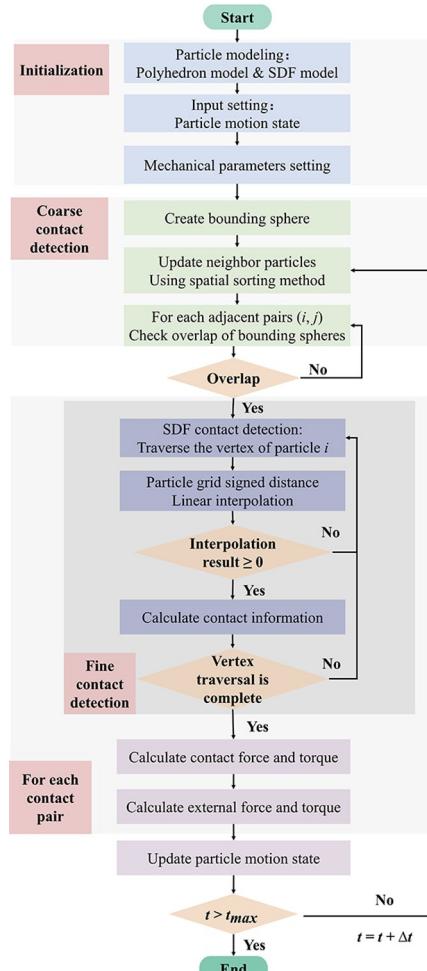


图 4 应用 SDF 不规则颗粒离散元法计算流程图

Fig. 4 Flowchart of the irregular discrete elements based on SDF method

在每个迭代时间步中, 先进行颗粒之间的粗接触检测: 为每个颗粒的形状建立球包围盒, 并根据颗粒的质心坐标采用均匀网格空间排序法进行邻居颗粒搜索. 接着进行颗粒之间的精细接触检测: 根据颗粒、边界的多面体模型及 SDF 模型, 利用颗粒表面网格点的符号距离进行线性插值, 得出一对接触颗粒间接触点、法线方向、侵入距离等接触特征信息. 在此基础上, 对每个颗粒计算接触力、接触力矩, 同时计算外部环境施加的边界力、场力以及力矩, 并求出合力、合力矩. 积分状态微分方程更新颗粒系统的状态信息, 不断迭代, 直至达到仿真停止条件.

2 数值仿真算例与实验验证

根据前述原理, 作者实验室自主开发了 C++ 程序“NBodySDF”仿真程序, 用于不规则颗粒系统的仿真分析. 设计了颗粒碰撞、颗粒群塌落两类工况探究颗粒系统动力学行为, 通过数值仿真与实验分析, 验证方法的有效性.

2.1 颗粒碰撞仿真测试

针对球形颗粒、二十面体颗粒在无重力情况下开展对心碰撞仿真, 表 1 为颗粒基本参数和模拟参数设置, 表中 N_v 为顶点数, N_f 为面数, ρ 为密度, Y 为杨氏模量, ν 为泊松比, ϵ 为恢复系数, μ 为摩擦系数. 其中颗粒粒径通过遍历颗粒表面各三角形网格顶点相对质心距离进行比较, 距离最大值视为粒径; 碰撞类型为完全弹性碰撞. 在仿真过程中输出各接触时刻两颗粒间的侵入深度进行检验, 均未超过颗粒等效半径的 1%. 仿真结果表明, 颗粒形状显著影响颗粒的动态碰撞过程. 当球形颗粒发生对心碰撞后, 两颗粒能够很好地按照原速度的反方向继续沿直线运动, 未发生偏移或转动; 球形颗粒对心碰撞过程中转动动能恒为零, 总动能与平动动能随时间的变化过程一致. 对于二十面体颗粒, 碰撞后颗粒产生了转动并且具有不同方向的平动速度, 图 5 展示了二十面体颗粒对心碰撞过程中能量变化情况, A 时刻两颗粒尚未发生接触碰撞, B 时刻两颗粒接触, C 时刻颗粒接触侵入深度达到最大值, D 时刻两颗粒完全分离; 全碰撞过程中, 部分平动动能转变为颗粒的转动动能, 颗粒的总动能守恒, 验证了算法在颗粒对接触解算中的准确性.

