基于扩展多面体包络函数的快速接触搜索算法

刘璐, 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 116023

*联系人, E-mail: jisy@dlut.edu.cn

收稿日期: 2018-06-29; 接受日期: 2018-10-30; 网络出版日期: 2019-02-25

国家自然科学基金(编号: 11772085, 41576179)和国家重点研发计划(编号: 2016YCF1401505)资助项目

摘要 扩展多面体是由基本多面体和扩展球体通过Minkowski Sum方法构造生成, 其同时具有多面体和球体的几何性质, 可用于复杂形态颗粒的离散元模拟. 为提高扩展多面体单元的接触搜索效率, 本文采用球面函数与二阶多面体扩展函数加权求和的方法形成扩展多面体的包络函数, 将扩展多面体的接触问题转化为两个包络函数之间的优化问题. 通过拉格朗日乘子算法可求解该优化问题进而确定两个包络函数之间的接触中心点. 基于该接触中心点可快速判断多面体单元间的最近点以及两个接触颗粒的接触法向和接触重叠量, 从而避免了以往接触判断中逐个几何特征搜索判断导致的算法复杂性, 有效地提高了扩展多面体离散元的接触搜索效率. 综合以上扩展多面体单元的快速接触搜索方法和非线性接触模型, 本文发展了基于扩展多面体的非规则离散元方法. 通过不同形态单个颗粒下落过程的模拟, 研究了包络函数中光滑度系数对结果的影响. 分析表明光滑度系数在0.0001–0.1范围内对计算结果影响较小, 且光滑度系数越小计算结果越趋近于一致, 说明本文方法具有良好的稳定性. 通过多颗粒在方形平底漏斗中卸料过程的离散元模拟, 与已有的试验和数值模拟结果对比分析了漏斗中的剩余颗粒比例, 验证了本文提出的高效接触搜索算法和非线性接触模型的可靠性.

关键词 离散元方法, 扩展多面体单元, 快速接触搜索, 包络函数方法

PACS: 45.70.-n, 83.80.Fg, 81.70.Bt

1 引言

离散元方法在岩土工程、地质灾害演变、冰工程以及颗粒物理等领域具有广泛的应用^[1–4]. 球体单元具有接触搜索简单、接触力模型发展成熟等优点, 在离散元中被大量采用^[5–7]. 以球体作为单元几何表征的近场动力学方法也发展迅速, 其在脆性材料的损伤及其动力破碎等过程的数值模拟中取得了良好效果^[8–12].

为避免球体单元形状单一且难以精确描述复杂颗粒形态的缺点, 离散元中也经常采用如多面体^[13–15]、扩展多面体^[16]和超二次曲面^[17–19]等非球形单元形式^[20]. 其中, 多面体单元的几何形态与不规则的岩石、沙土等形态类似, 在非规则单元中具有明显的优势. 此外, 多面体单元也可拼接成无缝隙的几何结构用于连续体的接触和断裂等力学分析, 在不连续变形分析(Discontinuous Deformation Analysis, DDA)^[21,22]、连续-非连续单

引用格式: 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

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, doi: [10.1360/SSPMA2018-00241](https://doi.org/10.1360/SSPMA2018-00241)

元方法(Continuous-Discontinuous Element Method, CDEM)^[23]和多体动力学(Multi-Body System, MBS)^[24]等相关研究中应用广泛.

多面体单元的接触搜索极为耗时, 严重制约了多面体单元在大规模离散元模拟中的应用. 接触搜索问题的核心是求解两个相互接触单元之间的接触点和接触法向, 并确定相应的接触重叠量. 在多面体的接触搜索方法中, 对多面体表面几何特征逐一判断的直接法效率较低, 因而被很少采用. 根据多面体的几何特征, 若一个平面满足两个多面体到该平面的最小距离之和最小, 则称该平面为公共面(Common Plane, CP). 公共面法通过给定的初始点和初始法向, 经过若干次迭代得到两个多面体的公共面, 进而可求解多面体的接触搜索问题^[25]. 但该方法严重依赖于初始点和初始法向的选取, 且结果容易出现“接触跳跃”等奇异现象. 在公共面法的基础上又发展了快速公共面法(Fast Common Plane, FCP)^[26]和最短链接法(Shortest Link Method, SLM)^[27]. 该两种方法避免了传统公共面法中过多的迭代运算, 仅通过纯几何计算即可精确求得公共面的位置, 是目前重要的多面体搜索方法. 然而, 这些方法需要完整严格的多面体外轮廓几何特征信息及它们之间的组成关系. 如何构建可靠的数据结构实现多面体几何信息的高效访问是这类搜索方法的关键问题.

由于两个接触多面体之间必存在公共部分且该部分也为多面体, 那么可定义该公共多面体的边为侵入边. 侵入边法即是通过多面体之间的几何运算求得侵入边, 进而判断接触类型并求解接触问题^[28]. 在此基础上, 切割体法采用面切割边来获得两个多面体之间的公共部分, 同时引入了公共面的计算, 减少了漏判和误判的情况^[29]. 通过简化多面体接触类型并引入角点运动探针, 可在接触搜索中考虑多面体的运动趋势, 提高了接触搜索的合理性^[30]. 缩进边法是根据多面体的几何形状对每条边进行向内的缩进, 形成一个“缓冲”层, 在此基础上通过几何判断具体的接触类型^[31]. 类似的“缩进”或“扩展”思想也被用在其他类型的几何接触判断中^[32,33]. 此外, 通过在相互接触多面体的公共部分上定义“接触能”(Contact Energy), 可优化确定多面体之间的接触法向并直接计算接触力, 具有一定的理论基础^[34,35]. 以上方法都需通过计算几何方法确定公共接触部分, 甚至需要详细判断具体的接触模式, 计算过程较为繁琐.

为避免复杂的几何运算, 发展了基于空间像素的单元离散化方法(Discretized Method)^[36,37]. 这种方法将单元表面离散化为一系列像素点, 将单元之间的接触搜索转化为固定像素点之间的距离判断, 极大降低了几何计算的复杂度. 该方法在理论上可适用于任意形状的单元, 具有很强的适应性. 将该方法与水平集(Level Set)方法相结合可有效解决接触搜索问题^[38,39]. 但是储存每个像素点需消耗巨大的计算机内存空间, 随之产生的访存效率问题也严重限制了该方法的计算规模. 针对这一问题, 定向离散数据库方法(Orientation Discretization Database Solution, ODDS)在单元离散化方法的基础上根据单元之间的接触形式预先建立接触数据库, 在实际离散元计算时即可抛弃单元离散化的存储信息, 仅采用接触数据库即可判断单元之间的接触^[40]. 然而, 对于具有多种或随机颗粒形态的离散系统模拟, 两两颗粒间的接触数据库建立较为繁杂, 降低了该方法适用的广泛性.

