基于水平集接触算法的任意形态颗粒材料球谐离散元方法

王嗣强, 乔婷, 张林风, 季顺迎*

大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116024

*联系人, E-mail: jisy@dlut.edu.cn

收稿日期: 2021-01-31; 接受日期: 2021-04-08; 网络出版日期: 2021-12-22

国家重点研发计划(编号: 2018YFA0605902, 2016YFC1402706)和国家自然科学基金(编号: 11872136, 11772085)资助项目

摘要 为对自然环境或工业领域中非规则颗粒材料的力学特性进行精确计算, 本文采用球谐函数发展了可描述任意几何颗粒形态的球谐离散元方法. 考虑球谐单元的凹凸形态及多点接触特性, 发展了基于水平集方法的任意形态接触算法, 以准确计算单元间的接触方向和重叠量. 该算法将不同形态的球谐单元离散为由一系列点组成的零水平集函数和空间离散水平集函数, 并将单元间的接触问题转化为两个水平集函数间的求解问题. 通过将一系列零水平集点代入邻居单元的空间离散水平集函数中进行三线型插值, 可确定两个接触单元间的多接触点及作用力. 为检验基于水平集算法的球谐离散元方法的可靠性, 对单颗粒与刚性壁面的弹性碰撞、单颗粒自由下落和多颗粒动力堆积过程进行了离散元模拟, 研究了颗粒的平动和转动动能随时间的变化规律. 计算结果表明, 基于水平集算法的球谐离散元方法可准确地计算单元间的接触碰撞作用, 并可保证弹性碰撞时颗粒系统的能量守恒及非弹性碰撞时颗粒系统的能量衰减直至动能为零. 在此基础上进一步分析了不同表面凹凸特性对颗粒堆积中体积分数和平均配位数的影响, 为任意形态颗粒材料的数值模拟提供了一种有效的离散元方法.

关键词 离散元方法, 任意形态, 颗粒材料, 球谐函数, 水平集算法, 多接触点判断

PACS: 45.70.Vn, 47.57.Gc, 83.80.Fg

1 引言

离散单元方法(Discrete Element Method, DEM)是研究颗粒材料宏观细观特性的有效工具, 其最初采用二维圆盘或三维球体, 具有计算简单和运行高效等优点^[1-5]. 然而, 自然界或工业中的颗粒材料一般具有复杂的非规则几何形态, 从球形颗粒得到的结论难以直

接应用于非规则颗粒材料^[6-9]. 与球形颗粒相比, 非规则颗粒表面的尖锐度和长宽比降低了颗粒材料的流动速率, 并且流动状态从连续流动转变为间歇性流动^[10]. 另外, 非球形颗粒间相互接触形成互锁结构, 限制了颗粒间的相对运动并增强了颗粒系统的剪切强度^[11]. 尽管考虑滚动摩擦模型的球形颗粒能较好地反映非球形颗粒的动态行为^[12], 但是这种模型难以有效捕捉颗粒

引用格式: 王嗣强, 乔婷, 张林风, 等. 基于水平集接触算法的任意形态颗粒材料球谐离散元方法. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2022, 52: 224611
Wang S Q, Qiao T, Zhang L F, et al. A discrete element method with spherical harmonics for irregular granular materials based on the level set contact algorithm (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 224611, doi: 10.1360/SSPMA-2021-0030

材料的空隙率和配位数^[13]. 因此, 发展任意形态的理论模型仍然是当前离散元方法的关键问题^[14,15].

近年来, 针对非规则颗粒的离散元方法得到迅速发展^[16]. 采用二次曲面函数可构造不同长宽比的椭球体颗粒, 并且单元间的接触力可通过“几何势能算法(Geometric Potential Energy)”计算得到^[17-19]. 超二次曲面方程是基于二次曲面方程扩展的一种数学模型, 能够用于构造不同长宽比和表面尖锐度的椭球体、圆柱体和块体颗粒^[20,21]. 多面体单元是基于拓扑结构的几何模型, 包含若干个面、边和角点^[22]. 这种模型具有完整的多面体外轮廓几何特征信息, 并且单元间的接触力可通过公平面方法(Common Plane)、GJK (Gilbert-Johnson-Keerthi)和EPA理论(Expanding Polytope Algorithm)、接触体积等方法计算得到^[23,24]. 扩展多面体模型是基于闵可夫斯基和算法(Minkowski Sum Method)得到的一种光滑多面体模型^[25]. 这种模型将多面体单元的面、边和角点转变为柱面和球面, 从而避免角点及棱边接触时的奇异结果, 进而简化接触判断并提高离散元模拟的计算效率^[26]. 然而, 以上离散元方法仅适用于构造凸形颗粒, 单元间的接触判断很大程度为单点接触, 进而难以准确反映凹形颗粒材料的运动规律.

为合理描述任意的颗粒形状, 组合单元方法不断发展和完善^[27]. 这种模型将不同数目的球体、椭球体、超二次曲面、圆柱体和多面体等基本单元进行任意组合, 从而构造理想的颗粒形状^[28-31]. 考虑组合单元间接触判断的复杂性, 其接触理论通常转化为若干个基本单元间的接触问题. 然而, 该方法的计算效率随着基本单元数目的增加而显著降低, 且其计算精度依赖于颗粒间的接触模式^[32]. 为真实反映任意形态颗粒的运动特性, 新颖的非球形构造理论引起广泛关注^[33]. 随机场理论结合傅里叶级数用于描述具有不同长宽比、表面尖锐度和空隙率的多分散颗粒系统^[34]. 此外, CT扫描结合水平集算法能有效地描述真实颗粒形状并且计算单元间的接触作用^[35]. 通过将任意颗粒形状离散为一系列的三角单元, 能量保守接触理论(Energy-Conserving Contact Theory)可确定任意形状间的接触法向和接触力, 具有较好的系统稳定性^[36,37]. 球谐函数是数学意义上描述自然界或工业中任意形态的普遍方法, 其结合X射线扫描技术可将具有凹凸特性的真实几何形状量化为高阶多项式的函数形式^[38,39]. 然

而, 目前基于球谐函数的离散元方法仅用于构造任意单元形状, 而对单元间多接触点搜索和接触力的有效计算方法研究则相对较少^[40,41].

本文基于球谐函数构造任意颗粒形态, 并采用水平集算法将球谐单元离散为由一系列点组成的零水平函数和空间离散水平集函数, 以判断单元间的多接触点模式并计算相应作用力. 为检验基于水平集算法的球谐离散元方法的有效性, 对单颗粒与壁面的弹性碰撞、单颗粒的自由下落和多颗粒的堆积过程进行离散元模拟, 并分析颗粒凹凸特性对其体积分数和平均配位数的影响.

