非规则颗粒形态表征与离散元模拟方法研究进展

苏栋^{1,2,3}, 樊猛¹, 王翔⁴, 陈湘生^{1,2,3*}

1. 深圳大学土木与交通工程学院, 深圳 518060;

2. 滨海城市韧性基础设施教育部重点实验室(深圳大学), 深圳 518060;

3. 深圳市地铁地下车站绿色高效智能建造重点实验室, 深圳 518060;

4. 香港理工大学土木与环境工程学系, 香港 999077

* E-mail: xschen@szu.edu.cn

收稿日期: 2021-08-05; 接受日期: 2021-11-04; 网络版发表日期: 2022-04-12

国家自然科学基金(批准号: 51938008, 51878416, 52090081)资助项目

摘要 颗粒物在自然界和人类生产与生活中广泛存在, 对于非规则颗粒, 其宏观物理力学特性与几何形态密切相关. 本文以本课题组和合作者的相关研究为基础, 介绍了非规则颗粒几何形态的获取、重构、评价、随机生成以及离散元模拟方法等方面的研究进展. 总结了非规则颗粒形态不同获取方法的优缺点; 将颗粒二维形态和三维形态分别划分为星形和非星形两种类型, 介绍了各类型几何形态的计算几何重构方法; 系统总结了非规则颗粒不同层次形态评价指标的定义, 及基于计算几何的指标计算方法; 介绍了基于逆蒙特卡罗法的二维星形与三维星形随机颗粒生成方法, 以及可考虑一阶系数固有关系和其他阶系数经验相关性的二维非星形与三维非星形虚拟颗粒生成方法; 对于非规则颗粒的离散元模拟方法, 重点总结了颗粒几何形态表示、颗粒接触判断与颗粒接触力计算方法等核心问题的研究进展.

关键词 非规则颗粒, 几何形态, 非星形, 形态评价指标, 颗粒随机生成, 离散元模拟, 接触法则

1 引言

颗粒物是由大量离散固体颗粒组成并相互作用的复杂体系, 其广泛存在于自然界和人类的生产与生活中. 由大量颗粒组成的离散态物质体系具有不同于固、液、气物质的力学性质和运动规律^[1], 自18世纪以来受到科研工作者和工程技术人员的广泛关注, 如Coulomb^[2]最早提出了沙堆稳定倾斜角度与摩擦系数的关系, Reynolds^[3]探究了颗粒物质的剪胀性, Janssen^[4], Edwards和Mounfield^[5~7], Vanel等人^[8]针对颗粒

物质的粮仓效应和压力凹陷现象展开了深入的研究. 颗粒材料的物理力学特性受到工业与工程领域的科研和工程技术人员的广泛关注, 其中颗粒几何形态对颗粒材料的物理力学特性具有重要影响.

颗粒几何形态指颗粒的粒径、形状和表面结构等特性. 根据颗粒形状的特点, 颗粒可划分为星形颗粒和非星形颗粒两大类. 对于二维问题, 星形颗粒指在颗粒内部能够找到某一点O, 使得沿着某一方向连接点O到颗粒轮廓, 同一极角 φ 下只有一个极径 r 与之对应, 即极角和极径之间存在一一对应关系, 极径可以表示为极

引用格式: 苏栋, 樊猛, 王翔, 等. 非规则颗粒形态表征与离散元模拟方法研究进展. 中国科学: 技术科学, 2022, 52

Su D, Fan M, Wang X, et al. Research progress on morphological characterization and discrete element modeling of irregular particles (in Chinese). Sci Sin Tech, 2022, 52, doi: 10.1360/SST-2021-0353

角的单值函数. 而非星形颗粒是指在颗粒内部找不到这样的点 O , 使得极角与极径存在一一对应的关系. 如图1所示, 非星形颗粒同一极角方向发出的射线可能穿过颗粒轮廓两次, 这使得极径无法表示为极角的单值函数. 三维星形和非星形颗粒的定义与二维颗粒类似, 三维非星形颗粒往往存在局部凹陷, 如图2所示.

目前, 通常从三个不同层面对颗粒几何形态进行评价^[9-11]. 如图3所示, 第一层面度量整体形状, 常用指标为细长度与扁平度; 第二层面度量颗粒的尖锐程度或圆润程度, 常用指标为棱角度或磨圆度. 第三层面度量颗粒表面局部的起伏程度, 反映颗粒表面的纹理信息, 常用指标为粗糙度. 已有研究表明^[10,11], 这三个层面的指标是相互独立的, 每一层面的指标都可以在不影响其他两个层面指标的情况下独立改变. 其他度量颗粒几何形态的指标还有凹凸度、圆形度(二维)和球形度(三维)等^[12,13].

颗粒几何形态相关的研究由来已早, 如Wentworth^[14]于1919年就提出了磨圆度的计算公式, 而Wadell^[13]在1932年提出的磨圆度定义是目前应用最广泛的指标之一. 早期关于颗粒形态的分类主要采用将真实颗粒与标准颗粒进行目视比较的定性方法, 如Russell和Taylor^[15]在1937年基于颗粒的磨损程度将颗粒形状分为5个等级; Krumbein^[16]于1941年给出了9种不同棱角度的颗粒轮廓; Powers^[17]于1953年在Russell分类的基础上做了进一步的细分. 学者们^[18-20]在Powers和Krumbein提出的分类图的基础上做了修订, 得到了广泛使用的“Powers标准图例”和“Krumbein标准图例”.

考虑到目视比较法具有很强的主观性, 为了更准确、更客观地评价颗粒几何形态特征, 人们一直寻求数学定量方法来描述颗粒的几何形状. 针对二维非规则颗粒, Schwarcz和Shane^[21]在1969年提出将颗粒轮廓的极径用傅里叶级数展开表示, 随后Ehrlich和Weinberg^[22]详细介绍了求解傅里叶系数和确定颗粒质心的方法. Beddow和Philip^[23]给出了通过傅里叶变换进行大量颗粒轮廓快速重构与分析的方法. 然而以上方法并不适用于非星形颗粒, 解决这个问题的常用方法是Granlund^[24]于1972年提出的复傅里叶分析. Clark^[25], Thomas等^[26], Bowman等人^[27]将该方法引入到地质学领域, 用于岩土颗粒的形状分类和表征. 但是, 复傅里叶分析方法要求离散轮廓点必须等间距且离散点的总

数为 2^k (其中 k 是正整数). 近年来, Su和Xiang^[28]提出了一种新的方法, 该方法首先将颗粒轮廓上的点进行弧长参数化, 然后再将轮廓点的 x , y 坐标分别进行傅里叶级数展开, 解决了复傅里叶分析方法的局限性.

针对非规则颗粒三维几何形态分析, Mollon和Zhao^[29]在Bowman等人^[27]研究成果的基础上将傅里叶

图1 (网络版彩图)典型二维非星形颗粒
Figure 1 (Color online) Typical 2D nonstar-like particle.

图2 (网络版彩图)典型三维非星形颗粒
Figure 2 (Color online) Typical 3D nonstar-like particle.

图3 (网络版彩图)三个不同层面的颗粒形状特征示意图^[10]
Figure 3 (Color online) Three different scales of particle shape indexes [10].

方法拓展到了三维颗粒. 他们通过选取颗粒的三个正交截面来进行颗粒重构, 然而正交截面的选取具有一定的主观性, 该方法也会导致颗粒表面形态局部信息的丢失. 更为直接和可靠的方法是采用球谐函数直接对颗粒三维形态进行分析. 基于球谐函数的分析方法在早期主要针对星形颗粒, 即将颗粒表面点对应的极径展开为极角和方位角的球谐函数表达式, 再通过计算几何的方法进行几何形态的评价. Garboczi^[30], Liu等人^[12], Zhou和Wang^[31]利用该方法成功重构并分析了混凝土骨料颗粒和砂土颗粒的三维形貌. 针对非星形颗粒, Brechbühler等人^[32]提出将颗粒表面点的三个笛卡尔坐标分别进行球谐函数展开的分析方法. Zhou等人^[33]采用这种方法重构了Leighton Buzzard砂颗粒, Su和Yan^[34]采用了实数形式的球谐函数对砂粒进行重构和评价.

离散单元法(discrete element method, DEM)是研究几何形态对颗粒材料物理力学特性影响规律的重要手段. 对于非规则颗粒的离散元分析, 生成大量与真实颗粒形态相似的虚拟颗粒, 以及非规则颗粒之间的接触判断与接触力计算是关键. 针对前者, Ferrellec和McDowell^[35]提出了一种简单、快速生成复杂颗粒形状离散元模型的数值方法; Zheng和Hryciw^[36]提出了一种高效的离散元模型生成算法, 可以模拟岩土材料真实颗粒的形态; Xu等人^[37]基于傅里叶描述符与随机场理论相结合的方法生成了一系列不同形状的虚拟颗粒. Wei等人^[38]在球谐分析的基础上引入了分形维数生成了大量具有真实颗粒形态特征的砂颗粒; Wang等人^[39,40]提出了基于逆蒙特卡罗法的二维星形与三维星形颗粒的生成方法. 由于星形颗粒与非星形颗粒在重构机理上有重要区别, Su等人^[28,34]提出了适用于二维非星形与三维非星形虚拟颗粒的生成方法. 在非规则颗粒的接触判断与接触力计算方面, 目前采用的方法包括Clump-based DEM^[35], Polygon-based DEM^[41], SudoDEM^[42], NURBS-based DEM^[43], LS-DEM^[44]等, 其中通过圆盘绑定(二维)或圆球绑定(三维)的Clump-based DEM应用最为广泛, 该方法借助圆盘之间或圆球之间的接触判定和接触力计算来分析计算非规则颗粒之间的接触力. 然而, 该方法并不能反映非规则颗粒之间的真实接触和受力状态, 为解决此问题, Su和Wang^[45]提出了适用于二维星形颗粒的FS-DEM, Wang等人^[46,47]提出了适用于二维非星形颗粒的Arc-DEM和

适用于三维星形颗粒的SH-DEM, Feng^[48]提出了适用于三维非星形颗粒的离散元模拟方法.

总体而言, 人们对颗粒形态的研究经历了从定性到定量、从星形颗粒到非星形颗粒、从单一形状指标评价到整体形态重构和评价、从接触间接判断和计算到直接判断和计算的过程. 在这一发展过程中, 基于傅里叶级数和球谐函数的计算几何方法的引入具有重要意义.

2 非规则颗粒形态获取

真实颗粒几何形态信息的获取是进行颗粒几何形态重构和评价的基础, 包括二维几何轮廓的获取和三维表面形貌的获取.

2.1 二维形态获取

2.1.1 数码相机拍照

在早期, 对颗粒形状特征的研究主要是利用直接成像设备(照相机)获取颗粒影像, 然后利用数字图像处理技术提取二维轮廓并进行几何特征分析. 在获取影像时, 为了方便后期的图像处理与轮廓提取, 常将颗粒静置于平台上, 并通过垂直于平台的照相机从某个角度进行拍摄, 如Cassel等人^[49]利用数码相机垂直拍摄了卵石颗粒; Mora等人^[50]采用电荷耦合器件(charge-coupled device, CCD)照相机拍摄了混凝土粗骨料颗粒; 徐文杰等人^[51]利用数码相机获取了裸露的土石混合体边坡中块石的形态; Zheng和Hryciw^[52]对砂颗粒进行拍照处理, 并基于数字图像处理技术与计算几何算法构建了砂颗粒的二维轮廓离散元模型库.

2.1.2 显微镜拍照

采用相机直接进行拍摄的颗粒通常尺寸比较大, 如卵石、砾石、粗骨料等, 这些颗粒采用数码相机拍摄得到的数字图像可以满足精度要求. 对于砂土颗粒等较细的颗粒而言, 采用相机直接拍摄精度往往达不到要求, 此时可采用显微镜进行拍照. 显微镜又包括光学显微镜和扫描电子显微镜等. 相关的研究包括刘清秉等人^[53]采用光学显微镜获取了砂土颗粒图像以及Bowman等人^[27]采用扫描电子显微镜获得了4组砂土颗粒的电子显微照片.

2.1.3 动态颗粒图像分析仪与激光粒度仪

通过数码相机和显微镜获得的数字图像是静态的, 一次只能获取较少数量的颗粒图像, 如果需要在短时间内获取大量颗粒的二维图像, 则可以利用动态颗粒图像分析仪(例如QICPIC)和激光粒度仪(例如HELOS), 如图4所示^[54]. 与静态图像分析仪相比, 其单位时间内测量的颗粒数量更多, 增加了测试结果的统计代表性, 且操作方便、重复性好, 因而可大幅提高测试效率, 减少人员操作和外界因素的干扰.