基于Minkowski Sum理论可将基本的几何单元与球体单元进行空间叠加从而构成扩展单元^[41]. 扩展圆盘单元即是圆面与球体经过Minkowski Sum构成的单元, 其被有效地用于碎冰堆积特性和碎冰与结构相互作用的离散元分析中^[42-44]. 类似地, 采用纯多面体和球体的Minkowski Sum可构成扩展多面体单元^[45,46]. 据此发展了基于扩展多面体的黏结和破碎模型^[47]以及DEM-LBM (Lattice Boltzmann Method)的流固耦合模型^[48], 并被用于脆性材料的水力压裂分析中^[49,50]. 由于扩展多面体单元将尖锐的角点和棱边转化为光滑的球面和圆柱面, 在接触搜索中避免了纯多面体难以直接通过几何特征判断接触的缺点, 提高了接触搜索效率和稳定性; 还可采用精确化的Hertz接触模型计算接触力, 提高计算的准确性^[51]. 此外, 根据类似的“扩展单元”方法, 采用多面体扩展函数可构造与扩展多面体相似的颗粒形状, 并通过函数表达式之间的优化问题求解接触搜索问题^[52,53]. 通过优化问题求解接触可有效避免复杂的几何运算, 也可避免多个接触点导致的物理失真, 在实际计算中具有较高的执行效率^[54,55].

本文基于Minkowski Sum方法构造了扩展多面体单元, 通过定义扩展多面体的包络函数将其接触搜索中的几何判断转变为求解包络函数之间的优化问题; 采用该接触搜索方法和非线性接触模型发展了基于扩展多面体单元的离散元方法. 通过不同形态扩展多面

体的单颗粒下落和平底漏斗卸料过程的离散元模拟验证该方法的稳定性和准确性.

2 扩展多面体单元及其包络函数

扩展多面体单元是通过Minkowski Sum理论构造的非规则形态颗粒, 其同时具有多面体和球体的部分特征. 以球面函数与二阶多面体扩展函数的加权求和形式定义扩展多面体的包络函数. 该函数可进一步用于扩展多面体单元的接触搜索.

2.1 扩展多面体

对于空间任意两个几何体 A 和 B , 其Minkowski Sum可定义为^[56,57]

$$A \oplus B = \{\mathbf{x} + \mathbf{y} \mid \mathbf{x} \in A, \mathbf{y} \in B\}, \quad (1)$$

式中, $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 分别为 A 和 B 内的三维坐标点. 在扩展多面体构造中, 将两个空间体 A 和 B 分别设定为基本多面体和扩展球体. 当一个任意多面体与球体单元进行Minkowski Sum叠加后可形成具有光滑表面的扩展多面体, 如图1所示. 基于Minkowski Sum理论的扩展多面体将多面体的角点和棱边转化为球面和圆柱面, 使其同时具有多面体和球体的部分特征. 根据扩展多面体的几何特征, 可将角点和棱边的接触搜索转化为相应的球面和圆柱面搜索. 该方法明显比纯多面体之间的几何接触判断效率高^[58].

2.2 扩展多面体单元的包络函数

根据扩展多面体单元的Minkowski Sum定义, 直接描述扩展多面体表面形态的函数难以确定. 这里采用等效函数定义颗粒形态, 其与扩展多面体具有相似的特性. 该二阶多面体扩展函数可写作:

$$g(x, y, z) = \sum_{i=1}^N \langle a_i x + b_i y + c_i z - d_i \rangle^2 - r^2, \quad (2)$$

式中, a_i , b_i 和 c_i 分别表示多面体第 i 个面单位外法向的3个分量; d_i 是第 i 个面到坐标原点的距离; r 是函数的扩展半径; $\langle \cdot \rangle$ 是Macaulay括号, 且有 $\langle x \rangle = x, x > 0$; $\langle x \rangle = 0, x \leq 0$. 实际上, 式(2)中Macaulay括号项即为点 (x, y, z) 到某个面的距离. 上式可近似描述扩展多面体的颗粒形态, 如图2(a)所示.

图1 (网络版彩图)基于Minkowski Sum的扩展多面体
Figure 1 (Color online) Dilated polyhedron based on the Minkowski Sum.

图2 (网络版彩图)二阶多面体扩展函数定义的几何形态.
(a) 正四面体、正六面体和正八面体形式; (b) 二维条件下角点处二阶多面体扩展单元与扩展多面体的差异

Figure 2 (Color online) Geometric shape based on the second-order dilated function of polyhedron. (a) Tetrahedron, hexahedron and octahedron; (b) the difference between the dilated polyhedron and the second-order dilated function of polyhedron at corner in 2D.

将二阶多面体扩展函数定义的几何形态称为二阶多面体扩展单元. 该单元与扩展多面体在几何形态上具有较高的相似度, 可作为扩展多面体的替代形式, 但两者在角点和棱边处存在一定差异. 为更清晰地描述该颗粒形态, 这里采用二维单元进行说明. 二维条件下两种颗粒在角点处的形态差异如图2(b)所示. 弧AB和弧CD分别为扩展多面体和二阶多面体扩展单元在角点 $O(x_0, y_0)$ 处的表面, 显然弧AB为圆弧; OE和OF是角点处的两条相邻边, 其对应的外法向分别为 $\mathbf{n}_1(n_1^x, n_1^y)$ 和 $\mathbf{n}_2(n_2^x, n_2^y)$. 若 $P(x, y)$ 为弧CD上的任意一点, 则根据式(2)可得

$$\begin{aligned} g(P) &= d_1^2 + d_2^2 - r^2 \\ &= (\mathbf{OP} \cdot \mathbf{n}_1)^2 + (\mathbf{OP} \cdot \mathbf{n}_2)^2 - r^2 \\ &= [(x - x_0)n_1^x + (y - y_0)n_1^y]^2 \\ &\quad + [(x - x_0)n_2^x + (y - y_0)n_2^y]^2 - r^2, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, d_1 和 d_2 分别为点P到两条边的距离. 上式可整理为椭圆的一般方程, 类似可进一步证明三维条件下通过式(2)定义的二阶多面体扩展单元在角点和棱边处分别为椭球面和椭圆柱面. 立方体或长方体是该单元的特殊形态, 且与基于Minkowski Sum的扩展多面体完全一致.

通过二阶多面体扩展函数与球面函数加权求和的函数形式可构造具有多面体特征的光滑颗粒^[55], 即其表面为光滑曲面且无尖锐棱角的几何形态, 其可写作:

$$f(x, y, z) = (1 - k) \left(\sum_{i=1}^N \langle a_i x + b_i y + c_i z - d_i \rangle^2 - r^2 \right) + k(x^2 + y^2 + z^2 - R^2), \quad (4)$$

式中, k 为颗粒光滑度系数; R 为球面函数的半径. 上式也可写作归一化形式, 即

$$f(x, y, z) = (1 - k) \left(\sum_{i=1}^N \frac{\langle a_i x + b_i y + c_i z - d_i \rangle^2}{r^2} - 1 \right) + k \left(\frac{x^2 + y^2 + z^2}{R^2} - 1 \right). \quad (5)$$

如图3所示边长为 a 的正四面体和球体组合构成的函数在不同加权系数下的几何形态, 其中扩展半径 $r=0.1a$, 球体半径 $R=1.5a$. 可以看出 k 越小其形态越接近于二阶多面体扩展颗粒, 当 $k=0.001$ 时已基本同二阶多面体扩展形态相同.