2 基于水平集算法的球谐离散元方法

通过球谐函数构造任意的非规则颗粒形态, 采用水平集算法将球谐单元离散为由一系列点组成的零水平集函数和空间离散水平集函数, 进而计算单元间的多接触点和作用力.

2.1 球谐离散单元的几何表述

球谐函数是数学意义上构造真实颗粒的普遍方法, 通常其定义在球坐标系中. 球谐函数可表示为^[42,43]

$$r(\theta, \varphi) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=-n}^n A_{nm} Y_n^m(\theta, \varphi), \quad (1)$$

式中, r 表示单元表面至质心的距离, θ 表示 r 与 z 轴的夹角, φ 表示 r 在 x - y 平面上的投影与 x 轴夹角, 如图1所示. N 为球谐单元的形态参数; A_{nm} 是球谐函数的系数, 可表示为 $A_{nm} = R_{nm} + C_{nm}$, 其中, R_{nm} 和 C_{nm} 分别为 A_{nm} 系数的实部和虚部. $Y_n^m(\theta, \varphi)$ 是球谐函数的级数形式, 可表示为^[44]

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

式中, m 和 n 为 P_n^m 的阶数. P_n^m 为相关联的勒让德多项式, 可表示为

$$P_n^m(x) = (-1)^m \frac{1}{2^n n!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} (x^2-1)^n, \quad m \geq 0, \quad (3)$$

$$P_n^m(x) = (-1)^{-m} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} P_n^{-m}(x), \quad m < 0, \quad (4)$$

式中, n 的取值范围为 $[0, N]$, m 的取值范围为 $[-n, n]$. 值

图 1 (网络版彩图)基于球谐函数的离散元方法

Figure 1 (Color online) DEM model based on the spherical harmonic function.

得注意的是, 随着形状参数 N 的增大, 单元形状逐渐从球体变为表面具有凹凸特性的真实单元形状, 如图2所示.

球谐函数中 A_{nm} 系数直接决定单元的基本形状. 通常, 采用X射线技术扫描真实颗粒以获得三维几何模型, 同时在几何模型表面正交化取点. 每一个表面点均转化为球坐标系下关于 θ 和 φ 的坐标形式, 并且至少需要 $(N+1)^2$ 个表面点以获得形状参数为 N 的 A_{nm} 系数, 可表示为^[45,46]

$$A_{nm} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin(\theta) r(\theta, \varphi) \bar{Y}_n^m(\theta, \varphi) d\varphi d\theta, \quad (5)$$

式中, $\bar{Y}_n^m(\theta, \varphi)$ 是 $Y_n^m(\theta, \varphi)$ 的复共轭. 值得注意的是, 通过求解多元线性方程组也可得到 A_{nm} 系数^[43,47]. 全部的未知系数 $(a_{m,n})$ 可表示为向量 $\mathbf{A}=(a_{0,0}, a_{-1,1}, a_{0,1}, a_{1,1}, \dots)^T$. 所有表面点与坐标原点的距离表示为向量 $\mathbf{R}=(R_1, R_2, R_3, R_4, \dots)^T$, 并将这些表面点代入球谐函数的级数表达式中得到矩阵 $\mathbf{B}$, 可表示为 $\mathbf{B}=\mathbf{B}_{i,j(n,m)}=Y_n^m(\theta_i, \varphi_i)$. 下标 i 表示每个表面点的编号, 而 $j(n,m)$ 表示每组阶数为 n 和 m 得到的一系列函数值. 因此, 多元线性方程组可表示为 $\mathbf{BA}=\mathbf{R}$. 未知的球谐函数系数可表示为 $\mathbf{A}=(\mathbf{B}^T\mathbf{B})^{-1}\mathbf{B}^T\mathbf{R}$. 另外, 由不同球谐函数的 A_{nm} 系数构造的多个任意形态颗粒单元如图3所示. 可以发现, 球谐函数在描述非规则颗粒的几何形态方面具有很强的灵活性, 特别适用于对非对称、凹颗粒的函数构造.

2.2 非规则颗粒的离散水平集函数表示

通过球谐函数构造自然界或工业中真实单元形状的复杂几何特征, 并采用离散水平集函数对单元形状进行重构可计算单元间的多接触点和作用力^[48,49]. 离

图 2 (网络版彩图)通过改变形状系数 N 得到的不同表面特性的颗粒形状

Figure 2 (Color online) Particles with different surface characteristics obtained by changing the shape parameter N .

图 3 (网络版彩图)由球谐函数构造的不同形状颗粒

Figure 3 (Color online) Differently shaped particles constructed by the spherical harmonic functions.

散水平集函数可表示为 $F_d=\psi(\mathbf{P})$. 其中, $\mathbf{P}$ 为三维空间中的一点, F_d 表示该点到单元表面的最近距离. 因此, $F_d<0$ 表示该点在单元内部; $F_d=0$ 表示该点在单元表面上; $F_d>0$ 表示该点在单元外部. 同时, 满足 $F_d=0$ 的一系列空间点组成零水平集函数, 而满足 $F_d\neq 0$ 的一系列空间点组成空间离散水平集函数. 为建立球谐单元的零水平集函数, 在六面体包围盒表面均匀分布空间点, 如图4所示. 空间点与零水平集点具有一一对应的特性, 即可通过遍历所有的空间点, 从而得到由一系列离散点组成的零水平集函数. $\mathbf{O}_0(O_{0x}, O_{0y}, O_{0z})$ 表示球谐单元的原点坐标, $\mathbf{B}_i(B_{ix}, B_{iy}, B_{iz})$ 表示包围盒上的空

图 4 (网络版彩图)球谐单元的零水平集函数

Figure 4 (Color online) Zero level set functions of a spherical harmonic element.