2.2 三维形态获取

2.2.1 结构光扫描

结构光扫描技术是一种非接触光学三维测量方法, 其基本原理为使用计算机生成结构光图案, 利用投影仪投影到物体表面, 然后对图案进行解码等一系列图像处理来完成目标物体的三维重建. 对于一些尺寸较大的颗粒, 如骨料颗粒、砾石颗粒等, 数量较多时采用X-ray CT(X-ray computed tomography)扫描是不经济的, 此时可采用结构光进行颗粒扫描.

典型的结构光扫描仪主要由投影仪和摄像机组成, 投影仪在对象的表面上投射出一系列预先编排的图案或条纹. 如图5所示, 当投影仪将条纹图案照射到物体表面时, 如果物体表面是理想平面, 则在相机视图中的图案不会改变; 如果物体表面具有一定的起伏, 例如图5中的目标物体, 则图案将在相机视图中改变. 在进行结构光扫描测量时, 投影仪的图案投影和相机的图像采集同步进行, 成一定夹角的两个摄像头将同步采集目标物体所调制的图案, 然后对图案进行解码和相位计算, 并利用匹配技术、三角形测量原理, 解算出两个摄像机公共视区内像素点的三维坐标.

2.2.2 X-ray CT扫描

X-ray CT扫描技术主要利用多角度投影、全方位扫描、探测设备接收及图像重构技术来获取被检测试件每一层面的清晰图像, 进而通过图像处理软件得到试件的三维立体图像. 如图6所示, CT扫描系统主要由X射线源、探测器和旋转系统(转台)等组成.

CT技术最初应用于医学领域, 直到20世纪90年代随着计算机科学的不断进步, CT逐渐应用于工业和科研领域, 用于材料的微观结构表征, 如焦丽亚^[55]基于X-ray CT扫描技术和图像处理技术研究了不同级配条件下的沥青混凝土的细观接触参数与宏观力学性能之间的联系; 任俊达^[56]研究了沥青混合料试件的孔隙分布特征; 涂志先^[57]开展了粗集料的三维形态特征研究; Cheng和Wang^[58]研究了颗粒材料在剪切状态下的粒间接触演化; Wang等人^[59]获取了骨料颗粒的一系列断层扫描图像, 进行了单个颗粒的三维重构. 图7为利用深圳大学X-ray CT扫描仪(XRadia Micro XCT- 400)扫描并重构出的平潭砂颗粒.

2.2.3 近景摄影测量

近景摄影测量技术主要利用多部光学相机从不同角度对物体进行拍照, 然后将所得照片导入计算机中进行处理, 通过相关算法处理并重构目标物体的几何形貌特征, 如尺寸、位置与形状等. 该技术已在多个领域得到应用, 如建筑设计领域^[60]、工业加工领域^[61]、土木工程领域^[62,63]、生物医学领域^[64,65]等. 与其他技术相比, 近景摄影测量技术能更快速地获取目标物体的表面形貌信息.

图8为采用数码相机、数码摄影箱及计算机搭建的近景摄影颗粒图像采集平台^[66]. 由于自然环境中的

图4 (网络版彩图)动态颗粒图像分析仪(a)与激光粒度仪(b)^[54]

Figure 4 (Color online) The dynamic particle image analyzer (a) and the laser particle analyzer (b) [54].

图 5 (网络版彩图)结构光扫描仪测量原理图示

Figure 5 (Color online) Schematic diagram of a structured light system.

图 6 (网络版彩图)X-ray CT扫描系统

Figure 6 (Color online) X-ray CT scanning system.

图 7 (网络版彩图)平潭砂X-ray断层扫描三维重构^[34]

Figure 7 (Color online) Three-dimensional reconstruction of Pingtan sand by X-ray tomography [34].

光照条件不受控制, 拍摄出来的图片会受到噪声的影响, 降低图像拍摄的质量, 给后期处理增加了困难. 为

图 8 (网络版彩图)颗粒图像采集平台^[66]

Figure 8 (Color online) Particle image acquisition platform [66].

了减少外界因素对图像的干扰, 将颗粒放在小型摄影棚中进行拍摄, 在摄影棚的顶部底部以及侧面均安装有LED灯带, 以消除颗粒阴影的影响. 此外, 摄影箱的内壁安装有白色背景板, 以消除背景的干扰.

3 非规则颗粒几何形态重构

在获取颗粒形态信息的基础上, 可进行颗粒几何形态的重构. 基于计算几何方法的非规则颗粒二维几何轮廓和三维表面重构是进行颗粒几何形态定量评价和生成与真实颗粒形态相似的随机颗粒的基础. 本节分别介绍二维、三维星形及非星形几何形态的重构方法.

3.1 二维星形颗粒几何形态重构

在获取二维星形颗粒图像并经过图像处理提取轮廓后, 其轮廓信息是在笛卡儿坐标系下的一系列离散点集. 可基于这些离散的二维点集数据 $P(x, y)$, 利用极径傅里叶级数展开的方法, 重构出连续的颗粒轮廓.

首先将坐标原点移至颗粒的几何中心, 基于极坐标转换公式, 即

$$\begin{cases} \varphi = \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right), \\ r = \sqrt{x^2 + y^2}. \end{cases} \quad (1)$$

将笛卡儿坐标系下的离散点集 $P(x, y)$ 转换为极坐标系下的点集 $P'(x, y)$, 从而得到颗粒轮廓各离散点对应的极角 φ 和极径 r . 然后将每个离散点的极径 r 用傅里叶级数表示为极角 $\varphi(0 \leq \varphi \leq 2\pi)$ 的函数, 即

$$r(\varphi) = \sum_{n=0}^N [A_n \sin(n\varphi) + B_n \cos(n\varphi)], \quad (2)$$

式中, $r(\varphi)$ 为颗粒轮廓上离散点的极径, n 为傅里叶阶数, N 为傅里叶总阶数, A_n 和 B_n 为傅里叶系数.

令 $A_n = D_n \cos(\delta_n)$, $B_n = D_n \sin(\delta_n)$, 式(2)可改写为

$$r(\varphi) = \sum_{n=0}^N D_n \sin(n\varphi + \delta_n). \quad (3)$$

若颗粒轮廓上的离散点间距相等, 可按式求解得到傅里叶系数 A_n 和 B_n :

$$\begin{cases} \frac{A_n}{2} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (r_i \sin(n\varphi_i)), \\ \frac{B_n}{2} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (r_i \cos(n\varphi_i)). \end{cases} \quad (4)$$

若离散点非等间距, 可通过最小二乘法确定系数 A_n 和 B_n . 基于所求得的 A_n 和 B_n , 对于任意的极角 φ , 将其代入式(2)或式(3)中, 可求得该极角所对应的极径, 并进一步换算出颗粒轮廓在笛卡儿坐标系下的任意点坐标, 从而实现二维星形颗粒几何形态的重构.

3.2 二维非星形颗粒几何形态重构

对于非星形颗粒, 其极角和极径不存在一一对应关系, 因而不能直接对极径进行傅里叶展开. 本节主要介绍由 Su 和 Wang^[28] 提出的一种针对二维非星形轮廓的重构方法.

本方法理论上允许选择任意点作为坐标系原点, 为方便计算, 通常选择颗粒的几何(或质量)中心作为坐标原点, 然后通过旋转使颗粒的一个主轴方向与 x 轴重合, 另一个主轴方向与 y 轴重合, 如图9(a)所示. 为对非星形轮廓上的点进行弧长参数化, 首先将这些点映射到与颗粒轮廓具有相同周长的圆上(如将图9(a)中的点 A, B 和 C 映射到图9(b)中的点 A', B' 和 C'), 在映射过程中保持相邻点之间的距离不变; 然后, 确定每个映射点的极角, 如点 B' 所对应的极角为 φ'_B . 由于每一点与起始点(图9(a)中的点 A)的弧长距离都不同, 因此映射点的极角 φ' 也不同, 可以作为唯一表征非星形轮廓曲线上各点的参数.

将颗粒轮廓上每个点的水平坐标 x 和垂直坐标 y 用傅里叶级数表示为极角 $\varphi' (0 \leq \varphi' \leq 2\pi)$ 的函数, 即

图9 (网络版彩图) 二维非星形颗粒轮廓弧长参数化^[28]. (a) 非星形颗粒二维轮廓上的点; (b) 映射点的极角

Figure 9 (Color online) Arc parameterization of the 2D contour of non-star like particle^[28]. (a) Points on the 2D contour of nonstar-like particle; (b) polar angle of mapping points.

$$x(\varphi') = a_{x0} + \sum_{n=1}^N [a_{xn} \cos(n\varphi') + b_{xn} \sin(n\varphi')], \quad (5a)$$

$$y(\varphi') = a_{y0} + \sum_{n=1}^N [a_{yn} \cos(n\varphi') + b_{yn} \sin(n\varphi')], \quad (5b)$$

式中, x 和 y 为颗粒轮廓上各点的坐标, n 为傅里叶阶数, N 为傅里叶总阶数, a_{x0} , a_{y0} , a_{xn} , a_{yn} , b_{xn} , b_{yn} 为傅里叶系数.

基于轮廓上离散点的坐标, 利用最小二乘法可解出傅里叶系数. 得到傅里叶系数后, 对于任意的极角 φ' , 将其代入式(5)便可求得该极角所对应轮廓点的坐标, 从而实现二维非星形颗粒几何形态的重构.

3.3 三维星形颗粒几何形态重构

三维星形颗粒几何形态重构的常用方法之一是极径的球谐函数展开. 通常获取的三维颗粒表面形态信息为笛卡儿坐标系下的三维点云坐标, 因此首先将坐标轴原点移到颗粒的几何中心, 然后利用极坐标转换

公式, 即

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (6a)$$

$$\theta = \sin^{-1} \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \quad (6b)$$

$$\varphi = \tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right). \quad (6c)$$

将笛卡儿坐标系下的离散点集 $P(x, y, z)$ 转换为球坐标系下的点集 $P(r, \theta, \varphi)$, 从而得到颗粒表面各离散点的极角 θ 、方位角 φ 和极径 r . 各点的极径可视为极角与方位角的函数, 即 $r=r(\theta, \varphi)$. 然后基于球谐函数分析, 将表征颗粒表面形态的极径函数 $r=r(\theta, \varphi)$ 展开为一系列不同阶数的球谐正交基函数(勒让德多项式)的线性组合, 即

$$r(\theta, \varphi) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=-n}^n a_n^m Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (7)$$

式中, N 为球谐基函数总阶数, $Y_n^m(\theta, \varphi)$ 表示阶数为 n 、次数为 m 的球谐基函数, a_n^m 为球谐基函数 $Y_n^m(\theta, \varphi)$ 对应的系数, 系数总个数为 $(n+1)^2$. 复数形式的球谐基函数 $Y_n^m(\theta, \varphi)$ 的表达式为

$$Y_n^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2n+1)(n-|m|)!}{4\pi(n+|m|)!}} P_n^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \quad (8)$$

式中, $i = \sqrt{-1}$, $P_n^m(x)$ 为伴随勒让德多项式, 其表达式为

$$P_n^m(x) = (-1)^{|m|} \cdot (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \cdot \frac{d^{|m|} P_n(x)}{dx^{|m|}}, \quad (9)$$

其中, $P_n(x)$ 为 n 阶勒让德多项式, 即

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n [(x^2-1)^n]}{dx^n}. \quad (10)$$

基于颗粒表面离散点的坐标, 并利用最小二乘法可以求解出球谐系数, 求解出球谐系数后, 可根据式(7)计算得到任意 (θ, φ) 组合对应的极径 r , 从而重构出三维星形颗粒的连续表面形态.

3.4 三维非星形颗粒几何形态重构

对于三维非星形颗粒, 真实物理空间的极角和方位角组合 (θ, φ) 与极径 r 不存在一一对应关系, 因此需采用类似于二维非星形颗粒的方法对颗粒表面点的 x, y, z 坐标分别进行球谐函数展开^[34], 其具体步骤如下.

首先进行球面参数化^[67], 将颗粒表面的每个点唯一映射到单位球面上的一个点(如图10(a)中的A点映射到图10(b)中的A'点), 于是单位球面上每一个点的极角和方位角组合 (θ, φ) 都可唯一标识颗粒表面上的一个点, 称为该点的球面参数.