图3 扩展多面体的包络函数随参数 k 的变化. (a) $k=1.0$; (b) $k=0.5$; (c) $k=0.1$; (d) $k=0.05$; (e) $k=0.01$; (f) $k=0.001$

Figure 3 The envelope function of the dilated polyhedron under different parameter k . (a) $k=1.0$; (b) $k=0.5$; (c) $k=0.1$; (d) $k=0.05$; (e) $k=0.01$; (f) $k=0.001$.

3 基于包络函数的扩展多面体接触模型

当颗粒的光滑度系数 k 较小时, 取式(5)作为扩展多面体的包络函数. 由此可通过两个函数的优化问题求解接触中心点并最终确定接触点, 进而求得接触重叠量和接触法向.

3.1 接触搜索的优化问题

实际上, 式(5)定义的包络函数满足“Potential Particles”的形态特征^[52,53]. 该颗粒形态满足以下条件: 当 $f(x, y, z)=0$ 时, (x, y, z) 在颗粒表面; 当 $f(x, y, z)<0$ 时, (x, y, z) 在颗粒内部; 当 $f(x, y, z)>0$ 时, (x, y, z) 在颗粒外部; 对任意实数 $C \in \mathbb{R}$, 由 $f(x, y, z)=C$ 定义的颗粒均为严格凸型颗粒, 即颗粒表面不存在内凹或平面形状; $f(x, y, z)$ 存在连续的一阶和二阶导数.

对于具有以上特征的颗粒, 可将颗粒之间的搜索问题变为两个函数之间的优化问题, 其可写作:

$$\min(f_A + f_B), \text{ s.t. } f_A - f_B = 0, \quad (6)$$

式中, f_A 和 f_B 分别是两个颗粒的形态方程, 其由式(5)定义. 如图4所示, 两个颗粒接触时满足上式的解 C_{AB} 同时位于两个包络函数内部, 其可被视为接触重叠区域的接触中心点. 这里需要注意的是, 由于式(2)所定义的二阶多面体扩展函数不满足严格凸条件, 所以不可用于该优化方法求解接触问题.

由于包络函数定义在以颗粒形心为坐标原点的局部坐标系下, 在求解接触问题之前需将局部坐标转换到全局坐标下进行. 局部和全局坐标之间的转换可采用四元数方法以避免采用欧拉角时产生的奇异^[20]. 若全局坐标系下两颗粒的形心分别为 $\mathbf{x}_{OA}$ 和 $\mathbf{x}_{OB}$, 其局部和全局坐标的转换矩阵为 $\mathbf{Q}_A$ 和 $\mathbf{Q}_B$. 对于全局坐标系下的点 $\mathbf{X}$, 其在两局部坐标系下的坐标 $\mathbf{x}_A$ 和 $\mathbf{x}_B$ 可表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_A \mathbf{x}_A &= \mathbf{X} - \mathbf{x}_{OA}, \\ \mathbf{Q}_B \mathbf{x}_B &= \mathbf{X} - \mathbf{x}_{OB}. \end{aligned} \quad (7)$$

根据上式可将局部坐标转化到整体坐标下, 并用于求解优化问题(6). 采用拉格朗日乘子法构造拉格朗日函数如下:

$$L(\mathbf{X}, \lambda) = f_A + f_B + \lambda(f_A - f_B). \quad (8)$$

由 $\nabla L(\mathbf{X}, \lambda) = 0$ 可将式(6)转化为四元非线性方程组, 即

图 4 (网络版彩图)包络函数之间的接触优化问题

Figure 4 (Color online) The optimization problem between envelope functions.

$$\begin{cases} (1+\lambda)\nabla f_A + (1-\lambda)\nabla f_B = 0, \\ f_A - f_B = 0. \end{cases} \quad (9)$$

采用牛顿迭代法求解该方程组. 假设 $\mathbf{Z}=(x, y, z, \lambda)$, 将式(9)等号左侧表示为 4×1 的向量 $\Omega(\mathbf{Z})$, 则该四元方程组的牛顿法迭代过程可表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{Z}^n) \cdot \Delta \mathbf{Z}^n &= \Omega(\mathbf{Z}^n), \\ \mathbf{Z}^{n+1} &= \mathbf{Z}^n + \Delta \mathbf{Z}^n, \end{aligned} \quad (10)$$

式中, $\mathbf{J}(\mathbf{Z}^n)$ 是四元方程组(9)的雅可比矩阵; n 表示迭代步. 上式需迭代至方程的范数满足设定的误差限 ε ($\varepsilon \ll 1$), 即 $\|\Omega(\mathbf{Z}^n)\| < \varepsilon$.

在牛顿迭代法中, 初始点的选择会极大地影响迭代的收敛效率. 一般采用等效球体的接触点作为初始点, 而初始的 λ 取接近于 0 的值, 如 1×10^{-6} . 由此, 等效球体的接触点 $\mathbf{X}_0$ 可表示为

$$\mathbf{X}_0 = \frac{R_B \mathbf{x}_{OA} + R_A \mathbf{x}_{OB}}{R_A + R_B}, \quad (11)$$

式中, R_A 和 R_B 是等效球体的半径, 可取为等体积球体半径、最小包围球半径或多面体角点到形心的平均距离. 通常该初始点距离接触中心点较远, 收敛到最终解所需的迭代步数较多, 甚至会出现不收敛的情况. 因此, 先采用 $\mathbf{X}_0$ 作为初始点通过牛顿法迭代若干步, 同时将参数 k 由 1.0 渐变至较小值, 使包络函数的形状从球体逐渐变化到最终的多面体形态, 如图 5 所示. 该渐变过程可将初始点逼近最终解附近的 $\mathbf{X}'_0$. 然后采用 $\mathbf{X}'_0$ 作为牛顿法迭代的初始点, 从而提高迭代的收敛效率.

采用高阶收敛格式可加速收敛并减少迭代步数^[59,60], 但实际增加了单个迭代步的计算量, 整体的计算效率并没有显著提升. 如将式(5)右侧第一项中的系数变为 3 次, 可增加其二阶导数的光滑度, 从而提高迭

图 5 (网络版彩图)通过光滑度系数 k 渐变的方法计算迭代初始点

Figure 5 (Color online) Calculating the initial point by changing the smoothness parameter k gradually.

代的收敛性^[52]. 此外, 还可在迭代过程中增加稳定性系数^[61], 即在式(10)的增量方程中加入系数 α 使该增量方程变为

$$\mathbf{Z}^{n+1} = \mathbf{Z}^n + \alpha \Delta \mathbf{Z}^n. \quad (12)$$

这里将 α 逐渐减小直至满足范数减小条件, 即: $\|\Omega(\mathbf{Z}^{n+1})\| < \|\Omega(\mathbf{Z}^n)\|$, 从而保证每一步都使方程趋近于 0, 提高迭代的稳定性.

在具体的扩展多面体单元接触搜索中, 先通过球体包围盒的网格搜索^[2,62]和 SAA (Separation Axis Algorithm) 方法^[63]确定可能发生接触的接触对, 提高后续优化问题求解的稳定性和效率.