间点坐标, $\mathbf{P}_i(P_{ix}, P_{iy}, P_{iz})$ 表示颗粒表面的零水平集点坐标. 将向量 $\mathbf{O}_0\mathbf{B}_i$ 转换为球坐标系下, 可表示为

$$\begin{cases} r_{Bi} = |\mathbf{O}_0\mathbf{B}_i|, \\ \theta_i = \arccos\left(\frac{B_{iz} - O_{0z}}{r_{Bi}}\right), \\ \varphi_i = \arctan\left(\frac{B_{iy} - O_{0y}}{B_{ix} - O_{0x}}\right). \end{cases} \quad (6)$$

将以上 θ_i 和 φ_i 代入式(1)可得

$$r_{Pi} = \sum_{n=0}^N \sum_{m=-n}^n A_{nm} Y_n^m(\theta_i, \varphi_i). \quad (7)$$

由此, 零水平集点 $\mathbf{P}_i$ 可表示为

$$\begin{cases} P_{ix} = r_{Pi} \sin(\theta_i) \cos(\varphi_i), \\ P_{iy} = r_{Pi} \sin(\theta_i) \sin(\varphi_i), \\ P_{iz} = r_{Pi} \cos(\theta_i). \end{cases} \quad (8)$$

为建立球谐单元的空间离散水平集函数, 在六面体包围盒内部均匀地分布空间点, 如图5(a)所示. 每一个空间点具有4个维度, 可表示为 $\mathbf{L}_i(L_{ix}, L_{iy}, L_{iz})$ 和 D_{Li} . 其中, L_{ix} , L_{iy} 和 L_{iz} 分别表示该点在 x , y 和 z 方向上的坐标值, D_{Li} 表示该点与颗粒表面的最近距离, 即 $D_{Li} = \psi(\mathbf{L}_i)$. $\mathbf{O}_0(O_{0x}, O_{0y}, O_{0z})$ 表示球谐单元的坐标原点, 同时将该空间点的笛卡儿坐标转换为球坐标, 可表示为

$$\begin{cases} r_{Li} = |\mathbf{O}_0\mathbf{L}_i|, \\ \theta_i = \arccos\left(\frac{L_{iz} - O_{0z}}{r_{Li}}\right), \\ \varphi_i = \arctan\left(\frac{L_{iy} - O_{0y}}{L_{ix} - O_{0x}}\right), \end{cases} \quad (9)$$

将得到的 θ_i 和 φ_i 代入式(1)可得

$$r_{Pi} = \sum_{n=0}^N \sum_{m=-n}^n A_{nm} Y_n^m(\theta_i, \varphi_i). \quad (10)$$

图 5 (网络版彩图)球谐单元的空间离散水平集函数. (a) 空间离散点; (b) 颜色表示点是否位于单元内部; (c) 颜色表示点至单元表面的距离

Figure 5 (Color online) Discrete level set functions of a spherical harmonic element. (a) Spatially discrete points; (b) the color indicates whether the point is inside the element; (c) the color indicates the distance from the point to the element surface.

如果 $r_{Li} > r_{Pi}$, 则该点在颗粒外部并且 D_{Li} 为正值, 用红色表示; 否则, 该点在颗粒内部并且 D_{Li} 为负值, 用蓝色表示, 如图5(b)所示. 可以看出, 蓝色空间点集构成的三维形状基本与球谐单元相同. 在此基础之上, 将球谐单元离散为相对密集的水平集点, 并采用点-距离公式(Point-Distance Formula)计算空间水平集点的最近距离^[48], 或将球谐单元离散为一系列的三角单元, 并采用点-三角单元距离公式(Point-to-Triangulation Distance Function)计算空间水平集点的距离^[50], 最终生成的空间离散水平集函数如图5(c)所示. 可以发现, 靠近包围盒边缘的空间点颜色接近红色, 而靠近球谐函数中心的空间点颜色接近蓝色. 同时, 蓝色向红色的渐变过程表明空间离散水平集是一种近似连续函数, 并且随着空间点分布更加密集, 这种连续变化的现象变得更加显著.

2.3 单元间的接触判断方法

考虑球谐单元间接判断的复杂性, 包围球和方向包围盒方法(Oriented Bounding Box)用于减少单元间潜在接触对的数目, 进而提高离散元模拟的计算效率^[21]. 包围球方法作为单元间的第一次粗判断, 其理论基于传统球体的接触判断方法. 如果两个包围球的球心间距离小于其包围半径和, 则单元间可能发生接

触, 否则不接触. 方向包围盒作为单元间的第二次粗判断, 其基于分离轴理论并通过寻找潜在的分离轴进而判断六面体包围盒的接触状态. 如果两个包围盒在空间向量上的投影没有相交, 则单元间不发生接触, 否则为接触^[51].

单元间精确的接触判断是离散元模拟的基础, 这里采用水平集算法并考虑凹形单元间的多接触点及作用力. 由于离散水平集函数是六面体包围盒内均匀分布的空间点集, 同时在包围盒任意方向上点与点间的距离恒定. 因此, 通过遍历单元 j 上所有零水平集点并代入单元 i 的空间离散水平集函数中, 能够迅速找到与零水平集点 $\mathbf{P}_j$ 相对应的8个空间离散水平集点 $\mathbf{P}_i$, 如图6所示. 如果点 $\mathbf{P}_j$ 超出单元 i 的包围盒范围, 即该点不在单元 i 的水平集函数取值范围内, 则表明点 $\mathbf{P}_j$ 位于单元 i 外部.

离散水平集函数在3个方向上点间距分别表示为 l_x , l_y 和 l_z , 这里, $l_x=l_y=l_z=l_0$. 零水平集点 $\mathbf{P}_j$ 在8个水平集点 $\mathbf{P}_i$ 所围成的六面体内相对位置可表示为

$$\begin{cases} x = (P_{jx} - P_{ix,000}) / l_0, \\ y = (P_{jy} - P_{iy,000}) / l_0, \\ z = (P_{jz} - P_{iz,000}) / l_0. \end{cases} \quad (11)$$

同时, 采用三线性插值方法计算点 $\mathbf{P}_j$ 在单元 i 的水平集函数值 $\psi(\mathbf{P}_j)$, 即^[48]

$$\begin{aligned} D_{P_j} &= \psi(\mathbf{P}_j) \\ &= \sum_{a=0}^1 \sum_{b=0}^1 \sum_{c=0}^1 \psi_{abc} [(1-a)(1-x) + ax] \\ &\quad \times [(1-b)(1-y) + by] [(1-c)(1-z) + cz]. \end{aligned} \quad (12)$$

图 6 (网络版彩图) 零水平集点 $\mathbf{P}_j$ 与周围空间离散水平集点 $\mathbf{P}_i$ 的位置关系

Figure 6 (Color online) The positional relationship between the zero level set point $\mathbf{P}_j$ and the surrounding level set points $\mathbf{P}_i$.