表 1 不同形状颗粒对心碰撞仿真参数设置
Table 1 Simulation parameters of centripetal collision of particles with different shapes

Particle Shape	Particle geometry parameter			Particle physical parameter			
	Radius/cm	N_v	N_f	$\rho/(g\cdot cm^{-3})$	Y/GPa	v	ϵ
Sphere	3.64	162	320	2.65	0.01	0.2	1.0
Icosahedron	5.96	42	80	2.65	0.01	0.2	1.0

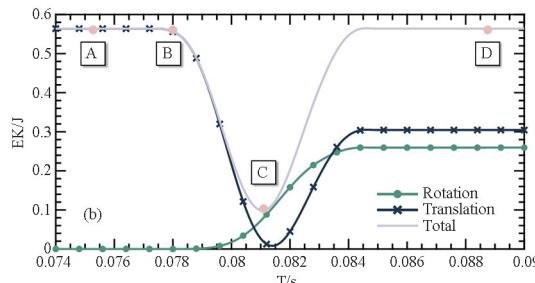


图 5 无重力下二十面体颗粒对心碰撞过程中动能变化情况
Fig. 5 The evolution of kinetic energy during the icosahedral particles centered collision in zero gravity

2.2 颗粒群塌落滞留的仿真与实验对比分析

本节讨论一类料斗实验^[15]中的颗粒塌落滞留区问题,对比分析 SDF 离散元数值仿真结果与地面实验结果,分析不同形状颗粒试样休止角的变化情况,进一步验证本文数值方法的有效性。

仿真范围域为长度 18cm、宽度 6cm 的立方体盒,距盒底高度 15cm 处的中心设置一块与盒同宽的挡板,挡板两侧各开设了长度为 3.5cm 的开关漏口。为研究颗粒形状对颗粒堆积休止角的影响,定义参数等轴度 $AR = l_3^{3D} / l_1^{3D} \in (0, 1)$, 等轴度越接近于 1, 颗粒形状越接近于等径(如球形), 等轴度

越接近于 0, 颗粒形状越扁平或越细长^[16]。采用了两种形状的颗粒进行数值模拟, 仿真参数如表 2 所示。试样 I 由 $AR = 1.0$ 的球形颗粒组成, 粒径 7mm; 试样 II 由 $AR = 0.65$ 的椭球形颗粒组成, 粒径 8.6mm, 两种颗粒均具有 162 个三角形表面网格顶点与 320 个三角网格面。球形颗粒(实验中黄豆颗粒)共 1596 颗; 椭球形颗粒(实验中黑豆颗粒)共 1600 颗。仿真时长为 10.0s, 积分步长为 5×10^{-5} s。首先, 在立方体盒上半部分随机产生颗粒, 使其在重力作用下落入位于立方盒中上部的隔板上。系统沉降达到稳定状态后, 将隔板两侧的漏口打开, 颗粒从开口处受重力自由下落, 掉入立方盒下部。最终在颗粒系统内摩擦力的作用下, 部分颗粒将留存在中心隔板上, 形成稳定的三角形堆积体, 即塌落滞留区。而两侧开口正下方经过上方颗粒下落输入, 颗粒不断沉积, 当堆积角度超出颗粒摩擦角时, 将向中心与壁面两侧坍塌, 从而形成特殊的“M”形堆积结构。同时进行硬件实验, 使用千眼狼高速摄像机 2F01M 进行拍摄, 满画幅分辨率 1120×860 , 满画幅采集帧率 380FPS, 实验器材及场景如图 6 所示。

表 2 不同形状颗粒塌落仿真参数设置
Table 2 Simulation parameters setting of particles collapse with different shapes

Particle Shape	Particle geometry parameter			Particle physical parameter			
	$\rho/(g\cdot cm^{-3})$	Y/GPa	v	ϵ	μ		
Sample- I Sphere $AR = 1.0$	2.0	0.01	0.2	0.3	0.2		
Sample- II Ellipsoid $AR = 0.65$	2.0	0.01	0.2	0.3	0.2		

图 7 整理了几个时刻颗粒系统塌落滞留的仿真与实验动态过程。对实验摄像结果进行图 8(a)~(d)所示的二值化处理、最外轮廓提取、直线拟合等一系列图像处理后, 能够得到各次实验塌落滞留区颗粒堆积体的左侧、右侧休止角的直线拟合结果, 取其斜率的反正切值即为休止角数值。图 8(e)中不同形状颗粒塌落滞留区休止角对比再次验证了

仿真与实验的一致性。在多次实验测试中, 中心板上的颗粒数目为 256~281 个(球形颗粒)和 331~368 个(椭球形颗粒)。仿真结果中最终质心位于中心板高度上方的球形颗粒数目为 278 个, 与实验值十分接近; 椭球形颗粒数目为 391 个, 与实验数目略有差异, 可能原因是仿真与实验颗粒初始姿态存在差异导致的结果不同, 相较于球形颗粒, 不规则