球面参数化之后, 可将颗粒表面点的坐标 $\mathbf{X}=(x, y, z)$ 表示为球面参数 (θ, φ) 的函数, 即

$$\mathbf{X}(\theta, \varphi) = (x(\theta, \varphi), y(\theta, \varphi), z(\theta, \varphi)). \quad (11)$$

再将三个坐标分量分别进行球谐函数展开, 即

$$x(\theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n c_{xn}^m Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (12a)$$

图10 (网络版彩图)三维非星形颗粒表面点坐标的球面参数化^[34]. (a) 物理空间; (b) 参数空间

Figure 10 (Color online) Illustration of spherical parameterization between the object and the parameter spaces^[34]. (a) Object space; (b) parameter space.

$$y(\theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n c_{yn}^m Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (12b)$$

$$z(\theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n c_{zn}^m Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (12c)$$

式中, c_{xn}^m , c_{yn}^m 和 c_{zn}^m 分别为 x 坐标、 y 坐标和 z 坐标对应的球谐系数. 球谐基函数可采用式(8)中的复数形式, 也可采用如下的实数形式:

当 $m \geq 0$ 时,

$$Y_n^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} P_n^m(\cos\theta) \cos(m\varphi); \quad (13a)$$

当 $m < 0$ 时,

$$Y_n^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2n+1)(n-|m|)!}{4\pi(n+|m|)!}} P_n^{|m|}(\cos\theta) \sin(|m|\varphi). \quad (13b)$$

当采用实数形式的球谐函数时, 球谐系数均为实数. 由于颗粒表面点的数量通常远大于球谐系数的数量, 同样可通过最小二乘法由离散点的坐标求解出球谐系数. 求解出球谐系数后, 对于任意的球面参数组合 (θ, φ) , 将其代入式(12)便可求得所对应颗粒轮廓点在笛卡儿坐标系下的坐标, 从而重构出三维非球形颗粒的几何形态.

利用傅里叶级数和球谐函数对颗粒几何形态进行重构的过程中, 傅里叶总阶数和球谐函数总阶数的取值对重构的精度有决定性的影响^[28,34], 因根据需要合理取值.

4 非规则颗粒几何形态评价

在进行非规则颗粒二维轮廓或三维表面重构后, 可对颗粒的几何形态进行量化评价. 几何形态评价是进一步研究几何形态对颗粒材料物理力学行为影响规律的基础. 本节介绍非规则颗粒主要形态指标的定义和计算方法.

4.1 主尺度

主尺度是确定不规则颗粒尺寸和其他形态指标的重要参数. 二维颗粒的主尺度包括长轴 l_1^{2D} 和短轴 l_2^{2D} , 三维颗粒的主尺度包括长轴 l_1^{3D} 、次长轴 l_2^{3D} 和短轴 l_3^{3D} . 可通过Minkowski张量法^[68]或主成分分析法(principal component analysis, PCA)确定颗粒主轴方

向, 然后旋转颗粒以使其主轴与笛卡儿坐标轴对齐, 再计算颗粒沿各坐标轴方向的长度并进行排序得到主尺度.

4.2 细长度与扁平度

细长度与扁平度是对颗粒整体形状的一种度量, 二维颗粒的细长度 EI^{2D} 定义为颗粒短轴与长轴的比值, 即

$$EI^{2D} = \frac{l_2^{2D}}{l_1^{2D}}. \quad (14)$$

三维颗粒的细长度 EI^{3D} 定义为颗粒次长轴与长轴的比值, 即

$$EI^{3D} = \frac{l_2^{3D}}{l_1^{3D}}. \quad (15)$$

扁平度 FI^{3D} 定义为短轴与次长轴的比值, 即

$$FI^{3D} = \frac{l_3^{3D}}{l_2^{3D}}. \quad (16)$$

根据上述定义, 细长度/扁平度的取值范围为0~1, 随着细长度/扁平度值的增大, 颗粒形状由较细长/扁平变为几乎等径.

4.3 圆形度与球形度

对于二维颗粒, 圆形度 S^{2D} 度量颗粒几何轮廓与理想圆的接近程度, 其定义为^[12]

$$S^{2D} = \frac{2\sqrt{\pi A}}{P}, \quad (17)$$

式中, A 和 P 分别为颗粒面积和颗粒周长, 可通过计算几何方法由颗粒轮廓重构函数计算得到^[28]. 根据上述定义, 圆形度的取值范围为0~1, 圆形度的值越小, 表明颗粒轮廓与圆相差越大, 反之则越接近于圆. 特别地, 当颗粒轮廓为圆形时, 圆形度 $S^{2D}=1$.

对于三维颗粒, 球形度度量颗粒三维形貌与理想球体的接近程度, 其定义为^[13]

$$S^{3D} = \frac{\sqrt[3]{36\pi V_p^2}}{S_p}, \quad (18)$$

式中, V_p 和 S_p 分别为颗粒体积与表面积, 可通过计算几何方法由颗粒表面重构函数计算得到^[34]. 根据上述定义, 球形度的取值范围为0~1, 球形度的值越小, 表明颗粒三维形貌与球体相差越大, 反之则越接近于球体.

特别地, 当颗粒为球形颗粒时, 球形度 $S^{3D}=1$.

4.4 凹凸度

凹凸度主要用于度量颗粒与凸包的相似程度, 是影响颗粒之间接触点个数的特征. 对于二维颗粒, 其凹凸度 C_x^{2D} 通常定义为颗粒面积与包围颗粒的凸包面积的比值, 即

$$C_x^{2D} = \frac{A}{A_c}, \quad (19)$$

式中, A_c 为包围颗粒的凸包面积.

对于三维颗粒, 其凹凸度 C_x^{3D} 通常定义为颗粒体积与包围该颗粒的凸包体积之比^[69], 即

$$C_x^{3D} = \frac{V_p}{V_{CH}}, \quad (20)$$

式中, V_{CH} 为包围颗粒的凸包体积.

颗粒的凸包面积和凸包体积可以通过Matlab中的内置函数“convhull”求得.

4.5 磨圆度

磨圆度是评价颗粒棱角尖锐或圆滑程度的指标. Wadell^[13]最早提出颗粒磨圆度的定义, 即颗粒棱角区域的平均曲率半径和最大内切圆半径之比. 二维颗粒棱角区域的常用识别准则为: 若颗粒轮廓上任意点的局部曲率半径小于最大内切圆半径, 则该点属于棱角区域. 可通过计算几何的方法对颗粒棱角区域进行识别, 对棱角区域内所有棱角点的局部内切圆所对应的拟合优度进行排序, 最小拟合优度所对应的内切圆即为该棱角区域的最优内切圆, 具体可参考文献^[70].

结合颗粒的最大内切圆与棱角区域局部最优内切圆, 可定义二维颗粒磨圆度指标 Rd^{2D} , 即

$$Rd^{2D} = \sum_{i=1}^{N_C} r_i / (N_C \cdot R_{\text{insc}}), \quad (21)$$

式中, r_i 为第 i 个棱角区域所对应的局部最优内切圆半径, N_C 为棱角区域的总个数, R_{insc} 为颗粒轮廓最大内切圆的半径.

将二维棱角区域判定与局部最优内切圆的几何分析过程拓展到三维, 可对真实三维颗粒的磨圆度指标进行量化, 三维颗粒棱角区域的识别准则为: 若颗粒表面上任意点的曲率半径小于颗粒的最大内切球半

径, 则该点属于棱角区域. 颗粒表面点的局部曲率包括最大主曲率、最小主曲率、平均曲率和高斯曲率4种. 其中, 采用最大主曲率进行棱角区域的判定最为合理, 与二维颗粒类似, 每一个棱角区域存在一个局部最优内切球, 一般采用临界重叠系数为0.7时所接受的内切球作为棱角区域的局部最优内切球, 具体求解过程可参考文献^[71,72].

结合颗粒的最大内切球与棱角区域局部最优内切球, 可定义三维颗粒磨圆度指标 Rd^{3D} , 即

$$Rd^{3D} = \sum_{i=1}^{N_C} r_i / (N_C \cdot R_{\text{insc}}), \quad (22)$$

式中, r_i 表示第 i 个局部内切球的半径, N_C 表示棱角区域的总个数, R_{insc} 表示最大内切球的半径.

4.6 棱角度

与磨圆度类似, 棱角度也是用来评价颗粒棱角尖锐或圆滑程度的指标. 目前, 棱角度指标相关的定义较多, 主要包括: 基于极径的棱角度指标^[73]、基于梯度的棱角度指标^[74-75]、基于傅里叶级数的棱角度指标^[76]、基于高斯曲率的棱角度指标^[77]等. 这里主要介绍Su等人^[78,79]提出的颗粒二维棱角度和三维棱角度的定义和计算方法.

对于二维颗粒, 先采用第3.2节的方法对颗粒轮廓进行重构, 得到轮廓点 x, y 坐标的重构方程, 然后计算颗粒各轮廓点的梯度方向角为

$$\theta = \arctan \left[\frac{y'(\varphi')}{x'(\varphi')} \right], \quad (23)$$

式中, $x'(\varphi')$ 和 $y'(\varphi')$ 分别为 $x(\varphi')$ 和 $y(\varphi')$ 的导数. 可以看出, 梯度方向角只是极角的函数, 可定义如下棱角度指数:

$$AI_g^{2D} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left| \frac{d\theta}{d\varphi'} \right| d\varphi' - 1, \quad (24)$$

上式也可以写成如下数值积分的形式:

$$AI_g^{2D} = \frac{1}{2\pi} \sum_{i=0}^{w-1} \left| \theta_{(i+1)\Delta\varphi'} - \theta_{i\Delta\varphi'} \right| - 1, \quad (25)$$

式中, $\Delta\varphi'=2\pi/w$ 为极角步长, w 为采样点个数. 如果颗粒轮廓是一个圆形, $d\theta$ 和 $d\varphi'$ 永远相等, 根据式(24)或(25)可以求得 $AI_g^{2D}=0$. 对于椭圆颗粒, 计算结果也表明

其棱角度指数 $AI_g^{2D}=0$.

对于三维颗粒, 可利用图11所示的三角形面片进行基于梯度的局部棱角度评估, 其定义为

$$AI_{g,i}^{3D} = \sum_{j=1}^3 \theta_{ij}, \quad (26)$$

式中, $AI_{g,i}^{3D}$ 为第 i 个网格处的局部棱角度, θ_{ij} 为第 i 个网格与其第 j 个相邻网格的法向向量之间的夹角(以弧度为单位).

基于局部棱角度, 可计算颗粒的总体棱角度如下:

$$AI_g^{3D} = \frac{\sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^3 \theta_{ij}}{\sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^3 \theta'_{ij}} - 1, \quad (27)$$

式中, p 为网格的总个数; θ'_{ij} 为在等价椭球(可采用基于坐标的一阶球谐展开得到)下所计算得出的夹角. 根据上述定义, 球形颗粒和椭球形颗粒的 AI_g^{3D} 均为0.

4.7 粗糙度

粗糙度是指颗粒轮廓上具有的较小间距与微小峰谷的不平度. 对于二维颗粒而言, 确定基准轮廓是进行粗糙度评价的基础和关键. 通常认为傅里叶级数中阶数 $n > 25$ 的部分影响颗粒的表面纹理^[80,81], 因此可采用总阶数 $N = 25$ 的傅里叶级数来构建颗粒的基准轮廓, 图12为样例颗粒真实轮廓和基准轮廓的对比.

通过将真实轮廓与基准轮廓进行对比来评估二维轮廓的粗糙度. 粗糙度幅度参数可用于测量表面高度偏差特征, 是表征形貌最重要的参数^[82], 常用的幅度参数包括算术平均粗糙度 R_a 和均方根粗糙度 R_q , 计算公式分别为

$$R_a = \frac{1}{L} \int_0^L r(l) dl = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^m r_i l_i, \quad (28)$$

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{L} \int_0^L [r(l)]^2 dl} = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^m r_i^2 l_i}, \quad (29)$$

式中, r 为真实轮廓与基准轮廓的偏差距离, l 和 L 分别为基准轮廓的弧长和周长.

此外, 可以定义相对粗糙度 $\bar{R}_a$ 和 $\bar{R}_q$, 即用颗粒的等效半径 r_{eq} 对粗糙度进行无量纲化, 其计算公式为

图 11 (网络版彩图) 三维棱角度定义示意图^[79]

Figure 11 (Color online) Schematic illustration for definition of radius-based angularity index [79].