此外, 同样采用三线性插值方法计算点 $\mathbf{P}_j$ 在单元 i 的水平集函数梯度 $\nabla \psi(\mathbf{P}_j)$, 即^[48]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(\mathbf{P}_j)}{\partial x} &= \sum_{a=0}^1 \sum_{b=0}^1 \sum_{c=0}^1 \psi_{abc} (2a-1) \\ &\quad \times [(1-b)(1-y) + by] \\ &\quad \times [(1-c)(1-z) + cz], \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(\mathbf{P}_j)}{\partial y} &= \sum_{a=0}^1 \sum_{b=0}^1 \sum_{c=0}^1 \psi_{abc} [(1-a)(1-x) + ax] \\ &\quad \times (2b-1) [(1-c)(1-z) + cz], \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(\mathbf{P}_j)}{\partial z} &= \sum_{a=0}^1 \sum_{b=0}^1 \sum_{c=0}^1 \psi_{abc} [(1-a)(1-x) + ax] \\ &\quad \times [(1-b)(1-y) + by] (2c-1). \end{aligned} \quad (15)$$

如果 $D_{P_j} > 0$, 则表明单元 i 和 j 不接触, 否则为接触. 因此, 单元 i 和 j 在点 $\mathbf{P}_j$ 处的接触法向 $\mathbf{n}$ 即为水平集函数梯度 $\nabla \psi(\mathbf{P}_j)$, 法向重叠量 δ_n 即为水平集函数值 $\psi(\mathbf{P}_j)\mathbf{n}$. 单元 i 表面的接触点 $\mathbf{P}_i$ 可表示为 $\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_j + \psi(\mathbf{P}_j)\mathbf{n}$, 如图7所示. 通过遍历单元 j 的所有零水平集点 $\mathbf{P}_j$ 并对 $D_{P_j} < 0$ 的一系列接触力进行累加, 进而实现凹形单元间多接触点及作用力计算.

2.4 任意形态单元间的非线性接触模型

对于采用球谐函数构造的任意形态颗粒单元, 其接触力 $\mathbf{F}$ 主要是由法向力 $\mathbf{F}_n$ 和切向力 $\mathbf{F}_s$ 组成, 并考虑法向力和切向力不通过单元形心引起的力矩 $\mathbf{M}_n$ 和 $\mathbf{M}_s$ 以

图 7 (网络版彩图) 球谐离散单元间的接触判断

Figure 7 (Color online) Contact detection between spherical harmonic elements.

及由单元间发生相对转动时滚动摩擦引起的力矩 $\mathbf{M}_r$ ^[52,53]. 颗粒间法向力 $\mathbf{F}_n$ 包括弹性力 $\mathbf{F}_n^e$ 和黏滞力 $\mathbf{F}_n^d$, 可分别表示为

$$\mathbf{F}_n^e = 4/3E^*\sqrt{R^*}\delta_n^{3/2}, \quad (16)$$

$$\mathbf{F}_n^d = C_n\sqrt{8m^*E^*\sqrt{R^*}\delta_n} \cdot \mathbf{v}_{n,ij}, \quad (17)$$

式中, $E^* = \frac{E}{2(1-\nu^2)}$, $R^* = \frac{R_i \cdot R_j}{R_i + R_j}$, $m^* = \frac{m_i \cdot m_j}{m_i + m_j}$. E , ν 和 m 为颗粒的杨氏模量、泊松比和质量; C_n 和 $\mathbf{v}_{n,ij}$ 分别为法向阻尼系数和颗粒间的法向相对速度; R 为单元的等体积球体半径.

单元间的切向接触力 $\mathbf{F}_t$ 主要有弹性力 $\mathbf{F}_t^e$ 和黏滞力 $\mathbf{F}_t^d$ 组成, 可分别表示为

$$\mathbf{F}_t^e = \mu_s |\mathbf{F}_n^e| \left(1 - \left(1 - \min(\delta_t, \delta_{t,\max}) / \delta_{t,\max} \right)^{3/2} \right) \cdot \delta_t / |\delta_t|, \quad (18)$$

$$\mathbf{F}_t^d = C_t \left(6\mu_s m^* |\mathbf{F}_n^e| \sqrt{1 - \min(\delta_t, \delta_{t,\max}) / \delta_{t,\max}} \right)^{1/2} \cdot \mathbf{v}_{t,ij}, \quad (19)$$

式中, μ_s 为滑动摩擦系数, C_t 为切向黏滞系数, $\mathbf{v}_{t,ij}$ 为单元间切向相对速度. δ_t 为切向重叠量, $\delta_{t,\max} = \mu_s(2-\nu)/2(1-\nu) \cdot \delta_n$.

当单元间发生相对转动时, 由滚动摩擦引起的力矩 $\mathbf{M}_r$ 可表示为^[54]

$$\mathbf{M}_r = \mu_r R_i |\mathbf{F}_n| \hat{\omega}_{ij}, \quad (20)$$

式中, μ_r 为滚动摩擦系数, $\hat{\omega}_{ij}$ 为单位相对转速, 可表

示为 $\hat{\omega}_{ij} = \boldsymbol{\omega}_{ij} / |\boldsymbol{\omega}_{ij}|$.

3 任意形态离散元的数值验证及动力堆积过程分析

采用水平集的计算方法求解球谐单元的接触判断问题, 首先通过单颗粒与刚性壁面的弹性碰撞验证算法的能量守恒, 其次模拟单颗粒的重力下落直至稳定过程分析算法的稳定性. 最后, 通过该方法模拟不同形状颗粒在方形容器中的堆积过程, 并且分析颗粒形状对体积分数和平均配位数的影响.

3.1 颗粒与壁面弹性碰撞的离散元验证

为检验球谐单元接触计算的稳定性, 这里采用4种不同形状的球谐单元在无重力下与刚性壁面进行碰撞模拟. 图8显示4种不同形状的球谐单元, 且单元的等体积球体半径为0.02 m. 其中, 球体的形状参数 N 为0, 三种非规则颗粒的形状参数 N 为10. 零水平集点的数量为 5×10^3 个, 空间离散水平集点的数量为 1×10^5 个. 水平集点的颜色表示该点与颗粒表面的距离, 蓝色表示该点靠近球谐单元的中心, 而红色表示该点远离球谐单元的表面. 颗粒与壁面弹性碰撞中不考虑重力、阻尼和摩擦作用, 其余的离散元计算参数列于表1中.

在水平面处放置较大的平面作为壁面, 颗粒初始与水平面的距离为0.05 m, 初始 z 方向的平动速度为 -3 m/s并且具有随机的初始角度. 图9显示4种颗粒在无重力下与壁面碰撞的模拟过程. 可以发现, 颗粒形状和初始角度显著影响颗粒的动态回弹过程. 当颗粒与壁面碰撞后, 颗粒发生转动并且具有不同的平动速

图 8 (网络版彩图)四种不同形状的球谐单元及相应的离散水平集函数. (a) 球体; (b) 椭球体; (c) 凹形颗粒A; (d) 凹形颗粒B
Figure 8 (Color online) Four spherical harmonic elements with different shapes and corresponding discrete level set functions. (a) Spheres; (b) ellipsoids; (c) concave particles A; (d) concave particles B.