3.2 接触重叠量和接触法向

当扩展多面体单元的光滑度系数 k 很小时, 尽管包络函数已十分接近二阶多面体扩展函数, 但直接采用二阶多面体扩展函数计算所得的接触法向与扩展多面体依然存在差异. 另外, 由于离散元的计算步长非常小, 形状上的微小差别容易使接触重叠量在接触模式的变化过程中产生突变. 因此, 先通过迭代搜索基本多面体上距接触中心点最近的点来计算两个颗粒上的接触点, 进而确定接触重叠量和接触法向.

扩展多面体 A 和 B 的接触重叠量 δ 可写作:

$$\delta = \min\|\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B\| - (r_A + r_B), \quad (13)$$

式中, $\mathbf{x}_A$ 和 $\mathbf{x}_B$ 分别是扩展多面体内部基本多面体表面上的点; r_A 和 r_B 是扩展半径. 显然, 接触重叠量与两个基本多面体上相距最近的点直接相关, 而两单元间的接触法向则可确定为这两个相距最近点的连线方向. 如图 6 所示, 单元 A 和 B 的接触中心点为 C_{AB} , 搜索单元 A 上距离 C_{AB} 最近的点 A_1 , 再搜索单元 B 上距离 A_1 最近

图 6 (网络版彩图)在基本多面体上进行迭代确定最终接触点

Figure 6 (Color online) The determination of terminal contact points on basic polyhedrons by iteration.

的点 B_1 , 并计算 A_1 和 B_1 之间的距离 $\Delta = \|A_1 - B_1\|$. 以此类推, 经过若干次搜索, 搜索的过程为: $C_{AB} \rightarrow A_1 \rightarrow B_1 \rightarrow \dots \rightarrow B_3 \rightarrow A_4 \rightarrow B_3$. 直到 Δ 不再发生变化或变化非常小, 则可最终确定 A_4 和 B_3 为两个基本多面体上相距最近的点, 进而可计算接触重叠量 $\delta = \min\|A_4 - B_3\| - (r_A + r_B)$. 同时, A_4 和 B_3 之间的连线方向即为两单元的接触法向, 即 $\mathbf{n}_{AB} = \text{norm}(A_4 - B_3)$.

在实际计算中, 可通过分别计算点到多面体的角点、棱和平面的距离并取最小值得到多面体上到该点距离最近的点. 通常设定有限的迭代步数上限以保证计算稳定性, 最后取距离最小值对应的接触点作为最终解. 由于该计算并没有复杂的判断过程, 且接触中心点 C_{AB} 一般距这两个最近点十分接近, 所以该迭代过程并不会耗费过多的计算量.

3.3 扩展多面体单元的非线性接触模型

为简化接触力计算, 采用非线性的接触力模型简化计算扩展多面体之间的接触力^[40,51,64]. 该模型基于等效的弹性模量 E^* 和等效颗粒半径 R^* , 可写作:

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_A^2}{E_A} + \frac{1 - \nu_B^2}{E_B}, \quad (14)$$

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_A} + \frac{1}{R_B}, \quad (15)$$

式中, E_A 和 E_B 分别是两个单元的弹性模量; ν_A 和 ν_B 分别是两个单元的泊松比. 法向接触力可表示为法向弹性和法向黏滞力之和, 即

$$F_n = F_n^e + F_n^v = k_n \delta_n^{\frac{3}{2}} + c_n \sqrt{\delta_n} \dot{\delta}_n, \quad (16)$$

式中, k_n 为法向接触刚度, $k_n = 4E^* \sqrt{R^*} / 3$; δ_n 是两颗粒

的法向接触重叠量; $\dot{\delta}_n$ 是法向相对速度; c_n 是法向阻尼系数, 其可写作:

$$c_n = \zeta_n \sqrt{m_{AB} k_n}, \quad (17)$$

式中, m_{AB} 为等效质量, 且有 $1/m_{AB} = 1/m_A + 1/m_B$; ζ_n 是无量纲阻尼系数, 其可写作:

$$\zeta_n = \frac{-\ln e}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e}}, \quad (18)$$

式中, e 可参考碰撞速度下颗粒的回弹系数^[65].

切向接触力与切向接触重叠量和摩擦力有关, 一般切向力最大不可超过摩擦力. 这里可采用简化的方式避免与摩擦力的比较判断^[40,64]. 其中切向弹性力 F_t^e 可写作:

$$F_t^e = \left[1 - \left(1 - \frac{\delta_t}{\delta_t^{\max}} \right)^{\frac{3}{2}} \right], \quad (19)$$

式中, μ 是摩擦系数; δ_t 是切向重叠量, 一般根据相对切向速度并采用逐步叠加的方法累计计算切向重叠量; $\delta_t^{\max}$ 是最大的切向重叠量, 其主要由摩擦系数和法向重叠量决定, 且 $\delta_t^{\max} = \mu \delta_n (2 - \nu) / (2 - 2\nu)$, ν 为泊松比.

扩展多面体单元间的切向黏滞力 F_t^v 可写作:

$$F_t^v = c_t \sqrt{\frac{6\mu m_{AB} |F_n| \sqrt{1 - \delta_t / \delta_t^{\max}}}{\delta_t^{\max}}} \dot{\delta}_t, \quad (20)$$

式中, $\dot{\delta}_t$ 是切向相对速度; c_t 是切向阻尼系数, 这里取 $c_t = c_n / (2(1 + \nu))$. 该切向力计算方法避免了每个时间步中与摩擦力的大小对比, 提高了计算效率.

另外, 由于本文中的接触搜索为单点接触, 即相互接触的扩展多面体单元之间只有一个接触力, 因而以上接触力模型无法消除绕接触法向的非物理转动. 为避免该现象, 在单元的转动方程中引入绕接触法向的滚动摩擦力矩 $\mathbf{M}_r$ ^[40]:

$$\mathbf{M}_r = -\mu_r R^* |F_n| \boldsymbol{\omega}_{AB}^n, \quad (21)$$

式中, μ_r 是滚动摩擦系数; $\boldsymbol{\omega}_{AB}^n$ 是法向相对转速.

4 数值算例与分析

采用基于包络函数的搜索方法求解扩展多面体的接触搜索问题, 首先通过单颗粒的重力下落直至稳定

过程分析方法的稳定性以及参数的敏感性. 为进一步验证方法的合理性, 采用该方法分析不同形状颗粒在方形平底漏斗中的卸料过程, 并与已有试验和其他离散元方法的模拟结果进行对比验证.

4.1 单颗粒重力下落过程的离散元分析

为验证扩展多面体接触计算的稳定性, 这里采用3种不同形状的扩展多面体颗粒进行自由下落模拟. 同时, 当光滑度系数 k 不同时分别计算3种形状颗粒的自由下落过程, 验证方法对 k 的敏感性. 如图7为采用的3种不同形态颗粒: 正四面体、正六面体和正八面体, 其中 $k=0.1, 0.01, 0.001$ 和 0.0001 . 这3种形态颗粒的几何和

物理参数列于表1中.