图 12 (网络版彩图) 二维颗粒轮廓局部偏差距离图示^[80]

Figure 12 (Color online) Illustration of local deviation of the contour of 2D particle [80].

$$\bar{R}_a = \frac{R_a}{r_{eq}} = \sqrt{\frac{\pi}{A}} R_a, \quad (30)$$

$$\bar{R}_q = \frac{R_q}{r_{eq}} = \sqrt{\frac{\pi}{A}} R_q, \quad (31)$$

式中, A 为颗粒的面积.

与二维粗糙度的计算类似, 确定基准面是进行三维非规则颗粒粗糙度评价的基础. 可利用球谐基总阶数 $N=25$ 对颗粒表面进行重构, 得到平滑的基准面. 局部粗糙度可以通过真实表面上的点与基准表面的偏差来评价.

为了量化局部偏差, 首先将颗粒表面进行三角网格化. 然后, 对于真实表面上的每个点, 都能找到基准表面上与其最接近的网格节点, 例如图13中的I与A, II与B和III与C. 利用真实表面点和基准表面点之间形成

图 13 (网络版彩图)三维颗粒表面局部偏差距离图示^[80]
Figure 13 (Color online) Illustration of local deviation of the contour of 3D particle [80].

的五面体可量化局部偏差. 如图13所示, 首先确定真实表面上的三角形网格的中心, 即三角形ABC上的点O; 然后确定点O与基准表面上的三角形之间的距离 r_i , r_i 即为局部偏差.

基于局部偏差, 可定义三维算术平均粗糙度 S_a 和三维均方根粗糙度 S_q 如下:

$$S_a = \frac{1}{A} \int_0^A r(a) da = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^m r_i a_i, \quad (32)$$

$$S_q = \sqrt{\frac{1}{A} \int_0^A [r(a)]^2 da} = \sqrt{\frac{1}{A} \sum_{i=1}^m r_i^2 a_i}, \quad (33)$$

式中, r_i 为局部偏差, a 为三角网格面积, A 为基准表面的总面积. 同样, 可以定义相对粗糙度 $\bar{S}_a$ 和 $\bar{S}_q$, 即用颗粒的等效半径 r_{eq} 对粗糙度进行无量纲化, 其计算公式为

$$\bar{S}_a = \frac{S_a}{r_{eq}} = \sqrt[3]{\frac{4\pi}{3V}} S_a, \quad (34)$$

$$\bar{S}_q = \frac{S_q}{r_{eq}} = \sqrt[3]{\frac{4\pi}{3V}} S_q, \quad (35)$$

式中, V 为颗粒的体积.

研究表明, 同一种颗粒不同的指标之间(如棱角度

与圆形度)存在一定的相关性, 二维指标和三维指标之间(如二维主尺度和三维主尺度)也存在一定的相关性, 具体可参见文献[83].

5 非规则颗粒随机生成

在获取一定数量非规则颗粒的几何形态之后, 如何通过数学方法生成与真实颗粒具有相同形态特征的虚拟颗粒, 是建立非规则颗粒离散元模型并进行模拟研究的关键一步.

5.1 星形颗粒随机生成

本节主要介绍由Wang等人^[39,40]提出的基于逆蒙特卡罗法的二维星形与三维星形颗粒随机生成方法.

5.1.1 二维星形颗粒

对于二维星形颗粒, 可根据式(2)采用预设的正弦波幅值 D_n 与随机的相位角 δ_n 生成不规则颗粒轮廓. 相关研究^[84,85]表明, 幅值 D_n 可以分为以下5组: (1) D_0 ; (2) D_1 ; (3) D_2 ; (4) $D_3 \rightarrow D_{15}$; (5) $D_{16} \rightarrow D_n$, 其中, $D_0=1$, $D_1=0$; D_4 至 D_{15} 由 D_3 决定, D_{17} 至 D_n 由 D_{16} 决定, 即

$$D_n = 2^{-2\log_2(n/3) + \log_2(D_3)} \quad (3 \leq n < 16), \quad (36)$$

$$D_n = 2^{-2\log_2(n/16) + \log_2(D_{16})} \quad (16 < n \leq N). \quad (37)$$

可见, 为控制所生成颗粒的形态特征, 需先研究傅里叶系数 D_2 , D_3 和 D_{16} 与不同形态指标的相关性. 通过大量实例的回归分析, 得到生成的虚拟颗粒形态指标 El^{gen} , Rd^{gen} , $\bar{R}_a^{gen}$ 与傅里叶幅值系数 D_2 , D_3 和 D_{16} 满足如下统计关系:

$$D_2 = -0.48(El^{gen})^2 + 0.17(El^{gen}) + 0.33, \quad (38)$$

$$D_3 = 0.14(Rd^{gen})^2 - 0.40(Rd^{gen}) + 0.26, \quad (39)$$

$$D_{16} = 0.8634(\bar{R}_a^{gen}) + 0.0002. \quad (40)$$

由上式可知, D_2 决定所生成颗粒的细长度特征; D_3 决定所生成颗粒的磨圆度特征; D_{16} 决定所生成颗粒的轮廓粗糙度. 根据回归公式, 可以在一定范围内控制所生成颗粒的形态特性, 但结果存在一定的离散性.

为了减小生成颗粒形态与目标形态的误差, 可采用逆蒙特卡罗法来控制生成颗粒的形态. 首先定义平均相对误差 e_{ave}^* 作为量化生成颗粒形态与目标形态差

别的指标(上角标*为形态指标的缩写符号), 以细长度 EI 为例, 其平均相对误差 e_{ave}^{EI} 定义为

$$e_{\text{ave}}^{EI} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} e_i^{EI}, \quad (41)$$

$$e_i^{EI} = \frac{|EI_i^{\text{gen}} - EI_i^{\text{tar}}|}{EI_i^{\text{tar}}}, \quad (42)$$

式中, e_i^{EI} 为第 i 个生成颗粒的细长度相对误差, EI_i^{gen} 为第 i 个生成颗粒的细长度, EI_i^{tar} 为第 i 个颗粒细长度的目标值, N_p 为颗粒的总个数.

基于误差允许值 e^{tar} , 采用如下步骤进行生成颗粒形态的调整, 使得生成颗粒的形态与目标形态的误差逐渐减小:

(1) 定义一系列目标形态指标 EL^{tar} , Rd^{tar} 和 R_a^{tar} , 然后代入式(38)~(40)得到 D_2 , D_3 和 D_8 , 其他傅里叶幅值系数根据式(36)与(37)确定, 相位角在 $[-\pi, \pi]$ 范围内随机取值;

(2) 对生成的虚拟颗粒形态指标进行分析计算, 得到 EL^{gen} , Rd^{gen} 和 R_a^{gen} . 将 EL^{gen} , Rd^{gen} 和 R_a^{gen} 分别与 EL^{tar} , Rd^{tar} 和 R_a^{tar} 进行对比, 计算每个颗粒形态指标的相对误差 e_i^{EI} , e_i^{Rd} 和 $e_i^{R_a}$ 与每个形态指标的平均相对误差 e_{ave}^{EI} , e_{ave}^{Rd} 和 $e_{\text{ave}}^{R_a}$. 若 e_i^{EI} , e_i^{Rd} 和 $e_i^{R_a}$ 大于误差允许值 e^{tar} , 则将所有相对误差 e_i^{EI} , e_i^{Rd} 和 $e_i^{R_a}$ 大于 e^{tar} 的颗粒删去, 并重新生成一组颗粒;

(3) 重复步骤(2), 直到 e_{ave}^{EI} , e_{ave}^{Rd} 和 $e_{\text{ave}}^{R_a}$ 小于限制值 e^{tar} .

5.1.2 三维星形颗粒

三维星形颗粒的表面形态可用式(7)的极径函数表示, 其第 n 阶球谐系数的总幅值 A_n 为

$$A_n = \sqrt{\sum_{m=-n}^n (a_n^m)^2}. \quad (43)$$

在给定第 n 阶球谐系数总幅值 A_n 的条件下, 基于以下步骤来确定 n 阶 m 次的系数 a_n^m : (1) 对给定的任意阶数 n , 其对应的球谐系数矩阵为 $[a_n^{-n}, \dots, a_n^{-m}, \dots, a_n^0, \dots, a_n^m, \dots, a_n^n]$; (2) 生成一个与步骤(1)中系数矩阵对应的含 $(2n+1)$ 个随机数的新矩阵 $[a_n^{-n*}, \dots, a_n^{-m*}, \dots, a_n^{0*}, \dots, a_n^{m*}, \dots, a_n^{n*}]$. 其中, $a_n^{m*} \in [-1, 1]$ 的随机数; (3) 根据式(43)计算所生成的新矩阵的幅值 A_n^* ; (4) 计算缩放

系数 $\kappa_n = A_n / A_n^*$; (5) 通过 $a_n^m = \kappa_n a_n^{m*}$ 计算满足幅值为 A_n 的各项球谐系数 a_n^m .

为通过控制球谐系数幅值 A_n 生成形态可控的三维不规则颗粒^[31], 将球谐系数幅值分为以下5组: (1) A_0 ; (2) A_1 ; (3) A_2 ; (4) $A_3 \rightarrow A_{15}$; (5) $A_{16} \rightarrow A_N$, 其中, $A_0=1.0$, $A_1=0$. A_4 到 A_{15} 由 A_3 决定, A_{17} 到 A_n 由 A_{16} 决定, 即

$$A_2 = \sqrt{(a_2^{-2})^2 + (a_2^{-1})^2 + (a_2^0)^2 + (a_2^1)^2 + (a_2^2)^2}, \quad (44)$$

$$A_n = A_3 \left(\frac{n}{3} \right)^\alpha, \quad 3 \leq n \leq 15, \quad (45)$$

$$A_n = A_{16} \left(\frac{n}{16} \right)^\beta, \quad 16 \leq n \leq N, \quad (46)$$

式中, α, β 分别为当 $3 \leq n \leq 15$ 与 $16 \leq n \leq N$ 时, A_n 与 n 在双对数坐标系下的斜率, 根据文献[38], 可取 $\alpha=\beta=-1.5$. 为了确定 A_2 对应的球谐系数与所生成颗粒形态特征的关系, 生成了一系列不同细长度 EL_0 与扁平度 FI_0 的椭球, 结果表明椭球颗粒的细长度 EL_0 和扁平度 FI_0 仅与系数 a_2^0 和 a_2^2 相关, 并满足如下非线性关系:

$$\begin{aligned} a_2^0 = & 0.38EI_0^3 + 0.43EI_0^2FI_0 + 0.46EI_0FI_0^2 \\ & + 0.65FI_0^3 - 1.55EI_0^2 - 1.69EI_0FI_0 - 2.41FI_0^2 \\ & + 0.49EI_0 + 3.53FI_0 - 2.29, \end{aligned} \quad (47)$$

$$\begin{aligned} a_2^2 = & -0.80EI_0^3 - 0.38EI_0^2FI_0 - 0.35EI_0FI_0^2 \\ & - 0.12k_4FI_0^3 + 2.80EI_0^2 + 1.36EI_0FI_0 + 0.68FI_0^2 \\ & - 3.86EI_0 - 1.28FI_0 + 1.94. \end{aligned} \quad (48)$$

通过回归分析可得到生成的虚拟颗粒形态指标 EL^{gen} , FI^{gen} , Rd^{gen} , S_a^{gen} 与 EL_0 , FI_0 , A_3 , A_{16} 满足如下统计关系:

$$EI_0 = 1.06EI^{\text{gen}} - 0.07, \quad (49)$$

$$FI_0 = 1.04FI^{\text{gen}} - 0.05, \quad (50)$$

$$\begin{aligned} A_3 = & -0.39Rd^{\text{gen}^3} + 1.01Rd^{\text{gen}^2} \\ & - 0.91Rd^{\text{gen}} + 0.28, \end{aligned} \quad (51)$$

$$A_{16} = 12.03S_a^{\text{gen}^2} - 0.67S_a^{\text{gen}}. \quad (52)$$

由上式可知, EL_0 决定所生成颗粒的细长度特征; FI_0 决定所生成颗粒的扁平度特征; A_3 决定所生成颗粒的磨圆度特征; A_{16} 决定所生成颗粒的粗糙度. 与二维星形颗粒类似, 同样可以采用逆蒙特卡罗算法对所生成的三维颗粒形态进行精细控制, 其基本步骤如下.