表 1 球谐单元离散元模拟的主要计算参数

Table 1 DEM simulation parameters of spherical harmonic elements

参数	数值
弹性模量 E (GPa)	1.0
泊松比 ν	0.3
颗粒密度 ρ (kg/m^3)	2500.0
颗粒与壁面摩擦系数 μ_{ws}	0.1
颗粒间摩擦系数 μ_s	0.1
法向阻尼系数 C_n	0.1
切向阻尼系数 C_t	0.1
颗粒与壁面阻尼系数 C_{wn}	0.1

度. 图10(a)中球形单元与壁面碰撞过程中转动动能恒为零, 而总能量随时间的变化与平动动能的变化完全重合. 图10(b)–(d)中非球形颗粒与边界碰撞后, 部分平动动能转变为颗粒的转动动能, 但是颗粒的总能量保持不变. 因此, 本文方法能够保证球谐单元在动力过程中的能量守恒, 同时也证明该方法具有很好的稳定性.

3.2 颗粒与壁面非弹性碰撞过程的离散元验证

为进一步验证本文方法的可靠性, 这里采用3种不同形状的球谐单元进行自由下落模拟. 同时, 当形状参数 N 不同时分别计算3种形状颗粒的自由下落过程, 分

析参数 N 引起的单元表面凹凸特性对下落过程的影响. 不同形状颗粒的等体积球体半径为0.02 m, 主要的离散元计算参数列于表1中. 在水平面放置较大的平面作为刚性壁面, 颗粒初始与水平面的距离为0.1 m并具有随机角度, 初始平动速度为0 m/s, 同时绕 x , y 和 z 轴分别施加1 rad/s的初始转动速度. 图11为3种球谐单元在重力作用下自由下落并静止的过程. 这里, 形状参数 N 都为10. 可以看出, 不同形状颗粒具有不同的动力过程. 颗粒与壁面多次相互作用并翻滚, 最终颗粒均保持静止.

当形状参数 $N=5, 10$ 和 20 时, 三种颗粒在下落直至稳定过程的平动动能和转动动能随时间的变化如图12所示. 在初始下落过程中, 不同形状参数 N 的球谐单元具有完全一致的平动动能和转动动能. 当颗粒与壁面发生碰撞时, 不同的参数 N 使得颗粒的平动动能和转动动能存在较大差异. 这主要是由于形状参数 N 改变了单元表面的凹凸特性, 进而改变了接触点的数目及位置. 最终, 所有形状颗粒的动能均趋于0. 由此可见, 本文方法对模拟球谐单元的动力过程具有较好的稳定性.

3.3 颗粒堆积过程的离散元模拟

采用球谐单元构造2000个任意形状颗粒, 在长方体容器中考虑单元的随机位置和角度并在重力作用下实现堆积. 球谐函数方程中形状参数 N 为0时表示球形

图 9 (网络版彩图)无重力下四种球谐单元与边界弹性碰撞的离散元模拟. (a) 球体; (b) 椭球体; (c) 凹形颗粒A; (d) 凹形颗粒B
Figure 9 (Color online) DEM simulations of elastic collision of four spherical harmonic elements with rigid wall without considering gravity. (a) Spheres; (b) ellipsoids; (c) concave particles A; (d) concave particles B.

图 10 (网络版彩图)颗粒与边界弹性碰撞过程中的动能时间曲线. (a) 球体; (b) 椭球体; (c) 凹形颗粒A; (d) 凹形颗粒B

Figure 10 (Color online) The time history of the kinetic energy when a single particle collides with a wall elastically. (a) Spheres; (b) ellipsoids; (c) concave particles A; (d) concave particles B.

图 11 (网络版彩图)三种球谐离散单元重力下落过程的离散元模拟. (a) 椭球体; (b) 凹形颗粒A; (c) 凹形颗粒B

Figure 11 (Color online) DEM simulations of the falling process of three different spherical harmonic elements under gravity. (a) Ellipsoids; (b) concave particles A; (c) concave particles B.

颗粒, 通过改变参数 N 进而得到不同表面凹凸特性的单元形状. 长方体容器的长和宽都为60 mm, 高为

600 mm. 单元的杨氏模量为 1×10^8 Pa, 其余的离散元计算参数列于表1中.

图13显示4种不同形态颗粒材料在不同时刻的下落和堆积过程. 在初始时刻, 所有单元具有随机位置和角度, 并且单元颜色表示单元与容器底面的距离. 蓝色表示单元靠近容器底面, 红色表示单元远离底面. 最终, 所有颗粒保持静止并且形成稳定的颗粒系统. 球体和椭球体的体积分数分别为0.59和0.62, 而两种凹形颗粒的体积分数分别为0.63和0.61. 同时, 球体和椭球体的平均配位数分别为5.8和7.2, 而两种凹形颗粒的平均配位数分别为7.2和7.3. 可以发现, 球形颗粒具有最低的体积分数和配位数. 对于非规则颗粒, 颗粒间具有更紧密的堆积模式和有序的堆积结构, 从而产生较低的空隙率^[55]. 同时, 椭球体的高长宽比和凹形颗粒间的多接触点模式有利于其与周围邻居颗粒相互接触, 进而产生较大的平均配位数. 此外, 下落过程中对任意形态颗粒材料的动能、势能和总能量随时间的变

图 12 (网络版彩图)颗粒下落过程中三种球谐单元的平动动能(左)和转动动能(右)随时间的变化关系. (a), (b) 椭球体; (c), (d) 凹形颗粒A; (e), (f) 凹形颗粒B

Figure 12 (Color online) The time history of translational (left) and rotational (right) kinetic energy of three spherical harmonic elements during the falling process of a particle. (a), (b) Ellipsoids; (c), (d) concave particles A; (e), (f) concave particles B.

化进行统计, 如图14所示. 随着下落时间的增加, 颗粒材料的动能呈现先增加后减小的趋势, 而势能和总能量均呈减小趋势. 最终, 颗粒材料的总动能趋于0, 而总能量与总势能保持一致. 在此基础上, 采用球谐函数构造两种椭球体颗粒, 模拟1000个颗粒的堆积过程并与文献[32]中的试验结果进行对比, 如图15所示. 扁

长形和扁圆形椭球体的三个半轴长分别为 $2.5 \text{ mm} \times 2.5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ 和 $4 \text{ mm} \times 4 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$. 杨氏模量、颗粒密度和摩擦系数分别为 $1.3 \times 10^5 \text{ Pa}$, 1150 kg/m^3 和0.3, 其余的离散元计算参数列于表1中. 离散元模拟中扁长形和扁圆形椭球体的体积分数分别为0.58和0.59; 而试验结果中扁长形和扁圆形椭球体的体积分数分别

图 13 (网络版彩图)不同形态球谐单元的下落和堆积过程. (a) 球体; (b) 椭球体; (c) 凹形颗粒A; (d) 凹形颗粒B

Figure 13 (Color online) Falling and packing processes of spherical harmonic elements with different shapes. (a) Spheres; (b) ellipsoids; (c) concave particles A; (d) concave particles B.