颗粒的姿态对其运动过程演化的影响体现得更加明显。由于椭球形颗粒具有较大的滚动阻力,导致中央板上部的滞留区颗粒数目更多,在数值模拟流动沉积过程中形成的上、下堆积结构的坡度角平均

值(25.40°)明显大于球形颗粒休止角(15.02°)。两种形状颗粒仿真所得休止角平均值与实验平均值(椭球形颗粒 26.45° 、球形颗粒 15.89°)相吻合,验证了算法的有效性。

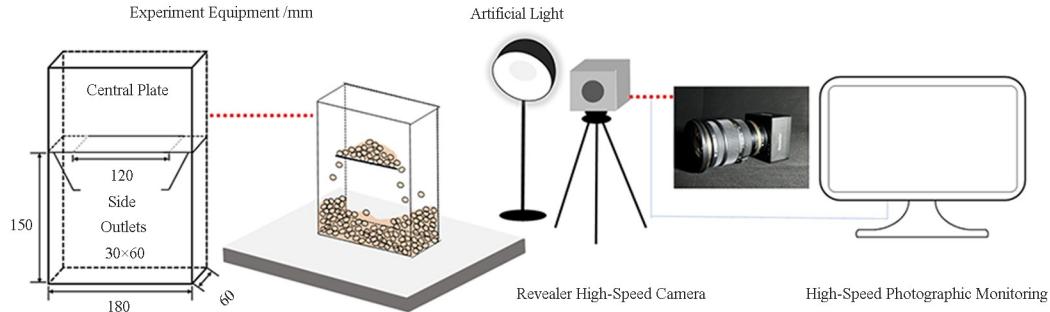


图 6 实验器材与场景
Fig. 6 Experimental equipment and scene

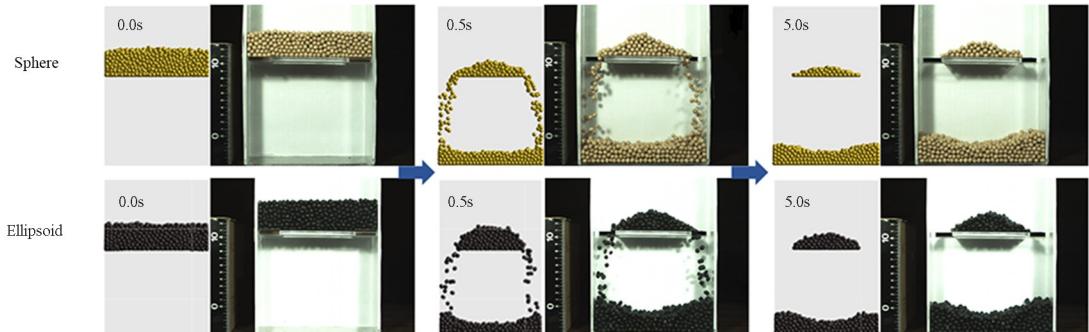


图 7 椭球颗粒与球形颗粒的塌落仿真与实验结果
Fig. 7 Simulation and experiment results of ellipsoidal and spherical particles collapse

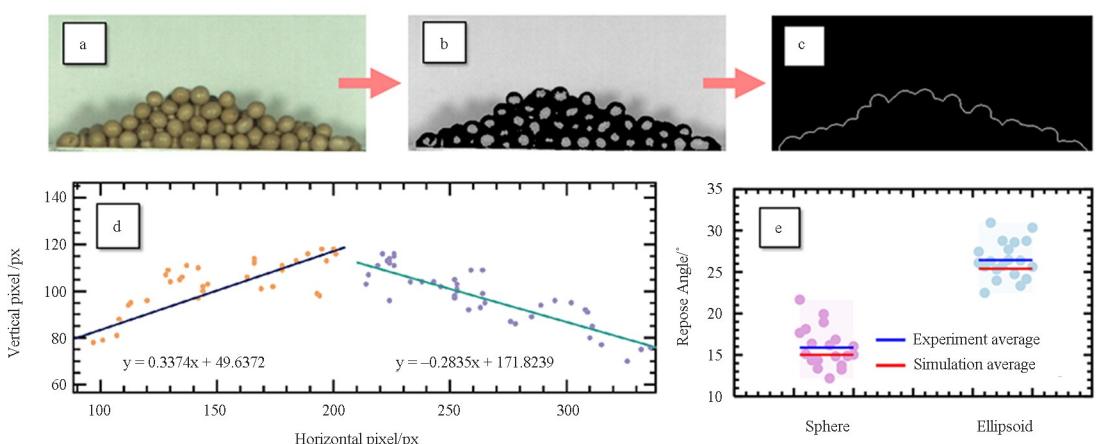


图 8 颗粒塌落滞留区实验结果:(a) 原始图像;(b) 二值化处理;(c) 最外轮廓提取;(d) 直线拟合;(e) 不同形状颗粒塌落滞留区休止角对比
Fig. 8 Experimental results of particle stagnant zones:(a) Original image;(b) Binarization;(c) Contour extraction;(d) Line fitting;(e) Comparison of repose angles in stagnant zones of different shapes of particles