(1) 定义一系列目标三维形态指标 El^{tar} , Fl^{tar} , Rd^{tar} 和 S_a^{tar} , 代入式(49)~(52)得到 El_0 , Fl_0 , A_3 和 A_{16} . 然后将 El_0 和 Fl_0 代入式(47)和(48)得到对应的球谐系数 a_2^0 和 a_2^2 . 将 A_3 和 A_{16} 代入式(45)和(46)得到 $A_5 \sim A_{15}$ 与 $A_{17} \sim A_N$, 并确定所对应的球谐系数 a_n^m . 随后将所求得的球谐系数 a_n^m 代入式(7), 即可生成相应的虚拟颗粒.

(2) 对生成的虚拟颗粒形态指标进行分析计算, 得到 El^{gen} , Fl^{gen} , Rd^{gen} 和 S_a^{gen} . 然后基于式(42)计算每个颗粒的形态指标相对误差 e_i^{El} , e_i^{Fl} , e_i^{Rd} 和 $e_i^{S_a}$, 并基于式(41)计算每个形态指标的平均相对误差 e_{ave}^{El} , e_{ave}^{Fl} , e_{ave}^{Rd} 和 $e_{ave}^{S_a}$. 若 e_{ave}^{El} , e_{ave}^{Fl} , e_{ave}^{Rd} 和 $e_{ave}^{S_a}$ 大于目标限制值 e^{tar} , 则将所有相对误差 e_i^{El} , e_i^{Fl} , e_i^{Rd} 和 $e_i^{S_a}$ 大于 e^{tar} 的颗粒删去, 并重新生成颗粒.

(3) 重复步骤(2), 直到 e_{ave}^{El} , e_{ave}^{Fl} , e_{ave}^{Rd} 和 $e_{ave}^{S_a}$ 小于限制值 e^{tar} .

5.2 非星形颗粒随机生成

本节主要介绍由Su等人^[28,34]提出的适用于二维非星形和三维非星形颗粒的随机生成方法.

5.2.1 二维非星形颗粒

对于二维非星形颗粒, 根据式(5), 其轮廓上每个离散点的水平坐标 x 和垂直坐标 y 可用傅里叶级数表示为映射圆上极角 φ' 的函数, 当利用一阶 ($N=1$) 傅里叶级数生成颗粒时, 有

$$x(\varphi') = a_{x1} \cos \varphi' + b_{x1} \sin \varphi', \quad (53a)$$

$$y(\varphi') = a_{y1} \cos \varphi' + b_{y1} \sin \varphi'. \quad (53b)$$

由于一阶傅里叶级数生成的颗粒轮廓为一个椭圆^[78]. 假设椭圆的半长轴和半短轴分别为 a_1 和 b_1 , 则轮廓上任意点的坐标应满足

$$\left(\frac{x(\varphi')}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{y(\varphi')}{b_1}\right)^2 = 1. \quad (54)$$

将 $\varphi'=0^\circ$ 和 $\varphi'=90^\circ$ 分别代入式(53)和(54)得

$$\left(\frac{a_{x1}}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{a_{y1}}{b_1}\right)^2 = 1, \quad (55a)$$

$$\left(\frac{b_{x1}}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{b_{y1}}{b_1}\right)^2 = 1. \quad (55b)$$

另一方面, 式(53a)和(53b)的最大值分别为 a_1 和 b_1 , 即

$$a_1 = \sqrt{(a_{x1})^2 + (b_{x1})^2}, \quad (56a)$$

$$b_1 = \sqrt{(a_{y1})^2 + (b_{y1})^2}. \quad (56b)$$

在式(55a), (55b), (56a)和(56b)中只有三个方程是独立的, 因此一阶傅里叶系数 a_{x1} , b_{x1} , a_{y1} , b_{y1} 以及 a_1 , b_1 之间通过三个独立的方程相互关联. 因此在颗粒生成过程中, 只能将其中3个(如 a_1 , b_1 , a_{x1})视为随机变量, 系数生成后再求解另外3个(如 b_{x1} , a_{y1} , b_{y1}). 此外, 通常可令 $a_{x0}=a_{y0}=0$ (将颗粒中心移至坐标原点), 因此, 在进行颗粒傅里叶系数特征分析时, 所集成的系数矩阵 $\mathbf{c}_k$ 包含49列, 即

$$\mathbf{c}_k = [a_1^k \ b_1^k \ a_{x1}^k \ \cdots \ a_{x25}^k \ b_{x2}^k \ \cdots \ b_{x25}^k \ a_{y2}^k \ \cdots \ a_{y25}^k \ b_{y2}^k \ \cdots \ b_{y25}^k], \quad (57)$$

式中, 上标 k 代表第 k 个颗粒.

由于真实颗粒的系数分布并不服从高斯分布, 在对系数矩阵 $\mathbf{c}$ 进行主成分分析之前需对其进行标准化处理以得到标准化系数矩阵 $\hat{\mathbf{c}}$, 该标准化过程主要通过在实际系数的累积概率密度分布和正态分布函数的累积概率密度分布之间的映射实现, 这一过程称为系数矩阵的标准化.

得到标准化系数矩阵 $\hat{\mathbf{c}}$ 后, 对其进行主成分分析, 求出特征向量 $\mathbf{p}_i$ ($i=1, 2, 3, \dots, l$, 其中 l 是主成分个数) 和特征值 λ_i ^[31]. 基于 $\mathbf{p}_i$ 和 λ_i , 可按式(58)生成随机标准化系数矩阵:

$$\mathbf{c}_i = \sum_{j=1}^l \alpha_{ij} \sqrt{\lambda_j} \mathbf{p}_j, \quad (58)$$

式中, α_{ij} 为满足标准正态分布的随机实数.

最后, 根据累积概率密度的等价性, 将随机标准化系数 $\mathbf{c}$ 转换为傅里叶系数随机向量, 再根据式(55)和(56)求解出另外3个系数(如 b_{x1} , a_{y1} 和 b_{y1}).

5.2.2 三维非星形颗粒

对于三维非星形颗粒, 根据式(12), 其表面上每个离散点的 x , y 和 z 坐标均可表示为球面参数 (θ, φ) 的函

数, 当利用一阶($N=1$)球谐函数展开时, 有

$$x(\theta, \varphi) = \sum_{m=-1}^1 c_{x1}^m Y_1^m(\theta, \varphi), \quad (59a)$$

$$y(\theta, \varphi) = \sum_{m=-1}^1 c_{y1}^m Y_1^m(\theta, \varphi), \quad (59b)$$

$$z(\theta, \varphi) = \sum_{m=-1}^1 c_{z1}^m Y_1^m(\theta, \varphi), \quad (59c)$$

其中,

$$Y_1^{-1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta \sin\varphi, \quad (60a)$$

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos\theta, \quad (60b)$$

$$Y_1^1(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin\theta \cos\varphi. \quad (60c)$$

此时所重构的颗粒为一个椭球体, 假设椭球的长轴、次长轴和短轴长度分别为 a_1 , b_1 和 c_1 , 则椭球曲面上任意点的坐标都应满足

$$\left(\frac{x(\theta, \varphi)}{a_1/2}\right)^2 + \left(\frac{y(\theta, \varphi)}{b_1/2}\right)^2 + \left(\frac{z(\theta, \varphi)}{c_1/2}\right)^2 = 1. \quad (61)$$

将 (θ, φ) 为 $(90^\circ, 90^\circ)$, $(0^\circ, 0^\circ)$ 和 $(90^\circ, 0^\circ)$ 对应的三个点代入式(59)和(61)中, 有

$$\left(\frac{c_{x1}^{-1}}{a_1/2}\right)^2 + \left(\frac{c_{y1}^{-1}}{b_1/2}\right)^2 + \left(\frac{c_{z1}^{-1}}{c_1/2}\right)^2 = \frac{8\pi}{3}, \quad (62a)$$

$$\left(\frac{c_{x1}^0}{a_1/2}\right)^2 + \left(\frac{c_{y1}^0}{b_1/2}\right)^2 + \left(\frac{c_{z1}^0}{c_1/2}\right)^2 = \frac{4\pi}{3}, \quad (62b)$$

$$\left(\frac{c_{x1}^1}{a_1/2}\right)^2 + \left(\frac{c_{y1}^1}{b_1/2}\right)^2 + \left(\frac{c_{z1}^1}{c_1/2}\right)^2 = \frac{8\pi}{3}. \quad (62c)$$

另一方面, 式(59a), (59b)和(59c)的最大值对应椭球体的半长轴, 可推导得到

$$a_1 = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sqrt{(c_{x1}^{-1})^2 + 2(c_{x1}^0)^2 + (c_{x1}^1)^2}, \quad (63a)$$

$$b_1 = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sqrt{(c_{y1}^{-1})^2 + 2(c_{y1}^0)^2 + (c_{y1}^1)^2}, \quad (63b)$$

$$c_1 = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sqrt{(c_{z1}^{-1})^2 + 2(c_{z1}^0)^2 + (c_{z1}^1)^2}. \quad (63c)$$

需要注意到, 式(62)和(63)中的6个方程只有5个是相互独立的, 也就是说, 球谐系数 c_{x1}^m , c_{y1}^m , c_{z1}^m ($m=-1, 0$,

1)和 a_1 , b_1 , c_1 之间通过5个方程关联. 因此, 可将 a_1 , b_1 和 c_1 引入到系数矩阵中, 而将5个系数(如 c_{x1}^0 , c_{y1}^{-1} , c_{y1}^1 , c_{z1}^{-1} 和 c_{z1}^1)由式(62)和(63)中的5个方程求出, 并不参与统计分析和随机生成. 由于可将颗粒中心平移到坐标系的原点, 从而使 $c_{x0}^0=c_{y0}^0=c_{z0}^0=0$. 所以球谐系数矩阵 $\mathbf{c}_k$ 的每一行包含 $3(N+1)^2-5$ 个分量, 如 $N=15$ 时有763列, 即:

$$\mathbf{c}_k = \begin{bmatrix} a_{1,k} & b_{1,k} & c_{1,k} & c_{x1,k}^{-1} & c_{x1,k}^1 & c_{x2,k}^{-2} \cdots \\ c_{x15,k}^{15} & c_{y1,k}^0 & c_{y2,k}^{-2} \cdots c_{y15,k}^{15} & c_{z1,k}^0 & c_{z2,k}^{-2} \cdots c_{z15,k}^{15} \end{bmatrix}, \quad (64)$$

式中, k 表示第 k 个颗粒.

由于真实颗粒的球谐系数大多并不符合高斯分布, 故在对系数矩阵 $\mathbf{c}$ 进行主成分分析之前需对其进行标准化处理以得到标准化系数矩阵 $\hat{\mathbf{c}}$, 与二维非星形颗粒类似, 该标准化过程主要通过在实际系数的累积概率密度分布和正态分布函数的累积概率密度分布之间的映射实现. 接下来对矩阵 $\hat{\mathbf{c}}$ 进行主成分分析, 求出特征向量 $\mathbf{p}_i$ ($i=1, 2, 3, \dots, l$, 其中 l 是主成分个数)和特征值 λ_i . 基于 $\mathbf{p}_i$ 和 λ_i 按式(58)生成随机标准化系数矩阵 $\mathbf{c}_i$. 最后, 将生成的标准化系数转换为球谐系数, 再通过式(62)和(63)求解出另外5个系数(如 c_{x1}^0 , c_{y1}^{-1} , c_{y1}^1 , c_{z1}^{-1} 和 c_{z1}^1).

6 非规则颗粒离散元模拟方法

离散元方法最初由Cundall^[86]于1971年基于分子动力学原理提出, 并应用于分析岩石力学问题, 随后Cundall和Strack^[87]在1979年提出了适用于土力学的离散元方法. 离散元方法基本思想是将所分析的物体看作由一定数量独立颗粒组成的颗粒集合体, 利用牛顿第二定律和接触本构理论分析计算颗粒受到的力和位移, 并记录对应的位置信息, 最后得到研究对象的运动规律. 离散单元法是一种显式求解的数值方法, 其在每个时步内的计算循环如图14所示.

与规则颗粒的离散元模拟相比, 非规则颗粒的离散元模拟在颗粒几何状态表示、接触判断与接触力计算等方面存在显著差异. 本节介绍并总结由Su和Wang^[45]提出的适用于二维星形颗粒的FS-DEM(fourier series-based DEM), Wang等人^[46,47]提出的适用于二维非星形颗粒的Arc-DEM(arcs-based DEM)、适用于三维非星形颗粒的SH-DEM(spherical-harmonic-based

图 14 (网络版彩图)离散单元法计算循环

Figure 14 (Color online) Calculation cycle of discrete element method.