为 0.587 ± 0.011 和 0.596 ± 0.01 . 采用球谐单元模拟的数值结果与试验结果基本一致, 表明本文方法对模拟任意形态颗粒材料的动力过程具有较好的稳定性和有效性.

3.4 零水平集点数目对计算效率的影响

为对比不同零水平集点数目对离散元计算效率的影响, 这里将球谐单元形成的稳定颗粒床继续模拟至 1.2 s (图13(d)), 并将0.6–1.2 s所消耗的实际时间进行统计, 如图16所示. CPU处理器为Intel(R) Xeon(R) Silver 4114, GPU处理器为NVIDIA Quadro GV100. 可

以发现, 零水平集点的数目显著影响离散元模拟的计算效率. 当球谐单元的零水平集点数目分别为 10^3 和 10^4 时, 其模拟0.6 s的实际消耗时间分别为4.8和13.9 h, 并且实际消耗时间随着零水平集点数目的增加而呈线性增加. 这主要是由于单元的所有零水平集点都被代入邻居单元的空间离散水平集函数中, 进而判断该点是否在邻居单元内部. 因此, 在保证离散元模拟的足够精度前提下, 选取较少的零水平集点可实现离散元的较高计算效率. 在后续工作中需考虑零水平集点数目对离散元模拟精度的影响, 进而建立零水平集点数目与球谐单元表面曲率相关的理论模型.

图 14 (网络版彩图)不同形态球谐函数单元在下落和堆积过程中动能、势能和总能量随时间的变化. (a) 球体; (b) 椭球体; (c) 凹形颗粒A; (d) 凹形颗粒B

Figure 14 (Color online) Variations of kinetic energy, potential energy and total energy of spherical harmonic elements with time during falling and packing processes. (a) Spheres; (b) ellipsoids; (c) concave particles A; (d) concave particles B.

图 15 (网络版彩图)椭球体颗粒的堆积. (a) 扁长形椭球体; (b) 扁圆形椭球体

Figure 15 (Color online) Packing of ellipsoidal particles. (a) Oblate ellipsoids; (b) prolate ellipsoids.

3.5 颗粒形态对体积分数和配位数的影响

为对比分析不同表面凹凸特性对颗粒材料堆积过程的影响, 选取球谐函数参数 N 分别为0, 2, 5, 10, 15, 20, 25和30的球体和两种非规则形态颗粒, 如图17所

示. 随着形状参数 N 的增加, 颗粒逐渐从球体变为非规则形态颗粒, 并且颗粒表面的凹凸特性变得更加显著. 对不同形态颗粒床的体积分数和平均配位数进行统计, 如图18所示. 可以发现, 与球形颗粒相比, 非规则颗粒具有较高的体积分数和平均配位数. 随着形状参数

图 16 零水平集点数目对计算效率的影响

Figure 16 Influence of the number of zero level set points on the calculation efficiency.

N 的增加, 颗粒材料的体积分数呈现先增加后减小的趋势, 而平均配位数呈现先增加后趋于稳定。这主要

是由于当形状参数 N 从0变为2时, 颗粒形状从球形变为非规则的凸形颗粒。与球形颗粒相比, 非规则的凸形颗粒具有更大的接触面积, 并且颗粒间的点接触逐步转变为紧密的面接触^[20]。因此, 这种非规则颗粒具有更高的堆积密度和平均配位数。随着形状参数 N 继续增加, 颗粒形状从凸形颗粒转变为表面具有凹凸特性的凹形颗粒。凹形颗粒间的互锁效应阻碍颗粒的相对运动, 并且形成局部团簇结构^[56]。因此, 凹形颗粒填充的颗粒床具有相对更高的空隙率和更低的体积分数。然而, 表面凹凸特性难以直接影响单元周围的邻居数目, 这使得凹形颗粒的平均配位数无显著变化。

3.6 不同颗粒形态的混合堆积

图19显示4种球谐单元混合后生成的稳定颗粒床。在初始时刻, 所有单元具有随机位置、角度和颗粒形状, 并且用颜色表示颗粒形状。最终, 不同形态的颗粒

图 17 (网络版彩图)不同形状参数 N 得到的两组球谐单元. (a) 凹形颗粒A; (b) 凹形颗粒B

Figure 17 (Color online) Two group spherical harmonic elements obtained with different shape parameters N . (a) Concave particles A; (b) concave particles B.

图 18 (网络版彩图)形状参数 N 对颗粒材料的堆积分数和平均配位数的影响. (a) 堆积分数; (b) 平均配位数

Figure 18 (Color online) Effect of the shape parameter N of the spherical harmonic elements on the packing fraction and average coordination number. (a) Packing fraction; (b) average coordination number.

图 19 (网络版彩图)不同形态颗粒的混合堆积过程

Figure 19 (Color online) Mixing and packing process of differently shaped particles.

均匀地混合在颗粒床中, 并且所有颗粒均保持相对静止. 图20显示下落和堆积过程中混合颗粒材料的平动、转动和总能量随时间的变化关系. 可以发现, 混合颗粒的动能随时间的增加呈现先增加后减小, 而势能和总能量均呈减小趋势. 最终, 混合颗粒的总动能趋于0, 而总势能与总能量保持一致. 因此, 本文方法对模拟非规则颗粒材料的混合堆积和动力过程同样具有很好的稳定性.

4 结论

本文在球谐函数方程构造任意颗粒形态中, 考虑了单元表面的凹凸特性及多接触模式的影响, 发展了基于水平集算法的任意形态接触模型. 该方法将球谐单元离散为一系列点组成的零水平集函数和空间离散水平集函数, 进而计算任意形态单元间的多接触点和作用力. 为检验球谐函数离散元方法的有效性, 对单颗粒与壁面的弹性碰撞、单颗粒的自由下落和多颗粒

图 20 (网络版彩图)下落和堆积过程中非规则颗粒材料的动能、势能和总能量随时间的变化

Figure 20 (Color online) Variations of kinetic energy, potential energy and total energy of irregular granular materials with time during falling and packing processes.