3 结论

论文提出了一种应用符号距离场进行不规则颗粒接触检测的离散元方法,通过颗粒塌落仿真算例与实验结果对比验证了方法的有效性。自主开发了“NBodySDF”仿真代码用于不规则颗粒离散元

系统的处理分析,设计了颗粒碰撞、颗粒群塌落滞留两类算例探究颗粒系统动力学行为,进行方法的仿真和实验验证。

在颗粒碰撞数值模拟中,发现颗粒形状影响了接触力的作用效果,进而影响了颗粒的运动状态。在颗粒群塌落滞留数值模拟中,发现颗粒形状会对

颗粒系统堆积休止角产生影响,颗粒外形越细长,颗粒系统的休止角越大。针对颗粒塌落工况,利用地面实验对数值模拟手段进行校核,实验休止角平均值与仿真所得休止角数值具有良好一致性,动态塌落过程也基本吻合,验证了所提出方法的可靠性。

参考文献

- [1] TORQUATO S, JIAO Y. Dense packings of the Platonic and Archimedean solids [J]. *Nature*, 2009, 460(7257): 876–879.
- [2] CUNDALL P A, STRACK O D L. A discrete numerical model for granular assemblies [J]. *Géotechnique*, 1979, 29(1): 47–65.
- [3] FAVIER J F, ABBASPOUR-FARD M H, KREMER M, et al. Shape representation of axi-symmetrical, non-spherical particles in discrete element simulation using multi-element model particles [J]. *Engineering Computations*, 1999, 16 (4): 467–480.
- [4] OUADFEL H, ROTHENBURG L. An algorithm for detecting inter-ellipsoid contacts [J]. *Computers and Geotechnics*, 1999, 24(4): 245–263.
- [5] WILLIAMS J R, O'CONNOR R. A linear complexity intersection algorithm for discrete element simulation of arbitrary geometries [J]. *Engineering Computations*, 1995, 12(2): 185–201.
- [6] WEN T G, ZENG X Y, CIRCI C, et al. Hop reachable domain on irregularly shaped asteroids [J]. *Journal of Guidance Control Dynamics*, 2020, 43(7): 1269–1283.
- [7] Batty C. SDFGen [CP/OL]. (2019-10-24) [2023-01-27]. <https://github.com/christopherbatty/SDFGen/>.
- [8] ZENG X Y, WEN T G, YU Y, et al. New practical discrete non-spherical N-body method: validation with the Brazil nut effect [J]. *Icarus*, 2022, 387: 115201.
- [9] LAI Z S, ZHAO S W, ZHAO J D, et al. Signed distance field framework for unified DEM modeling of granular media with arbitrary particle shapes [J]. *Computational Mechanics*, 2022, 70(4): 763–783.
- [10] VAN WAL S, REID R G, SCHEERES D J. Simulation of nonspherical asteroid landers: contact modeling and shape effects on bouncing [J]. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 2020, 57(1): 109–130.
- [11] 曾祥远, 李俊峰, 刘向东. 细长小行星探测动力学与控制[M]. 北京: 清华大学出版社, 2019.
- ZENG X Y, LI J F, LIU X D. Dynamics and control over elongated asteroids [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2019. (in Chinese)
- [12] HERTZ H. On the contact of elastic solids [J]. *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, 1881, 92: 156–171.
- [13] HIPPmann G. An algorithm for compliant contact between complexly shaped bodies [J]. *Multibody System Dynamics*, 2004, 12(4): 345–362.
- [14] RICHARDSON D. Direct large-scale N-body simulations of planetesimal dynamics [J]. *Icarus*, 2000, 143(1): 45–59.
- [15] ZHOU Y C, WRIGHT B D, YANG R Y, et al. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation [J]. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 1999, 269(2/3/4): 536–553.
- [16] MOLLON G, ZHAO J D. 3D generation of realistic granular samples based on random fields theory and Fourier shape descriptors [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2014, 279: 46–65.