DEM)以及Feng^[48]提出的适用于三维非星形颗粒的离散元模拟方法的核心内容。

6.1 颗粒几何状态表示

在离散元模拟中,通常需要建立全局坐标系和局部坐标系,其中全局坐标系用于确定颗粒位置与转角,而颗粒几何形态的表示则在局部坐标系下进行,局部坐标系的原点与颗粒中心重合,且随着颗粒的运动而运动,以保证颗粒几何形态表示方程固定不变。

6.1.1 二维星形颗粒

二维星形颗粒的轮廓可用式(2)表示,即颗粒轮廓点的极径表示为极角的单值函数。若已知颗粒中心点的位置以及颗粒围绕其中心的旋转角度,则颗粒轮廓上任意一点在全局坐标系中的坐标均可通过坐标转换公式计算得到,即二维星形颗粒轮廓上的任何一点在平面空间的位置,可由颗粒的平移、旋转和描述颗粒轮廓形状的傅里叶系数来确定^[45]。

6.1.2 二维非星形颗粒

对于二维非星形颗粒,首先基于混合B样条曲线表示保留棱角信息的颗粒轮廓,然后通过比较颗粒轮廓点曲率半径与最大内切圆半径的大小关系,将颗粒轮廓划分为凸角区域、凹角区域和平坦区域,再利用圆弧曲线(arcs)分别对这三个区域进行拟合。在离散元模拟过程中,每个颗粒轮廓通过折线(圆弧所对应的弦)和圆弧对应的圆心来表示^[46],因此可以通过较小的内存还原颗粒信息。与其他方法相比,arcs-based拟合

方法可以有效地再现真实颗粒的凹凸形状(如图15所示)。

6.1.3 三维星形颗粒

根据式(7),三维星形颗粒表面点的极径可以表示成一系列球谐函数的叠加。若已知颗粒中心点的位置以及颗粒的转动欧拉角,则颗粒轮廓上任意一点在全局坐标系中的坐标均可通过坐标转换公式计算得到,即三维星形颗粒表面上的任意一点在空间的位置,可由颗粒的平移、旋转和描述颗粒三维形貌的球谐系数来确定^[47]。

6.1.4 三维非星形颗粒

对于三维非星形颗粒,可以将其表面进行三角网格化^[48],颗粒表面三角网格可直接通过激光扫描颗粒表面获取,也可通过CT扫描颗粒后再重构得到。重构过程中,网格密度对重构精度有着重要的影响,网格数量越大,颗粒的重构精度越高。

6.2 接触判定

6.2.1 全局接触判定

对于任意形状的颗粒(包括星形/非星形)而言,常用的全局接触判定方法是利用颗粒的外接矩形包围盒(axis-aligned bounding box, AABB, 见图16)进行判定。对于两个相邻二维颗粒(一个标记为从颗粒,另一个标

图 15 (网络版彩图)带尖角真实颗粒轮廓的圆弧拟合^[46]

Figure 15 (Color online) Arcs-based model of the realistic shaped particle with sharp corners^[46].

图 16 (网络版彩图)颗粒的外接包围盒(AABB)示意图^[47]

Figure 16 (Color online) Illustration of the AABB of an example particle [47].

记为主颗粒), 它们的外接矩形包围盒的边界分别为 $(x_{\min}^S, x_{\max}^S, y_{\min}^S, y_{\max}^S)$ 和 $(x_{\min}^M, x_{\max}^M, y_{\min}^M, y_{\max}^M)$, 如果满足

$$(x_{\max}^S - x_{\min}^M)(x_{\min}^S - x_{\max}^M) < 0, \quad (65a)$$

$$(y_{\max}^S - y_{\min}^M)(y_{\min}^S - y_{\max}^M) < 0, \quad (65b)$$

则这两个颗粒存在接触的可能, 需要进行局部接触判定, 否则这两个颗粒不可能接触. 如果是三维颗粒, 还需进一步判断下式是否满足

$$(z_{\max}^S - z_{\min}^M)(z_{\min}^S - z_{\max}^M) < 0. \quad (65c)$$

6.2.2 局部接触判定

(1) 二维星形颗粒

在FS-DEM^[45]中, 对于满足式(65)的两个颗粒, 采用点-线接触算法(node-to-curve algorithm, NCA)进行第二阶段的接触判定. 首先将从颗粒的轮廓离散为若干节点, 如果从颗粒的所有节点都位于两个外接矩形包围盒的重叠区域之外, 则这两个颗粒非接触. 如果从颗粒的一些节点位于重叠区域内, 则需进行第三阶段的接触判定. 为此, 首先确定重叠区域中节点 P_S 在主颗粒局部坐标系下的极角, 即图17中的 θ' ; 然后计算 $\overline{C_M P_S}$ 的距离(用 $L_{C_M P_S}$ 表示); 接着, 计算与节点 P_S 具有相同极角的在主颗粒轮廓上的节点(即 P_M)的极径, 用 $L_{C_M P_M}$ 表示. 如果满足

$$L_{C_M P_S} - L_{C_M P_M} < 0, \quad (66)$$

则节点位于主颗粒内, 从颗粒与主颗粒相交, 如图17所示. 反之, 如果从颗粒的所有节点都不满足式(66), 则两个颗粒不接触.

确定两个颗粒接触后, 可采用半径逐步逼近法(radius approaching algorithm, RAA)进一步求出两个颗粒轮廓的交点. 当主颗粒或从颗粒为凹形不规则颗粒时, 两个颗粒之间可能存在多个接触. 这时, 对于每个接触都计算出两个交点及交点在从颗粒局部坐标中的极角(如图18所示), 则每个接触都可用极角的范围来表示,

图 17 (网络版彩图)基于点-线接触算法的颗粒-颗粒局部接触判定^[45]

Figure 17 (Color online) Contact detected by node-to-curve algorithm [45].

图 18 (网络版彩图)主颗粒与从颗粒之间的多重接触示意图^[45]

Figure 18 (Color online) Multiple contacts between two particles [45].

如接触I表示为 $[\theta'_1, \theta'_2]$, 接触II表示为 $[\theta'_3, \theta'_4]$. 根据接触的极角范围, 可判断分析过程中接触的继承关系.

(2) 二维非星形颗粒

在Arc-DEM^[46]中, 对于存在接触可能的两个颗粒A和B, 首先检查拟合圆弧所属圆之间的相交状态. 如果整圆之间不相交, 则认为两个拟合圆弧为非相交弧对. 反之则认为两个拟合圆弧为潜在相交弧对, 并计算交点, 如图19所示.

然后再检查潜在相交弧对的公共交点个数, 如果任意一条弧上不存在交点, 则两条弧不相交; 如果潜在相交弧对只有一个交点, 则需要搜索它们相邻弧之间的交点. 如果潜在相交弧对存在两个公共交点, 则确定为一对相交弧, 如图20所示.

(3) 三维星形颗粒

在SH-DEM^[47]中, 对于满足式(65)的两个颗粒, 采用点-面接触算法(node-to-surface approach, NSA)进行局部接触判定. 具体步骤如下:

(a) 确定两个颗粒的外接球相交区域, 并以该区域作为潜在的重叠区域, 如图21所示;

(b) 将潜在重叠区域内的主颗粒表面离散为一定数量的三角网格曲面, 三角网格的顶点 Q_i 所对应的矢

图 19 (网络版彩图)重叠弧对示意图^[46]

Figure 19 (Color online) Identification of the overlapping pairs [46].

图 20 (网络版彩图)相交弧对示意图^[46]

Figure 20 (Color online) Illustration of the intersected arc pairs [46].

径用 $\mathbf{r}_i^Q$ 表示, 下标 i 代表第 i 个点;

(c) 首先进行坐标转换, 将 $\mathbf{r}_i^Q$ 转换至从颗粒所在局部坐标系下的矢径 $\mathbf{r}_i^Q$, 此时顶点 Q_i 到从颗粒质心的距离为 $\|\mathbf{r}_i^Q\|$, 用 $r_i^M(\theta_i, \varphi_i)$ 表示. 然后计算与顶点 Q_i 具有相同球坐标 (θ_i, φ_i) 的从颗粒表面上的顶点 P_i 的极径, 用 $r_i^S(\theta_i, \varphi_i)$ 表示. 如果满足

$$r_i^M(\theta_i, \varphi_i) - r_i^S(\theta_i, \varphi_i) < 0, \quad (67)$$

则顶点 Q_i 位于从颗粒内, 从颗粒与主颗粒接触, 如图22所示.

值得注意的是, 在局部接触判定过程中, 可任意选择主颗粒或从颗粒进行离散化, 对接触判定结果不产生影响.

(4) 三维非星形颗粒

对于三维非星形颗粒, 两个颗粒之间的接触可以

图 21 (网络版彩图)确定潜在重叠区域^[47]

Figure 21 (Color online) Identification of potential overlap area [47].

图 22 (网络版彩图)三维星形颗粒接触示意图^[47]

Figure 22 (Color online) Contact detected between two 3D star-like particles [47].

看作三角面片之间的接触^[48], 三角面片之间的接触判定包含两个步骤: (1) 基于包围盒的三角面片潜在接触对的搜索; (2) 三角面片潜在接触对的接触判定和交线求解. Feng^[48]总结了可提高三角面片接触判定计算效率的策略, 具体参见文献^[48].

6.3 接触力计算

颗粒之间的接触力由两部分组成, 即法向接触力和切向接触力, 其中切向力的计算通常采用库仑摩擦准则, 并以增量形式在计算循环中进行叠加. 目前, 不规则颗粒之间法向接触力的计算并没有统一的法则, 下面介绍几种不规则颗粒法向接触力的计算方法.

6.3.1 基于重叠深度的二维法向力计算

基于重叠深度计算法向力是最常用的方法, 其表达式为

$$F_n = k_{n,\delta} \delta, \quad (68)$$

式中, $k_{n,\delta}$ 为法向接触刚度, δ 为重叠深度. 由上式可知, 法向接触力 F_n 会随重叠深度线性变化. 如图23所示, 在Arc-DEM^[46]中, 非规则颗粒重叠深度的确定流程为: (1) 确定两个不规则颗粒的相交线段 $\overline{QP}$; (2) 在相交线段 $\overline{QP}$ 中点 $M_{\overline{QP}}$ 处作垂线; (3) 确定垂线与接触轮廓的交点 E 和 F ; (4) 连接交点得到线段 $\overline{EF}$, 其长度即为重叠深度 δ .

6.3.2 基于重叠面积的二维法向力计算

FS-DEM^[45]采用了基于颗粒重叠面积的法向力计算方法, 其公式为

$$F_n = k_{n,A} A_c, \quad (69)$$

图 23 (网络版彩图)重叠深度示意图^[46]

Figure 23 (Color online) Definition of penetration depth ^[46].

式中, $k_{n,A}$ 为法向接触刚度, 下标 A 表示其与重叠面积相关. 重叠面积通常与重叠深度呈非线性关系. 如图24所示, 对于两个半径均为 R 的圆形颗粒, 其重叠面积 A_c 与重叠深度 δ 的关系为

$$\frac{A_c}{R^2} = \cos^{-1} \left(1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{\delta_n}{R} \right) - \left(1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{\delta_n}{R} \right) \sqrt{\frac{\delta_n}{R} - \frac{1}{4} \left(\frac{\delta_n}{R} \right)^2}. \quad (70)$$

根据上式, 即使 $k_{n,A}$ 为常数, 由式(68)计算的法向接触力 F_n 也会随重叠深度非线性变化. 由于法向接触刚度 $k_{n,\delta}$ 取值方面的经验较多, $k_{n,A}$ 的取值可参考 $k_{n,\delta}$ 的取值. 假定 $\delta_n/R=0.01$ 时两种方法给出的法向接触力相同, 即

$$(k_{n,A} A_c = k_{n,\delta} \delta)_{\delta_n/R=0.01}. \quad (71)$$

对于两个半径均为 R 的圆形颗粒, 当 $\delta_n/R=0.01$ 时, $A_c/R^2=0.00067$, 代入上式可得

$$k_{n,A} = \frac{15}{R} k_{n,\delta}. \quad (72)$$

对于不规则颗粒, 可以用等效半径 R_{eq} 代替上式中的半径 R , 即

$$k_{n,A} = \frac{15}{R_{eq}} k_{n,\delta}. \quad (73)$$

从式(72)和(73)可知, 在假定 $k_{n,\delta}$ 相同的情况下, 颗

图 24 (网络版彩图)圆形颗粒之间的重叠面积与重叠深度图示^[45]

Figure 24 (Color online) Schematic illustration of overlapping area and penetration depth between circular particles ^[45].