的堆积过程进行了离散元模拟. 计算结果表明, 在弹性碰撞时颗粒总动能保持恒定, 而在非弹性碰撞时颗粒的动能逐渐衰减并趋于零. 由此表明基于水平集算法的球谐函数离散元方法能合理地描述非球形颗粒形态并准确计算单元间的多接触作用, 同时本文方法具有较好的稳定性. 在此基础上, 进一步分析了表面凹凸特性对颗粒材料的体积分数和平均配位数的影响. 与非规则颗粒相比, 球形颗粒具有更低的体积分数和平均配位数. 凸形颗粒具有紧密的接触模式和更高的堆积密度, 而凹形颗粒间的互锁效应变得更加显著. 这限制了颗粒间的相对运动, 进而增加了凹形颗粒材料的空隙率并降低了堆积密度. 然而, 这种表面凹凸特性的改变难以直接影响单元周围的邻居数目, 进而对单元的平均配位数无显著影响.

参考文献

- 1 Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 1979, 29: 47–65
- 2 Ji S Y, Sun Q C, Yan Y. Characteristics in quasi-solid-liquid phase transition of granular shear flow and its phase diagram (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2011, 41: 1112–1125 [季顺迎, 孙其诚, 严颖. 颗粒物质剪切流动的类型-液转化特性及相变图的建立. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2011, 41: 1112–1125]
- 3 Liu C Q, Sun Q C, Jin F. Multi-scale modelling for granular materials using material point method and discrete element method (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2017, 47: 070015 [刘传奇, 孙其诚, 金峰. 颗粒介质物质点法与离散元法的多尺度建模. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2017, 47: 070015]
- 4 Zheng N, Zhu H W, Huang D C, et al. The effects of physical factors on the granular hopper flow (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2020,

- 50: 090005 [郑宁, 朱红伟, 黄德财, 等. 漏斗颗粒流的物理因素影响研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 090005]
- 5 Xiu C X, Chu X H. Study on dispersion behavior and band gap in granular materials based on a micromorphic model (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2018, 50: 315–328 [修晨曦, 楚锡华. 基于微形态模型的颗粒材料中波的频散现象研究. 力学学报, 2018, 50: 315–328]
- 6 Lu G, Third J R, Müller C R. Discrete element models for non-spherical particle systems: From theoretical developments to applications. *Chem Eng Sci*, 2015, 127: 425–465
- 7 Chen Q, Yang H, Li R, et al. Measurements of solid volume fraction and granular temperature at granular avalanches in a drum (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2019, 49: 067001 [陈泉, 杨晖, 李然, 等. 转筒颗粒流崩塌前后的颗粒温度和体积分数测量. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 067001]
- 8 Huang D C, Sun G, Hou M Y, et al. The effect of the granule velocity on the dilute-dense flow transition in granular system (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2006, 55: 4754–4759 [黄德财, 孙刚, 厚美瑛, 等. 颗粒速度在颗粒流稀疏流-密集流转变中的作用. 物理学报, 2006, 55: 4754–4759]
- 9 Xia M Y, Xu Y J, Chu X H. A rheology model incorporating scale effect for granular materials and its validations (in Chinese). *Eng Mech*, 2015, 32: 176–183 [夏明铨, 徐远杰, 楚锡华. 一种考虑尺寸效应的颗粒材料流变模型及其验证. 工程力学, 2015, 32: 176–183]
- 10 Höhner D, Wirtz S, Scherer V. A study on the influence of particle shape on the mechanical interactions of granular media in a hopper using the Discrete Element Method. *Powder Tech*, 2015, 278: 286–305
- 11 Cleary P W. The effect of particle shape on simple shear flows. *Powder Tech*, 2008, 179: 144–163
- 12 Xie C, Ma H, Zhao Y. Investigation of modeling non-spherical particles by using spherical discrete element model with rolling friction. *Eng Anal Bound Elem*, 2019, 105: 207–220
- 13 Zhao S, Evans T M, Zhou X. Shear-induced anisotropy of granular materials with rolling resistance and particle shape effects. *Int J Solids Struct*, 2018, 150: 268–281
- 14 Zhong W, Yu A, Liu X, et al. DEM/CFD-DEM modelling of non-spherical particulate systems: Theoretical developments and applications. *Powder Tech*, 2016, 302: 108–152
- 15 Kafashan J, Wiącek J, Abd Rahman N, et al. Two-dimensional particle shapes modelling for DEM simulations in engineering: A review. *Granular Matter*, 2019, 21: 80
- 16 Sun Z Z, Ma G, Zhou W, et al. Effect of particle shape on size effect of crushing strength of rockfill particles (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2021, 42: 1–10 [孙壮壮, 马刚, 周伟, 等. 颗粒形状对堆石颗粒破碎强度尺寸效应的影响. 岩土力学, 2021, 42: 1–10]
- 17 He S Y, Gan J Q, Pinson D, et al. Flow regimes of cohesionless ellipsoidal particles in a rotating drum. *Powder Tech*, 2019, 354: 174–187
- 18 Gong Z, Wu Y, Zhu Z, et al. DEM and dual-probability-Brownian motion scheme for thermal conductivity of multiphase granular materials with densely packed non-spherical particles and soft interphase networks. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2020, 372: 113372
- 19 Xu W, Zhang Y, Jiang J, et al. Thermal conductivity and elastic modulus of 3D porous/fractured media considering percolation. *Int J Eng Sci*, 2021, 161: 103456
- 20 Wang S Q, Ji S Y. Discrete element analysis of buffering capacity of non-spherical granular materials based on super-quadric method (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2018, 67: 094501 [王嗣强, 季顺迎. 基于超二次曲面的颗粒材料缓冲性能离散元分析. 物理学报, 2018, 67: 094501]
- 21 Zhao Y, Xu L, Umbanhowar P B, et al. Discrete element simulation of cylindrical particles using super-ellipsoids. *Particuology*, 2019, 46: 55–66
- 22 Feng C, Li S H, Liu X Y. Semi-spring contact model and its application to failure simulation of slope (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2011, 43: 184–192 [冯春, 李世海, 刘晓宇. 半弹簧接触模型及其在边坡破坏计算中的应用. 力学学报, 2011, 43: 184–192]
- 23 Govender N, Wilke D N, Pizette P, et al. A study of shape non-uniformity and poly-dispersity in hopper discharge of spherical and polyhedral particle systems using the Blaze-DEM GPU code. *Appl Math Computat*, 2018, 319: 318–336
- 24 Feng Y T, Tan Y. On Minkowski difference-based contact detection in discrete/discontinuous modelling of convex polygons/polyhedra. *EC*, 2019, 37: 54–72
- 25 Liu L, Ji S Y. A fast detection algorithm based on the envelope function of dilated polyhedron (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2019, 49: 064601 [刘璐, 季顺迎. 基于扩展多面体包络函数的快速接触搜索算法. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 064601]
- 26 Liu L, Ji S. A new contact detection method for arbitrary dilated polyhedra with potential function in discrete element method. *Int J Numer Methods Eng*, 2020, 121: 5742–5765
- 27 Liu Z, Zhao Y. Multi-super-ellipsoid model for non-spherical particles in DEM simulation. *Powder Tech*, 2020, 361: 190–202
- 28 Khazeni A, Mansourpour Z. Influence of non-spherical shape approximation on DEM simulation accuracy by multi-sphere method. *Powder Tech*, 2018, 332: 265–278