在水平面处放置较大的长方体作为边界, 颗粒初始与水平面的距离为 0.05 m , 初始平动速度为 0 并施加随机的初始转速. 由于边界单元一般较大, 如果采用颗粒与边界的包络球接触点作为初始点可能导致迭代收敛较慢. 因此, 可采用边界单元上与颗粒接触的平面与颗粒包络球之间的接触点作为初始点进行计算. 此外, 还可将边界单元的光滑度系数 k 设定为 0 以提高计算精度.

图8为当光滑度系数 $k=0.001$ 时3种颗粒在重力作用下的自由下落的模拟过程. 可以看出, 颗粒在重力作用下与水平边界相互作用, 经过若干次碰撞并翻滚一

图 7 (网络版彩图)三种不同形状的扩展多面体颗粒及不同参数 k 时的包络函数. (a) 正四面体; (b) 正六面体; (c) 正八面体

Figure 7 (Color online) Three different shaped dilated polyhedral particles and their envelope function under different parameter k . (a) Tetrahedron; (b) hexahedron; (c) octahedron.

表 1 三种颗粒的主要几何和物理参数

Table 1 The main geometric and physical parameters of the three kinds of particles

参数	符号 (单位)	正四面体	正六面体	正八面体
边长	a (mm)	21.2	16.1	17.8
扩展半径	r (mm)	2.12	1.61	1.78
密度	ρ (kg/m^3)	1522	1455	1469
弹性模量	E (GPa)	—	4.76	—
泊松比	ν	—	0.4	—
回弹系数	e	—	0.55	—
滑动摩擦系数	μ	—	0.39	—
滚动摩擦系数	μ_r	—	0.01	—

定距离后达到稳定. 当 $k=0.1, 0.01, 0.001$ 和 0.0001 时, 三种颗粒在下落直至稳定过程的速度和角速度变化如图9所示. 在初始时刻, 即颗粒与边界碰撞翻滚时, 不同 k 所对应的颗粒速度和角速度完全一致; 当颗粒与边界的作用趋于稳定时, 不同的 k 使颗粒速度和角速度存在差异. 这主要由于颗粒稳定时, 其与边界的接触类型主要为面-面接触, 在接触点的搜索过程中需要经过较多

的迭代步. 而当 k 较大时, 包络函数与扩展多面体差异较大, 导致计算得到的接触中心点距最终接触点较远, 在有限的迭代步内搜索接触点时存在差异, 且 k 越大差异越大. 另外, k 分别为 0.1 和 0.01 时的计算结果与 k 为 0.001 和 0.0001 时的结果差别较大, 而 k 为 0.001 和 0.0001 时的结果较为接近. 这说明当 k 取较小值时, 颗粒形态已逼近于多面体单元, 其计算结果趋于一致. 由此可

图8 (网络版彩图)扩展多面体颗粒重力下落过程的离散元模拟 ($k=0.001$). (a) 正四面体, $t=0.10, 0.15, 0.20$ 和 0.30 s; (b) 正六面体, $t=0.1, 0.2, 0.3$ 和 0.5 s; (c) 正八面体, $t=0.1, 0.2, 0.5$ 和 0.9 s

Figure 8 (Color online) The free fall with gravity by the proposed DEM ($k=0.001$). (a) Tetrahedron, $t=0.10, 0.15, 0.20$ and 0.30 s; (b) hexahedron, $t=0.1, 0.2, 0.3$ and 0.5 s; (c) octahedron, $t=0.1, 0.2, 0.5$ and 0.9 s.

图9 (网络版彩图)颗粒下落过程中的速度(上)和角速度(下)时间曲线. (a), (b) 正四面体; (c), (d) 正六面体; (e), (f) 正八面体

Figure 9 (Color online) The time history of translation (up) and rotation (down) speed during the particle falls. (a), (b) Tetrahedron; (c), (d) hexahedron; (e), (f) octahedron.

见, 本文方法对模拟扩展多面体单元的动力过程具有很好的稳定性.

4.2 漏斗卸料过程的离散元分析

为进一步验证本文方法的可靠性, 下面采用扩展多面体单元模拟颗粒材料在方形平底漏斗中的卸料过程. 漏斗内部有效尺寸的长宽高分别为0.4, 0.1和0.5 m, 漏斗中方孔尺寸为0.1 m $\times$ 0.1 m, 如图10所示. 该离散元计算采用与表1中相同的3种颗粒: 正四面体、正六面体和正八面体, 且取 $k=0.001$. 初始时方孔处放置挡板, 3组颗粒以自由下落的方式在漏斗内随机排列. 颗粒在漏斗内的堆积高度为0.3 m. 待颗粒堆积稳定后撤除挡板, 实现颗粒的漏斗卸料过程, 并统计漏斗中剩余颗粒占有所有颗粒的比例.

采用扩展多面体离散元方法模拟3种不同形状颗粒在方形平底漏斗中卸料过程, 并将模拟结果与已有试验结果和其他离散元方法模拟结果进行对比分析, 如图11所示. 为便于观察颗粒的流动情况, 按照竖直坐标将颗粒分为3层. 在正六面体的模拟中, 已有试验出现了成拱和永久阻塞现象, 但本文和已有模拟中并未出现该现象. 在正四面体和正八面体的模拟中, 颗粒流动由中间向两侧扩展, 并逐步形成倒三角的颗粒流动形状, 且流动停止后颗粒之间的空隙也保持为倒三角形. 最上层颗粒一般最快流出漏斗, 其次为第二层, 而最下层两侧能保留较多的颗粒. 以上现象与试验和已有模拟中观测到的结果相一致^[66]. 为更加精确地验证离散元方法的可靠性和精确性, 可对计算模拟的颗粒分布状态与试验结果进行对比. 每个颗粒在流动过程中的空间分布状态可更加精确地表征颗粒材料的动力学特性. 然而, 由于本文计算中颗粒材料的初始排列状态由重力沉降方式生成, 其在空间上具有很强的随机分布规律, 并与相应试验条件有一定的差异, 很难对颗粒流动过程的分布规律进行试验验证. 为此, 本文对颗粒流动过程中的流量, 即颗粒数量进行试验对比, 进而从统计角度上验证本文离散元方法的可靠性.

图12为卸料过程中剩余颗粒比例随时间的变化情况. 可以发现, 本文计算结果与相关试验和离散元模拟结果在趋势上一致. 但本文结果中最终稳定状态下的剩余颗粒比例较相关试验和模拟结果偏大, 且卸料刚开始时本文曲线较为陡峭, 而已有的试验和模拟结果则较为平缓. 这主要因为已有试验和模拟的剩余颗粒

图10 方形平底漏斗几何形状

Figure 10 The geometry shape of the rectangular flat bottom hopper.