粒的尺寸越小, $k_{n,A}$ 的数值越大.

6.3.3 基于重叠体积的三维法向力计算

SH-DEM^[47] 采用了基于重叠体积的法向力计算方法, 其公式为

$$F_{n,i} = k_{n,V} V_i, \quad (74)$$

式中, $k_{n,V}$ 为法向接触刚度(下标 V 表示其与重叠体积相关), V_i 为重叠体积, 下标 i 表示第 i 个接触点. 如图25所示, 重叠体积 V_i 可以通过以下公式计算:

$$V_i = \frac{1}{3} \sum V_{P_i P_i^k P_i^{k+1} Q_i^k Q_i^{k+1}}, \quad (75)$$

其中, (Q_i^k, Q_i^{k+1}) 是主颗粒表面顶点 Q_i 的“一环邻域”上的采样点, (P_i^k, P_i^{k+1}) 为从颗粒表面顶点 P_i 的“一环邻域”上的采样点, 如图25(b)所示. 任意两个邻域点 Q_i^k (或 P_i^k), Q_i^{k+1} (或 P_i^{k+1}) 与顶点 Q_i (或 P_i) 可形成一个局部的三角面片, 如图25(c)所示. $V_{P_i P_i^k P_i^{k+1} Q_i^k Q_i^{k+1}}$ 是由6个顶点组成的多面体的体积. 由于每一个三角面片对应三个离散顶点, 导致在计算过程中每一个多面体体积 $V_{P_i P_i^k P_i^{k+1} Q_i^k Q_i^{k+1}}$ 都将被计算3次, 所以在式(75)中需乘上 $1/3$ 以消除重复计算的影响.

6.3.4 基于接触面积的三维法向力计算

传统的接触模型可能存在弹性接触能量不守恒的问题, 从而造成离散元分析中的数值不稳定, Feng^[48] 提出的接触算法可保证不规则颗粒从开始接触到脱离接触整个过程中的能量守恒. 该算法假定接触能量 w 是重叠体积的函数, 即

$$w = w(V_c), \quad (76)$$

式中, $V_c = |\Omega_c|$ 为重叠体积. 设 $w(V_c)$ 是单调递增函数, 则颗粒之间的法向力 $\mathbf{F}_n$ 可表示为

$$\mathbf{F}_n = -\nabla_x w(V_c) = -w'(V_c) \mathbf{S}_n, \quad (77)$$

式中, $\mathbf{S}_n$ 为两个颗粒接触表面 S_1 的面积向量(如图26所示). 通常可假定 $w(V_c)$ 为幂函数, 即

$$w(V_c) = k_{n,S} V_c^m, \quad (78)$$

式中, $k_{n,S}$ 为法向接触刚度(下标 S 表示其与接触面积相关), 指数 $m \geq 1$. 因此, F_n 的计算公式为

$$F_n = m k_{n,S} V_c^{m-1} S_n. \quad (79)$$

当取 $m=1$ 时, w 是 V_c 的线性函数, 此时上式变为

$$F_n = k_{n,S} S_n. \quad (80)$$

此时, 法向力 F_n 只与接触面积 S_n 相关, 而不需要将

图25 (网络版彩图)局部重叠体积的定义^[47]. (a) 颗粒视角下的重叠体积; (b) “一环邻域”顶点; (c) 多面体 $V_{P_i P_i^k P_i^{k+1} Q_i^k Q_i^{k+1}}$.
Figure 25 (Color online) Definition of local overlapping volume V_i [47]. (a) Whole particle view; (b) one-ring-neighbor vertices; (c) example of $V_{P_i P_i^k P_i^{k+1} Q_i^k Q_i^{k+1}}$.

图26 (网络版彩图)接触面积示意图^[48].
Figure 26 (Color online) Schematic diagram of contact surface [48].

重叠体积 V_c 计算出来, 可大大提高计算效率, 而接触能量 w 与重叠体积 V_c 成正比, 可保证不规则颗粒在接触过程中的能量守恒。

7 结论

本文总结归纳了非规则颗粒几何形态的获取、重构、评价、随机生成以及离散元模拟方法等方面的研究进展, 主要内容小结如下。

(1) 颗粒二维形态的获取方法可分为静态获取和动态获取两种方式。典型的静态获取方式包括针对粗颗粒的数码相机拍照和针对细颗粒的显微镜拍照; 典型的动态获取设备为动态颗粒图像分析仪和激光粒度仪, 其可在单位时间获取大量颗粒的二维形态。颗粒三维形态获取的方式主要包括针对粗颗粒的结构光扫描、针对细颗粒的X光断层扫描以及能够快速获取颗粒表面形貌信息的近景摄影测量技术。

(2) 二维星形颗粒和三维星形颗粒的几何形态可通过极径的傅里叶级数展开与球谐函数展开进行重构, 而对于二维非星形颗粒和三维非星形颗粒的几何形态重构, 则需要先进行弧长参数化与球面参数化, 再分别将颗粒轮廓与表面离散点的笛卡儿坐标进行傅里叶级数展开和球谐函数展开。

(3) 非规则颗粒几何形态评价指标主要包括: 度量

颗粒尺寸的主尺度, 度量颗粒整体形状的细长度与扁平度, 度量颗粒尖锐/圆润程度的棱角度与磨圆度, 度量颗粒与理想圆、球体、外接凸包接近程度的圆形度、球形度和凹凸度, 度量颗粒表面微小峰谷不平度/局部纹理的粗糙度。非规则颗粒几何形态指标可基于颗粒二维轮廓或三维表面的重构函数, 通过计算几何方法计算得到。

(4) 二维星形颗粒形态指标与其傅里叶系数幅值、三维星形颗粒形态指标与其球谐系数幅值都存在较强的相关性, 可结合此相关性和逆蒙特卡罗算法实现对所生成的随机颗粒形态的精细控制; 而在非星形随机颗粒的生成过程中, 应考虑一阶傅里叶/球谐系数之间的固有关系, 同时考虑不同阶系数之间的经验相关性。

(5) 颗粒几何状态表示、接触判断与接触力计算是非规则颗粒离散元模拟的核心问题。结合颗粒的平移、旋转和描述颗粒二维轮廓/三维表面的傅里叶/球谐系数, 可快速计算出颗粒轮廓点在空间的位置。非规则颗粒的接触判断通常包括基于颗粒包围盒的全局接触判断和基于点-线或点-面关系的局部接触判断。目前, 不规则颗粒之间法向接触力的计算并没有统一的法则, 基于颗粒重叠深度、重叠面积(二维)、重叠体积和接触面积(三维)的法向接触力计算方法是较常采用的方法。

参考文献

- 1 Lu K Q, Liu J X. Static and dynamic properties of granular matter (I) (in Chinese). *Physic*, 2004, 33: 629–635 [陆坤权, 刘寄星. 颗粒物质(上). 物理, 2004, 33: 629–635]
- 2 Coulomb C A. Essai sur une application des regles de maximis et minimis a quelques problemes de statique relatifs a l'architecture (essay on maximums and minimums of rules to some static problems relating to architecture). 1773, 7: 343–382
- 3 Reynolds O. LVII. On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact. With experimental illustrations. *London Edinburgh Dublin Philos Mag J Sci*, 1885, 20: 469–481
- 4 Janssen H A. Versuche über getreidedruck in silozellen. *Z Vereins Deutsch Ing*, 1885, 39: 1045–1049
- 5 Edwards S F, Mounfield C C. A theoretical model for the stress distribution in granular matter. I. Basic equations. *Physica A*, 1996, 226: 1–11
- 6 Mounfield C C, Edwards S F. A theoretical model for the stress distribution in granular matter. II. Forces in pipes. *Physica A*, 1996, 226: 12–24
- 7 Edwards S F, Mounfield C C. A theoretical model for the stress distribution in granular matter. III. Forces in sandpiles. *Physica A*, 1996, 226: 25–33
- 8 Vanel L, Claudin P, Bouchaud J P, et al. Stresses in silos: Comparison between theoretical models and new experiments. *Phys Rev Lett*, 2000, 84: 1439–1442
- 9 Krumbein W C, Sloss L L. Stratigraphy and sedimentation. *Soil Sci*, 1951, 71: 401
- 10 Janke N C. The shape of rock particles, a critical review. *Sedimentology*, 1981, 28: 737–738
- 11 Mitchell J K. Fundamentals of Soil Behavior. 3rd ed. New York: John Wiley & Sons, 2005

- 12 Liu X, Garboczi E J, Grigoriu M, et al. Spherical harmonic-based random fields based on real particle 3D data: Improved numerical algorithm and quantitative comparison to real particles. *Powder Tech*, 2011, 207: 78–86
- 13 Wadell H. Volume, shape, and roundness of rock particles. *J Geol*, 1932, 40: 443–451
- 14 Wentworth C K. A laboratory and field study of cobble abrasion. *J Geol*, 1919, 27: 507–521
- 15 Russell R D, Taylor R E. Roundness and shape of Mississippi River sands. *J Geol*, 1937, 45: 225–267
- 16 Krumbein W C. Measurement and geological significance of shape and roundness of sedimentary particles. *SEPM JSR*, 1941, 11: 64–72
- 17 Powers M C. A new roundness scale for sedimentary particles. *SEPM JSR*, 1953, 23: 117–119
- 18 Charpentier I, Sarocchi D, Sedano L A R. Particle shape analysis of volcanic clast samples with the Matlab tool MORPHEO. *Comput Geosci*, 2013, 51: 172–181
- 19 Tafesse S, Fernlund J M R, Sun W, et al. Evaluation of image analysis methods used for quantification of particle angularity. *Sedimentology*, 2013, 60: 1100–1110
- 20 Chávez G M, Castillo-Rivera F, Montenegro-Ríos J A, et al. Fourier shape analysis, FSA: Freeware for quantitative study of particle morphology. *J Volcanol Geotherm Res*, 2020, 404: 107008
- 21 Schwarcz H P, Shane K C. Measurement of particle shape by Fourier analysis. *Sedimentology*, 1969, 13: 213–231
- 22 Ehrlich R, Weinberg B. An exact method for characterization of grain shape. *SEPM JSR*, 1970, Vol. 40: 205–212
- 23 Beddow J K, Philip G. On the use of a Fourier analysis technique for describing the shape of individual particles. *Planseeber Pulvermetall*, 1975, 23: 3–14
- 24 Granlund G H. Fourier preprocessing for hand print character recognition. *IEEE Trans Comput*, 1972, C-21: 195–201
- 25 Clark M W. Quantitative shape analysis: A review. *Math Geol*, 1981, 13: 303–320
- 26 Thomas M C, Wiltshire R J, Williams A T. The use of Fourier descriptors in the classification of particle shape. *Sedimentology*, 1995, 42: 635–645
- 27 Bowman E T, Soga K, Drummond W. Particle shape characterisation using Fourier descriptor analysis. *Géotechnique*, 2001, 51: 545–554
- 28 Su D, Wang X. Characterization and regeneration of 2D general-shape particles by a Fourier series-based approach. *Construct Build Mater*, 2020, 250: 118806
- 29 Mollon G, Zhao J. Generating realistic 3D sand particles using Fourier descriptors. *Granular Matter*, 2013, 15: 95–108
- 30 Garboczi E J. Three-dimensional mathematical analysis of particle shape using X-ray tomography and spherical harmonics: Application to aggregates used in concrete. *Cement Concrete Res*, 2002, 32: 1621–1638
- 31 Zhou B, Wang J. Generation of a realistic 3D sand assembly using X-ray micro-computed tomography and spherical harmonic-based principal component analysis. *Int J Numer Anal Meth Geomech*, 2017, 41: 93–109
- 32 Brechbühler C, Gerig G, Kübler O. Parametrization of closed surfaces for 3-D shape description. *Comput Vision Image Understand*, 1995, 61: 154–170
- 33 Zhou B, Wang J, Zhao B. Micromorphology characterization and reconstruction of sand particles using micro X-ray tomography and spherical harmonics. *Eng Geol*, 2015, 184: 126–137
- 34 Su D, Yan W M. 3D characterization of general-shape sand particles using microfocus X-ray computed tomography and spherical harmonic functions, and particle regeneration using multivariate random vector. *Powder Tech*, 2018, 323: 8–23
- 35 Ferrellec J F, McDowell G R. A simple method to create complex particle shapes for DEM. *Geomech Geoeng*, 2008, 3: 211–216
- 36 Zheng J, Hryciw R D. A corner preserving algorithm for realistic DEM soil particle generation. *Granular Matter*, 2016, 18: 84
- 37 Xu M Q, Guo N, Yang Z X. Particle shape effects on the shear behaviors of granular assemblies: Irregularity and elongation. *Granular Matter*, 2021, 23: 25
- 38 Wei D, Wang J, Nie J, et al. Generation of realistic sand particles with fractal nature using an improved spherical harmonic analysis. *Comput Geotech*, 2018, 104: 1–12
- 39 Wang X, Liang Z, Nie Z, et al. Stochastic numerical model of stone-based materials with realistic stone-inclusion features. *Construct Build Mater*, 2019, 197: 830–848
- 40 Wang X, Yin Z Y, Zhang J Q, et al. Three-dimensional reconstruction of realistic stone-based materials with controllable stone inclusion geometries. *Construct Build Mater*, 2021, 305: 124240
- 41 Feng Y T, Owen D R J. A 2D polygon/polygon contact model: Algorithmic aspects. *Eng Computat*, 2004, 21: 265–277