- 29 Zhang B, Regueiro R, Druckrey A, et al. Construction of poly-ellipsoidal grain shapes from SMT imaging on sand, and the development of a new DEM contact detection algorithm. *Eng Comput*, 2018, 35: 733–771
- 30 Meng L, Wang C, Yao X. Non-convex shape effects on the dense random packing properties of assembled rods. *Physica A*, 2018, 490: 212–221
- 31 Zhao S, Zhao J. A poly-superellipsoid-based approach on particle morphology for DEM modeling of granular media. *Int J Numer Anal Methods Geomech*, 2019, 43: 2147–2169
- 32 You Y, Zhao Y. Discrete element modelling of ellipsoidal particles using super-ellipsoids and multi-spheres: A comparative study. *Powder Tech*, 2018, 331: 179–191
- 33 Li C, Peng Y, Zhang P, et al. The contact detection for heart-shaped particles. *Powder Tech*, 2019, 346: 85–96
- 34 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
- 35 Kawamoto R, Andò E, Viggiani G, et al. Level set discrete element method for three-dimensional computations with triaxial case study. *J Mech Phys Solids*, 2016, 91: 1–13
- 36 Feng Y T. An energy-conserving contact theory for discrete element modelling of arbitrarily shaped particles: Basic framework and general contact model. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2021, 373: 113454
- 37 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
- 38 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
- 39 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
- 40 Zhu Z, Chen H, Xu W, et al. Packing simulation of three-dimensional multi-sized star-shaped particles. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2014, 22: 035008
- 41 Xu W X, Sun H G, Chen W, et al. A review of correlative modeling for transport properties, microstructures, and compositions of granular materials in soft matter (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2016, 65: 178101 [许文祥, 孙洪广, 陈文, 等. 软物质系颗粒材料组成、微结构与传输性能之间关联建模综述. 物理学报, 2016, 65: 178101]
- 42 Zhou B, Wang J, Wang H. Three-dimensional sphericity, roundness and fractal dimension of sand particles. *Géotechnique*, 2018, 68: 18–30
- 43 Fu R, Hu X L, Zhou B, et al. A quantitative characterization method of 3D morphology of sand particles (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2018, 39: 483–490 [付茹, 胡新丽, 周博, 等. 砂土颗粒三维形态的定量表征方法. 岩土力学, 2018, 39: 483–490]
- 44 Nie J Y, Li D Q, Cao Z J, et al. Probabilistic characterization and simulation of realistic particle shape based on sphere harmonic representation and Nataf transformation. *Powder Tech*, 2020, 360: 209–220
- 45 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
- 46 Feinauer J, Spettl A, Manke I, et al. Structural characterization of particle systems using spherical harmonics. *Mater Charact*, 2015, 106: 123–133
- 47 Radvilaitė U, Ramírez-Gómez Á, Kačianauskas R. Determining the shape of agricultural materials using spherical harmonics. *Comput Electron Agr*, 2016, 128: 160–171
- 48 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
- 49 Li L, Marteau E, Andrade J E. Capturing the inter-particle force distribution in granular material using LS-DEM. *Granular Matter*, 2019, 21: 43
- 50 Harmon J M, Arthur D, Andrade J E. Level set splitting in DEM for modeling breakage mechanics. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2020, 365: 112961
- 51 Portal R, Dias J, de Sousa L. Contact detection between convex superquadric surfaces. *Arch Mech Eng*, 2010, 57: 165–186
- 52 Zhu H P, Zhou Z Y, Yang R Y, et al. Discrete particle simulation of particulate systems: Theoretical developments. *Chem Eng Sci*, 2007, 62: 3378–3396
- 53 Zhu H P, Zhou Z Y, Yang R Y, et al. Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings. *Chem Eng Sci*, 2008, 63: 5728–5770
- 54 Dong K, Wang C, Yu A. A novel method based on orientation discretization for discrete element modeling of non-spherical particles. *Chem Eng*

Sci, 2015, 126: 500–516

- 55 Wang S, Yan Y, Ji S. Transition of granular flow patterns in a conical hopper based on superquadric DEM simulations. *Granular Matter*, 2020, 22: 79
- 56 Rakotonirina A D, Delenne J Y, Radjai F, et al. Grains3D, a flexible DEM approach for particles of arbitrary convex shape—Part III: Extension to non-convex particles modelled as glued convex particles. *Comp Part Mech*, 2019, 6: 55–84

A discrete element method with spherical harmonics for irregular granular materials based on the level set contact algorithm

WANG SiQiang, QIAO Ting, ZHANG LinFeng & JI ShunYing*

State Key Laboratory of Structure Analysis of Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China

To calculate the mechanical properties of irregular granular materials in natural or industrial fields, a discrete element model based on spherical harmonics that can describe arbitrarily shaped particles is developed. Considering the uneven surfaces and multiple contact points of the spherical harmonic elements, a contact model of arbitrary shapes based on the level set algorithm is developed to calculate the contact direction and overlap between the elements. In this model, spherical harmonic elements with different shapes are discretized into a zero level set function and a discrete spatial-level set function composed of a series of points. In addition, the contact detection between elements is transformed into a solution of two level set functions. All zero level set points are brought into the spatial-level set function of the neighboring element, and the multiple contact points and forces between the two neighboring elements are determined via trilinear interpolation. The elastic collision of a single particle with a wall, the free fall of a particle, and the packing process of multiple particles are simulated using the discrete element method, and the evolution of the translational and rotational kinetic energy of particles over time is studied to validate the discrete element model of the spherical harmonic function based on the level set method. The results show that the discrete element model of spherical harmonic functions based on the level set method can be used to calculate the contact forces between elements. Meanwhile, the energy of the granular system remains constant during the elastic collision, and the system energy decays during the inelastic collision until the kinetic energy approaches zero. Based on the aforementioned method, the influence of uneven surfaces on the packing fraction and average coordination number of granular materials is analyzed, and an effective discrete element model is provided for the numerical simulation of irregular granular materials.

discrete element method, arbitrary shape, granular materials, spherical harmonic function, level set method, multiple contact points

PACS: 45.70.Vn, 47.57.Gc, 83.80.Fg

doi: [10.1360/SSPMA-2021-0030](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2021-0030)