比例是采用图像处理的方式进行统计^[66], 而本文采用残留在漏斗内的颗粒质量与颗粒总质量的比例作为剩余颗粒比例. 采用图像处理的方式只考虑二维截面上颗粒所占面积与初始时刻所占面积的比例, 这使得统计的漏斗内颗粒占比采用了较大的值, 从而导致剩余颗粒比例较小, 也导致了初始曲线的平滑度差异. 如考虑不同统计方法所导致以上统计结果的差异, 本文模拟结果与相关试验和其他离散元方法模拟结果是一致的, 因而验证了本文所发展的扩展多面体离散元方法的可靠性. 正六面体颗粒在卸料过程中会形成短暂局部的阻塞现象, 进而导致流动速度较慢. 与正四面体和正八面体相比, 正六面体最终的剩余颗粒比例较大. 通过图12(b)也可看出正六面体的流出速度更慢. 在正六面体的试验中发生了稳定的成拱现象, 即颗粒形成了永久的拱形结构阻碍颗粒的流动, 因而最终的剩余颗粒比例较模拟大得多. 漏斗的成拱现象受到诸多因素影响, 其与颗粒材料的摩擦系数等物理力学性质^[67]、方孔尺寸^[68,69]以及颗粒初始结构密切相关. 本文的正六面体模拟和已有的离散元模拟中均没有出现成拱现象, 而试验中也并非每次都会发生堵塞现象. 这在大量的离散元模拟中会有一定的发生概率^[70].

将方形平底漏斗的长和宽尺寸分别改为0.2和0.03 m, 正六面体的边长改为0.0125 m, 漏斗方孔长度采用两种尺寸: 0.06和0.08 m, 方孔宽度与漏斗宽度保持一致. 如图13所示, 采用扩展多面体模拟两种不同方孔尺寸的漏斗卸料过程. 同样通过施加随机水平初速度和重力下落的方式生成初始的堆积结构, 待稳定后撤除方孔处的挡板. 在0.06 m长的方孔模拟中发生了

图 11 (网络版彩图)漏斗卸料过程的离散元模拟及试验对比. 每组4列图对应时刻为 $t=0, 1.0, 1.5$ 和 8.0 s; 每组由上自下分别为本文扩展多面体计算结果, 已有试验结果和其他离散元方法模拟结果^[66]. (a) 正四面体; (b) 正六面体; (c) 正八面体

Figure 11 (Color online) The hopper discharge process simulated with DEM and compared with physical experimental results. The time of those four columns of pictures in each group is $t=0, 1.0, 1.5$ and 8.0 s; from top to bottom: dilated polyhedral element, experiment and simulation ^[66]. (a) Tetrahedron; (b) hexahedron; (c) octahedron.

短暂局部的阻塞, 因此流出较为缓慢, 但没有发生永久的阻塞和成拱现象. 而在 0.08 m 长的方孔模拟中很快形成了稳定的成拱现象, 因此颗粒被阻塞在漏斗内.

为便于与已有试验和其他离散元模拟结果对比, 可统计分析以上两组模拟中流出颗粒比例的变化情况, 如图 14 所示. 显然, 剩余颗粒比例与流出颗粒比例

之和为 1.0. 方孔宽度为 0.06 m 的数据显示颗粒流出较为缓慢, 与图 13 表明的结果一致. 其最终的流出颗粒比例与 Fraige 等人^[68]的模拟结果相近, 而与试验结果存在一定的差别. 在方孔宽度为 0.08 m 的离散元模拟中, 由于很快出现了成拱现象, 流出的颗粒较少, 因而流出颗粒比例较低. 在相应的试验和其他离散元模拟

图 12 (网络版彩图)漏斗卸料过程中剩余颗粒比例随时间变化. (a) 正四面体; (b) 正六面体; (c) 正八面体

Figure 12 (Color online) The time history of the residual particle fraction during hopper discharge. (a) Tetrahedron; (b) hexahedron; (c) octahedron.

图 13 (网络版彩图)两种方孔尺寸的漏斗卸料过程离散元模拟, 时间 $t=0.0, 0.3, 1.0$ 和 2.0 s. (a) $L_d=0.06$ m; (b) $L_d=0.08$ m

Figure 13 (Color online) The hopper discharge with the proposed DEM under two different size of rectangular orifice, $t=0.0, 0.3, 1.0$ and 2.0 s. (a) $L_d=0.06$ m; (b) $L_d=0.08$ m.

图 14 (网络版彩图)漏斗卸料过程中流出颗粒比例随时间变化. (a) 方孔宽度 0.06 m; (b) 方孔宽度 0.08 m

Figure 14 (Color online) The time history of the discharged particle fraction during hopper discharge. (a) Orifice width is 0.06 m; (b) orifice width is 0.08 m.

中, 同样出现了成拱阻塞现象, 从而导致流出颗粒的比例也较低.

5 结论

本文采用 Minkowski Sum 方法构造了不同形态的扩展多面体单元, 将二阶多面体扩展函数与球面函数加权求和形式作为扩展多面体单元的包络函数, 并引入光滑度系数 k 描述颗粒的几何形态, 由此通过该包络函数求解扩展多面体之间的接触搜索问题. 首先根据包络函数形式的最优化问题求解单元之间的接触中心点, 由接触中心点出发迭代搜索单元内基本多面体之间相距最近的点, 进而求得接触重叠量和接触法向. 考虑颗粒间的黏弹性作用, 采用简化的非线性接触模型计算扩展多面体单元间的接触力.

相比于已有多面体和非规则颗粒形态的离散元方法, 本文方法具有以下优点: 通过构造扩展多面体单元

的包络函数, 将接触搜索问题转化为优化问题并进行代数求解, 有效地减少了几何运算; 颗粒间的接触判断只需要单一角点、棱边和平面的几何信息, 不需构造它们之间复杂的几何拓扑关系; 颗粒间的接触过程平滑稳定, 避免了“接触跳跃”等奇异现象.

为验证本文扩展多面体离散元方法的稳定性和计算参数敏感性, 模拟了 3 种不同形态颗粒在重力作用下的自由下落过程. 计算结果表明, 当光滑度系数 k 较小时计算结果具有良好的稳定性. 另外, 采用扩展多面体单元计算了 3 种不同形态颗粒在方形平底漏斗中的卸料过程, 讨论分析了卸料过程中的阻塞和成拱现象, 并与已有的相关试验和离散元模拟结果进行了对比, 其具有良好的一致性. 综上所述, 基于包络函数的扩展多面体接触模型无需建立多面体复杂的几何结构关系, 避免了多面体之间接触搜索的繁琐几何判断, 其计算结果具有很好的可靠性, 可应用于非规则颗粒材料的离散元模拟.