- 42 Zhao S, Zhao J. SudoDEM: Unleashing the predictive power of the discrete element method on simulation for non-spherical granular particles. *Comput Phys Commun*, 2021, 259: 107670
- 43 Liu S, Chen F, Ge W, et al. NURBS-based DEM for non-spherical particles. *Particuology*, 2020, 49: 65–76
- 44 Kawamoto R, Andò E, Viggiani G, et al. All you need is shape: Predicting shear banding in sand with LS-DEM. *J Mech Phys Solids*, 2018, 111: 375–392
- 45 Su D, Wang X. Fourier series-based discrete element method for two-dimensional concave irregular particles. *Comput Geotech*, 2021, 132: 103991
- 46 Wang X, Yin Z Y, Su D, et al. A novel Arcs-based discrete element modeling of arbitrary convex and concave 2D particles. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 386: 114071
- 47 Wang X, Yin Z Y, Xiong H, et al. A spherical-harmonic-based approach to discrete element modeling of 3D irregular particles. *Int J Numer Methods Eng*, 2021, 122: 5626–5655
- 48 Feng Y T. An energy-conserving contact theory for discrete element modelling of arbitrarily shaped particles: Contact volume based model and computational issues. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 373: 113493
- 49 Cassel M, Piégay H, Lavé J, et al. Evaluating a 2D image-based computerized approach for measuring riverine pebble roundness. *Geomorphology*, 2018, 311: 143–157
- 50 Mora C F, Kwan A K H, Chan H C. Particle size distribution analysis of coarse aggregate using digital image processing. *Cement Concrete Res*, 1998, 28: 921–932
- 51 Xu W J, Wang Y J, Chen Z Y, et al. Stability analysis of soil-rock mixed slope based on digital image technology (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2008, 29: 345–350 [徐文杰, 王玉杰, 陈祖煜, 等. 基于数字图像技术的土石混合体边坡稳定性分析. *岩土力学*, 2008, 29: 345–350]
- 52 Zheng J, Hryciw R D. An image based clump library for DEM simulations. *Granular Matter*, 2017, 19: 26
- 53 Liu Q B, Xiang W, Budhu M, et al. Study of particle shape quantification and effect on mechanical property of sand (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2011, 32(Suppl): 190–197 [刘清秉, 项伟, Budhu M, 等. 砂土颗粒形状量化及其对力学指标的影响分析. *岩土力学*, 2011, 32(增刊): 190–197]
- 54 Köhler U, Stübinger T, List J, et al. Investigations on non-Spherical Reference Material Using Laser Diffraction and Dynamic Image Analysis. *Particulate Systems Analysis* 2008, Stratford-upon-Avon, UK 2008
- 55 Jiao L Y. Virtual mechanical research on mesoscopic structure of asphalt mixture based on X-ray CT technology (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Nanjing: Southeast University, 2016 [焦丽亚. 基于X-ray CT技术的沥青混合料细观结构虚拟力学试验研究. 硕士学位论文. 南京: 东南大学, 2016]
- 56 Ren J D. Research on mesoscopic structure and mechanical properties of asphalt mixture based on X-ray CT (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2014 [任俊达. 基于X-ray CT沥青混合料细观结构及力学性能研究. 硕士学位论文. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2014]
- 57 Tu Z X. Study on numerical simulation of asphalt mixture based on X-ray CT and discrete element method (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Guangzhou: South China University of Technology [涂志先. 基于X-ray CT与离散元法的沥青混合料数值模拟研究. 硕士学位论文. 广州: 华南理工大学, 2019]
- 58 Cheng Z, Wang J. Experimental investigation of inter-particle contact evolution of sheared granular materials using X-ray micro-tomography. *Soils Found*, 2018, 58: 1492–1510
- 59 Wang L B, Frost J D, Lai J S. Three-dimensional digital representation of granular material microstructure from X-ray tomography imaging. *J Comput Civ Eng*, 2004, 18: 28–35
- 60 Liu Y W. Real estate measuring and 3D building fine reconstruction based on digital camera (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Wuhan: Wuhan University, 2004 [刘亚文. 利用数码相机进行房产测量与建筑物的精细三维重建. 博士学位论文. 武汉: 武汉大学, 2004]
- 61 Wang J X, Zhang F X. Application of digital close-range photogrammetry to the deformation-observing for watercourse-model (in Chinese). *J Yunnan Agr Univ*, 2006, 21: 128–130 [王建雄, 张辅霞. 数字近景摄影测量在河工模型试验中的应用. *云南农业大学学报(自然科学)*, 2006, 21: 128–130]
- 62 Tian S L, Ge X R, Tu Z J. Testing study on digital close-range photogrammetry for measuring deformations of tunnel and underground spaces (in Chinese). *Chin J Rock Mech Eng*, 2006, 25: 1309–1315 [田胜利, 葛修润, 涂志军. 隧道及地下空间结构变形的数字化近景摄影测量试验研究. *岩石力学与工程学报*, 2006, 25: 1309–1315]

- 63 Cui X R, Wei X L, Zheng B X, et al. Close-range photogrammetry analysis of building collapse (III)—System of measure and analysis (in Chinese). *Eng Blasting*, 2010, 16: 68–73 [崔晓荣, 魏晓林, 郑炳旭, 等. 建筑爆破倒塌过程的近景摄影测量分析(III)——测试分析系统. *工程爆破*, 2010, 16: 68–73]
- 64 Peng C. Multi-baseline digital close-range photogrammetry technology in oral facial three-dimensional imaging and measurement (in Chinese). *Image Technol*, 2015, 22: 25–27 [彭春. 多基线数字近景摄影测量技术在口腔颜面部三维成像和测量中的应用. *影像技术*, 2015, 22: 25–27]
- 65 Cheng X J, Luo W. Application of close-range photogrammetry by using non-metric digital camera in determining the human skeleton model (in Chinese). *Remote Sens Inform* 2002, 17: 35–38 [程效军, 罗武. 近景摄影测量在人体骨架模型测量中的应用研究. *遥感信息*, 2002, 17: 35–38]
- 66 Wang X. Shape quantification and model reconstruction of geotechnical granular materials with application to discrete element modeling (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Changsha: Central South University, 2020 [王翔. 岩土颗粒的几何形态评价与细观模型重构及其离散元应用. 博士学位论文. 长沙: 中南大学, 2020]
- 67 Shen L. SPHARM-MAT Documentation, Release 1.0.0, 2010
- 68 Schröder-Turk G E, Mickel W, Kapfer S C, et al. Minkowski tensors of anisotropic spatial structure. *New J Phys*, 2013, 15: 083028
- 69 Garboczi E J, Bullard J W. 3D analytical mathematical models of random star-shape particles via a combination of X-ray computed microtomography and spherical harmonic analysis. *Adv Powder Tech*, 2017, 28: 325–339
- 70 Nie Z H, Liang Z Y, Wang X, et al. Evaluation of granular particle roundness using digital image processing and computational geometry. *Construct Build Mater*, 2018, 172: 319–329
- 71 Nie Z H, Liang Z Y, Wang X. A three-dimensional particle roundness evaluation method. *Granular Matter*, 2018, 20: 32
- 72 Nie Z H, Wang X, Liang Z Y, et al. Quantitative analysis of the three-dimensional roundness of granular particles. *Powder Tech*, 2018, 336: 584–593
- 73 Masad E, Olcott D, White T, et al. Correlation of fine aggregate imaging shape indices with asphalt mixture performance. *Transp Res Record*, 2001, 1757: 148–156
- 74 Al-Rousan T, Masad E, Tutumluer E, et al. Evaluation of image analysis techniques for quantifying aggregate shape characteristics. *Construct Build Mater*, 2007, 21: 978–990
- 75 Chen S, Yang X, You Z, et al. Innovation of aggregate angularity characterization using gradient approach based upon the traditional and modified Sobel operation. *Construct Build Mater*, 2016, 120: 442–449
- 76 Wang L, Wang X, Mohammad L, et al. Unified method to quantify aggregate shape angularity and texture using Fourier analysis. *J Mater Civ Eng*, 2005, 17: 498–504
- 77 Dong C, Wang G. Curvatures estimation on triangular mesh. *J Zhejiang Univ-Sci*, 2005, 6: 128–136
- 78 Su D, Yan W M. Quantification of angularity of general-shape particles by using Fourier series and a gradient-based approach. *Construction Building Mater*, 2018, 161: 547–554
- 79 Su D, Wang X, Wang X. An in-depth comparative study of three-dimensional angularity indices of general-shape particles based on spherical harmonic reconstruction. *Powder Tech*, 2020, 364: 1009–1024
- 80 Su D, Wang X, Yang H W, et al. Roughness analysis of general-shape particles, from 2D closed outlines to 3D closed surfaces. *Powder Tech*, 2019, 356: 423–438
- 81 Masad E, Saadeh S, Al-Rousan T, et al. Computations of particle surface characteristics using optical and X-ray CT images. *Comput Mater Sci*, 2005, 34: 406–424
- 82 Gadelmawla E S, Koura M M, Maksoud T M A, et al. Roughness parameters. *J Mater Process Tech*, 2002, 123: 133–145
- 83 Su D, Yan W M. Prediction of 3D size and shape descriptors of irregular granular particles from projected 2D images. *Acta Geotech*, 2020, 15: 1533–1555
- 84 Mollon G, Zhao J. Fourier-Voronoi-based generation of realistic samples for discrete modelling of granular materials. *Granular Matter*, 2012, 14: 621–638
- 85 Mollon G, Zhao J. 3D generation of realistic granular samples based on random fields theory and Fourier shape descriptors. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2014, 279: 46–65
- 86 Cundall P A. A computer model for simulating progressive, large scale movements in blocky rock systems. In: *Proceedings of the International Symposium Rock Fracture, ISRM. Nancy, 1971. Paper No. II-8*
- 87 Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 1979, 29: 47–65

Research progress on morphological characterization and discrete element modeling of irregular particles

SU Dong^{1,2,3}, FAN Meng¹, WANG Xiang⁴ & CHEN XiangSheng^{1,2,3}

¹ College of Civil and Transportation Engineering, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China;

² Key Laboratory for Resilient Infrastructures of Coastal Cities (Shenzhen University), Ministry of Education, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China;

³ Shenzhen Key Laboratory of Green, Efficient and Intelligent Construction of Underground Metro Station, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China;

⁴ Department of Civil and Environmental Engineering, The Hong Kong Polytechnic University, Hong Kong 999077, China

Granular materials widely exist in nature, industry, and human life. The physicommechanical characteristics of irregular particles are closely related to their geometry morphology. This paper summarizes the relevant studies performed by our research group and collaborators. The research progress in image acquisition, geometric reconstruction, morphological characterization, random generation, and discrete element modeling of irregular particles is presented. In addition, the advantages and disadvantages of different methods for the image acquisition of irregular particles are summarized. Two- and three-dimensional general-shape particles are divided into two categories, namely star- and nonstar-like particles. The computational geometric methods for the morphological reconstruction of the particles in each category are introduced. Moreover, the definitions and calculation formulas for the morphological evaluation indices of irregular particles are systematically summarized. The random generation method for the star-like particles based on the inverse Monte Carlo method and that for the nonstar-like particles are introduced considering the inherent relationship of the first-order coefficients and the empirical correlation between the coefficients at different orders. For the discrete element modeling methods of irregular particles, the progress on the core issues, such as geometric representation, contact detection, and contact law, is summarized.

irregular particle, geometric shape, nonstar-like particle, morphological evaluation index, particle random generation, discrete element method, contact law

doi: [10.1360/SST-2021-0353](https://doi.org/10.1360/SST-2021-0353)