参考文献

- 1 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 天文学 力学, 2017, 47: 070015]
- 2 Di S C, Ji S Y. GPU-based discrete element modelling of interaction between sea ice and jack-up platform structure (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2014, 46: 561–571 [狄少丞, 季顺迎. 海冰与自升式海洋平台相互作用 GPU 离散元模拟. 力学学报, 2014, 46: 561–571]
- 3 Ju Y, Yang Y M, Chen J L, et al. 3D reconstruction of low-permeability heterogeneous glutenites and numerical simulation of hydraulic fracturing behavior (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2016, 61: 82–93 [鞠杨, 杨永明, 陈佳亮, 等. 低渗透非均质砂砾岩的三维重构与水压致裂模拟. 科学通报, 2016, 61: 82–93]
- 4 Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 1979, 29: 47–65
- 5 Cleary P W. DEM prediction of industrial and geophysical particle flows. *Particulate*, 2010, 8: 106–118
- 6 Xu Y, Sun Q C, Zhang L, et al. Advances in discrete element methods for particulate materials (in Chinese). *Adv Mech*, 2003, 33: 251–259 [徐泳, 孙其成, 张凌, 等. 颗粒离散元法研究进展. 力学进展, 2003, 33: 251–259]
- 7 Wang D M, Zhou Y H. Discrete element simulation of localized deformation in stochastic distributed granular materials. *Sci China Ser G-Phys Mech Astron*, 2008, 51: 1403–1415
- 8 Silling S A. Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces. *J Mech Phys Solids*, 2000, 48: 175–209
- 9 Huang D, Zhang Q, Qiao P Z. A review on peridynamics (PD) method and its applications (in Chinese). *Adv Mech*, 2010, 40: 448–459 [黄丹, 章青, 乔丕忠. 近场动力学方法及其应用. 力学进展, 2010, 40: 448–459]
- 10 Ha Y D, Bobaru F. Characteristics of dynamic brittle fracture captured with peridynamics. *Eng Fract Mech*, 2011, 78: 1156–1168
- 11 Hu W Y, Yu Y, Wang H. Damage analysis method for laminates based on peridynamic theory (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2013, 45: 624–628 [胡伟乐, 余音, 汪海. 基于近场动力学理论的层压板损伤分析方法. 力学学报, 2013, 45: 624–628]
- 12 Zhang Q, Gu X, Yu Y T. Peridynamics simulation for dynamic response of granular materials under impact loading (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2016, 48: 56–63 [章青, 顾鑫, 郁杨天. 冲击载荷作用下颗粒材料动态力学响应的近场动力学模拟. 力学学报, 2016, 48: 56–63]
- 13 Wang J, Li S H, Zhang Q B. Simulation of crack propagation of rock based on splitting elements (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2015, 47: 105–118 [王杰, 李世海, 张青波. 基于单元破裂的岩石裂纹扩展模拟方法. 力学学报, 2015, 47: 105–118]

- 14 Eliáš J. Simulation of railway ballast using crushable polyhedral particles. *Powder Tech*, 2014, 264: 458–465
- 15 Govender N, Wilke D N, Kok S. Collision detection of convex polyhedra on the NVIDIA GPU architecture for the discrete element method. *Appl Math Computat*, 2015, 267: 810–829
- 16 Galindo-Torres S A, Alonso-Marroquín F, Wang Y C, et al. Molecular dynamics simulation of complex particles in three dimensions and the study of friction due to nonconvexity. *Phys Rev E*, 2009, 79: 060301
- 17 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]
- 18 Cleary P W. Particulate mixing in a plough share mixer using DEM with realistic shaped particles. *Powder Tech*, 2013, 248: 103–120
- 19 Lu G, Third J R, Müller C R. Critical assessment of two approaches for evaluating contacts between super-quadric shaped particles in DEM simulations. *Chem Eng Sci*, 2012, 78: 226–235
- 20 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
- 21 Shi G H, Goodman R E. Generalization of two-dimensional discontinuous deformation analysis for forward modelling. *Int J Numer Anal Methods Geomech*, 1989, 13: 359–380
- 22 Shi G H. Contact theory. *Sci China Tech Sci*, 2015, 58: 1450–1496
- 23 Li S H, Tang D H, Wang J. A two-scale contact model for collisions between blocks in CDEM. *Sci China Tech Sci*, 2015, 58: 1596–1603
- 24 Zhang R S, Wang Q. Research on modeling and numerical method of free standing body on planar rigid multibody dynamics (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2017, 49: 1370–1379 [张润森, 王琪. 浮放物体平面多刚体动力学建模与算法研究. *力学学报*, 2017, 49: 1370–1379]
- 25 Cundall P A. Formulation of a three-dimensional distinct element model—Part I. A scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks. *Int J Rock Mech Min Sci Geomech Abstracts*, 1988, 25: 107–116
- 26 Nezami E G, Hashash Y M A, Zhao D, et al. A fast contact detection algorithm for 3-D discrete element method. *Comput Geotech*, 2004, 31: 575–587
- 27 Nezami E G, Hashash Y M A, Zhao D, et al. Shortest link method for contact detection in discrete element method. *Int J Numer Anal Meth Geomech*, 2006, 30: 783–801
- 28 Chen W S, Zheng H, Cheng R M, et al. Detection of 3D rock block contacts by penetration edges (in Chinese). *Chin J Rock Mech Eng*, 2004, 23: 565–571 [陈文胜, 郑宏, 郑榕明, 等. 岩石块体三维接触判断的侵入边法. *岩石力学与工程学报*, 2004, 23: 565–571]
- 29 Wang J Q, Lin G, Liu J. Analysis and improvement of scheme to detect contacts in system composed of 3D convex polyhedral blocks (in Chinese). *Chin J Rock Mech Eng*, 2006, 25: 2247–2257 [王建全, 林皋, 刘君. 三维块体接触判断方法的分析与改进. *岩石力学与工程学报*, 2006, 25: 2247–2257]
- 30 Liu X G, Zhu H H, Liu X Z, et al. Improvement of contact detection algorithm of three-dimensional blocks (in Chinese). *Chin J Rock Mech Eng*, 2015, 34: 489–497 [刘新根, 朱合华, 刘学增, 等. 三维块体接触检索算法改进研究. *岩石力学与工程学报*, 2015, 34: 489–497]
- 31 Wang J, Li S, Feng C. A shrunken edge algorithm for contact detection between convex polyhedral blocks. *Comput Geotech*, 2015, 63: 315–330
- 32 Kremmer M, Favier J F. A method for representing boundaries in discrete element modelling—Part I: Geometry and contact detection. *Int J Numer Meth Engng*, 2001, 51: 1407–1421
- 33 Wachs A, Girolami L, Vinay G, et al. Grains3D, a flexible DEM approach for particles of arbitrary convex shape—Part I: Numerical model and validations. *Powder Tech*, 2012, 224: 374–389
- 34 Feng Y T, Owen D R J. A 2D polygon/polygon contact model: Algorithmic aspects. *Eng Computat*, 2004, 21: 265–277
- 35 Feng Y T, Han K, Owen D R J. Energy-conserving contact interaction models for arbitrarily shaped discrete elements. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2012, 205–208: 169–177
- 36 Williams J R, O'Connor R. Discrete element simulation and the contact problem. *Arch Computat Methods Eng*, 1999, 6: 279–304
- 37 Jia X, Gan M, Williams R A, et al. Validation of a digital packing algorithm in predicting powder packing densities. *Powder Tech*, 2007, 174: 10–13
- 38 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
- 39 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

- 40 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
- 41 Hopkins M A. Discrete element modeling with dilated particles. *Eng Computat*, 2004, 21: 422–430
- 42 Hopkins M A, Tuhkuri J. Compression of floating ice fields. *J Geophys Res*, 1999, 104: 15815–15825
- 43 Dai M, Shen H H, Hopkins M A, et al. Wave rafting and the equilibrium pancake ice cover thickness. *J Geophys Res*, 2004, 109: C07023
- 44 Sun S, Shen H H. Simulation of pancake ice load on a circular cylinder in a wave and current field. *Cold Regions Sci Tech*, 2012, 78: 31–39
- 45 Alonso-Marroquín F, Wang Y. An efficient algorithm for granular dynamics simulations with complex-shaped objects. *Granular Matter*, 2009, 11: 317–329
- 46 Galindo-Torres S A, Pedrosa D M. Molecular dynamics simulations of complex-shaped particles using Voronoi-based spheropolyhedra. *Phys Rev E*, 2010, 81: 061303
- 47 Galindo-Torres S A, Pedrosa D M, Williams D J, et al. Breaking processes in three-dimensional bonded granular materials with general shapes. *Comput Phys Commun*, 2012, 183: 266–277
- 48 Galindo-Torres S A. A coupled Discrete Element Lattice Boltzmann Method for the simulation of fluid-solid interaction with particles of general shapes. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2013, 265: 107–119
- 49 Gerolymatou E, Galindo-Torres S A, Triantafyllidis T. Numerical investigation of the effect of preexisting discontinuities on hydraulic stimulation. *Comput Geotech*, 2015, 69: 320–328
- 50 Chen Z, Wang M. Pore-scale modeling of hydromechanical coupled mechanics in hydrofracturing process. *J Geophys Res Solid Earth*, 2017, 122: 3410–3429
- 51 Liu L, Ji S. Ice load on floating structure simulated with dilated polyhedral discrete element method in broken ice field. *Appl Ocean Res*, 2018, 75: 53–65
- 52 Harkness J. Potential particles for the modelling of interlocking media in three dimensions. *Int J Numer Meth Engng*, 2009, 80: 1573–1594
- 53 Houlsby G T. Potential particles: A method for modelling non-circular particles in DEM. *Comput Geotech*, 2009, 36: 953–959
- 54 Boon C W, Houlsby G T, Utili S. A new algorithm for contact detection between convex polygonal and polyhedral particles in the discrete element method. *Comput Geotech*, 2012, 44: 73–82
- 55 Boon C W, Houlsby G T, Utili S. A new contact detection algorithm for three-dimensional non-spherical particles. *Powder Tech*, 2013, 248: 94–102
- 56 Barki H, Denis F, Dupont F. Contributing vertices-based Minkowski sum computation of convex polyhedra. *Comput-Aided Des*, 2009, 41: 525–538
- 57 Lee Y, Behar E, Lien J M, et al. Continuous penetration depth computation for rigid models using dynamic Minkowski Sums. *Comput-Aided Des*, 2016, 78: 14–25
- 58 Liu L, Long X, Ji S Y. Dilated polyhedra based discrete element method and its application of ice load on cylindrical pile (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2015, 47: 1046–1057 [刘璐, 龙雪, 季顺迎. 基于扩展多面体的离散单元法及其作用于圆桩的冰载荷计算. *力学学报*, 2015, 47: 1046–1057]
- 59 Cordero A, Hueso J L, Martínez E, et al. Accelerated methods of order $2p$ for systems of nonlinear equations. *J Comput Appl Math*, 2010, 233: 2696–2702
- 60 Cordero A, Hueso J L, Martínez E, et al. Increasing the convergence order of an iterative method for nonlinear systems. *Appl Math Lett*, 2012, 25: 2369–2374
- 61 Podlozhnyuk A, Pirker S, Kloss C. Efficient implementation of superquadric particles in Discrete Element Method within an open-source framework. *Comp Part Mech*, 2017, 4: 101–118
- 62 Nishiura D, Sakaguchi H. Parallel-vector algorithms for particle simulations on shared-memory multiprocessors. *J Comput Phys*, 2011, 230: 1923–1938
- 63 Torquato S, Jiao Y. Dense packings of the Platonic and Archimedean solids. *Nature*, 2009, 460: 876–879, arXiv: 0908.4107
- 64 Liu S D, Zhou Z Y, Zou R P, et al. Flow characteristics and discharge rate of ellipsoidal particles in a flat bottom hopper. *Powder Tech*, 2014, 253: 70–79
- 65 Ramírez R, Pöschel T, Brilliantov N V, et al. Coefficient of restitution of colliding viscoelastic spheres. *Phys Rev E*, 1999, 60: 4465–4472
- 66 Höhner D, Wirtz S, Scherer V. Experimental and numerical investigation on the influence of particle shape and shape approximation on hopper

- discharge using the discrete element method. *Powder Tech*, 2013, 235: 614–627
- 67 Hidalgo R C, Lozano C, Zuriguel I, et al. Force analysis of clogging arches in a silo. *Granular Matter*, 2013, 15: 841–848
- 68 Fraige F Y, Langston P A, Chen G Z. Distinct element modelling of cubic particle packing and flow. *Powder Tech*, 2008, 186: 224–240
- 69 Thomas C C, Durian D J. Fraction of clogging configurations sampled by granular hopper flow. *Phys Rev Lett*, 2015, 114: 178001, arXiv: [1410.0933](https://arxiv.org/abs/1410.0933)
- 70 Ma L D, Yang G H, Zhang S, et al. Numerical experiment studies of clogging during the discharge of granular matter in a three-dimensional hopper (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2018, 67: 044501 [麻礼东, 杨光辉, 张晟, 等. 三维漏斗中颗粒物质堵塞问题的数值实验研究. *物理学报*, 2018, 67: 044501]

A fast detection algorithm based on the envelope function of dilated polyhedron

LIU Lu & JI ShunYing^{*}

State Key Laboratory of Structure Analysis of Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China

The dilated polyhedron is generated by the Minkowski Sum with a basic polyhedron and a dilated sphere. It has characteristics of both polyhedron and sphere and can be employed for the discrete element simulation of complex shaped particles. The weighted summation of the sphere function and the second-order dilated function of polyhedron is adopted as the envelope function of the dilated polyhedron. The contact detection problem of dilated polyhedrons is translated into an optimization problem between two envelope functions, which improves the detection efficiency of dilated polyhedrons. The contact center between these two envelope functions can be obtained through the optimization problem which can be solved by the Lagrange multiplier method. Based on the contact center, the nearest points on each basic polyhedron can be detected quickly, and therefore the contact normal and overlap between these two particles can be solved accordingly. With the above method, an improvement in the contact detection of dilated polyhedra is achieved by avoiding the complexity that caused by the calculation of each geometric feature in early methods. This article develops a non-spherical DEM based on the dilated polyhedron with the fast contact detection algorithm and the nonlinear contact force model. The single-particle falling process is simulated to analyze the effect of the smoothness parameter to the result. The analysis illustrates that the smoothness parameter has small effect at the range of 0.0001–0.1. Besides, the smaller the smoothness parameter is the closer the results, which shows that the method of this article has good stability. The discharge process of multiple particles in the rectangle hopper with different particle shapes is simulated, while the residual particle fraction during hopper discharge is adopted to validate with existing experimental and numerical results. The reliability of the fast detection algorithm and the nonlinear contact model proposed in this paper is verified by the validation.

discrete element method, dilated polyhedral element, fast contact detection, envelope function method

PACS: 45.70.-n, 83.80.Fg, 81.70.Bt

doi: [10.1360/SSPMA2018-00241](https://doi.org/10.1360/SSPMA2018-00241)