

基于扩展多面体组合单元的非规则颗粒材料离散元方法*

李典哲, 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, 辽宁 大连 116024)

摘要: 非规则颗粒材料广泛地存在于自然界和工业生产中,其复杂的几何形态对力学性质有显著的影响.为构建更接近真实颗粒形态的理论模型,以扩展多面体为基本单元,发展了扩展多面体组合单元.为验证扩展多面体组合单元的可靠性,分别对凸形三棱柱单元、凹形正倒锥体单元在平底漏斗中的卸料过程进行了离散元模拟,并与试验结果进行比较分析,得到其具有较好的一致性.在此基础上,对不同形态的组合单元进行堆积和卸料离散元模拟,研究了颗粒形状对堆积分数、卸料流量和休止角的影响.结果表明,颗粒形状越复杂,颗粒之间的互锁效应越显著,颗粒系统更加稳定.扩展多面体组合单元的有效应用,为离散元数值模拟描述任意形态颗粒材料提供了一种新的构建方法.

关键词: 离散单元法; 扩展多面体颗粒; 组合单元; 非规则颗粒材料

中图分类号: O347.7 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.430152

A Discrete Element Method for Irregular Granular Materials Based on Multi-Dilated Polyhedron Elements

LI Dianzhe, LIU Lu, JI Shunying

(State Key Laboratory of Structure Analysis of Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning 116024, P.R.China)

Abstract: Irregular granular materials are widely available in nature and industrial fields. To construct a theoretical model closer to the real granular materials, a multi-dilated polyhedron model based on the dilated polyhedron element was developed. To verify the reliability of the multi-dilated polyhedron model, the discharge processes of the convex triangular prism particles and concave upward-downward conical particles in the flat bottom hopper were simulated and compared with experimental results, to show good consistency. Besides, the piling and discharge process of differently shaped multi-dilated polyhedron particles were simulated. Furthermore, the effects of particle shapes on the piling fractions, mass flow rates and angles of repose were discussed. The results indicate that, given a more complex particle shape, the interlocking between particles will be stronger, thereby the stability of the granular system will be higher. The effective application of multi-dilated

* 收稿日期: 2022-05-01; 修订日期: 2022-06-30

基金项目: 国家重点研发计划(重点专项)(2021YFA1500302; 2018YFA0605902); 国家自然科学基金项目(42176241)

作者简介: 李典哲(1999—),女,硕士生(E-mail: lidianzhe@mail.dlut.edu.cn); 季顺迎(1972—),男,博士,教授(通讯作者. E-mail: jisy@dlut.edu.cn).

引用格式: 李典哲, 刘璐, 季顺迎. 基于扩展多面体组合单元的非规则颗粒材料离散元方法[J]. 应用数学和力学, 2023, 44(7): 769-783.

polyhedron elements provides a new model-building method for irregular granular materials.

Key words: discrete element method; multi-dilated polyhedron particle; combined element; irregular granular material

0 引言

离散单元法(discrete element method)能全面反应颗粒材料的宏微观力学特性,是预测颗粒材料力学行为的有效工具^[1-3].由于球形颗粒具有易于构造、接触判断简单等优点,常被用于离散元数值模拟^[4-8].然而,自然界与工业生产中的砾石、泥沙和道砟等真实颗粒的形态往往都是非规则的、复杂的^[9-10].颗粒形状对颗粒系统的动力学行为影响很大^[11-14].与球形颗粒相比,非规则颗粒表面不平整、不连续,其流动状态也呈间歇性流动^[15].由于非规则颗粒之间容易形成互锁效应,阻碍颗粒的相对运动,其往往具有较大的空隙率和较小的流动速度^[16].同时,在颗粒堆积过程中,非规则颗粒的体积分率较小而休止角较大^[17].从球形颗粒系统中得到的结论难以直接、准确地应用到非规则颗粒系统上.因此,在离散元数值模拟中发展非规则颗粒的理论模型是十分必要的.

为能更准确地模拟真实颗粒系统,各种非规则颗粒的构建方法不断被提出.由二次曲面函数可构造得到椭球体单元,并且通过调整参数可得到二维圆盘、三维细长或扁平椭球体等不同形状颗粒^[18-19].超二次曲面单元是椭球体单元的扩展,通过超二次曲面函数可构造出几何对称的颗粒单元,改变函数参数可获得具有不同表面尖锐度和长宽比的圆柱体、椭球体等颗粒单元^[20-22].多面体单元是基于拓扑结构的颗粒单元,可表示尖锐的角点和棱边,能很好地反映出自然界中颗粒材料的真实形态^[23-24].与多面体单元相比,扩展多面体单元是基于 Minkowski 和定义由任意多面体和扩展球体构建而成的,通过改变扩展半径可得到具有不同表面尖锐度的颗粒单元^[25-26].其避免了纯多面体难以直接通过几何元素判断接触的缺点,提高了接触搜索效率^[27].然而,这些颗粒模型只适用于构造凸形颗粒.近年来,针对凹形颗粒的离散元方法也在不断发展.Li 等用凹形函数确定心形颗粒形态,再通过网格法来确定颗粒之间的接触点,其计算效率随形状函数复杂度的增加而降低^[28].王嗣强等采用球谐函数描述了任意几何颗粒形态,运用基于水平集方法的任意形态接触算法确定了颗粒间的接触方向和重叠量^[29].Feng 将任意颗粒形态离散成一系列三角单元,通过能量守恒接触模型确定颗粒之间的接触力、接触法向^[30-31].尽管上述构造方法均能有效描述任意形态的颗粒单元,但由于接触计算的复杂性,导致离散元数值模拟时间大大增加.

为描述任意形态颗粒材料的几何构型,组合单元法被提出且不断完善发展^[32].组合单元法可组合不同数目的任意基本单元,且允许颗粒之间重叠,进而构造出不同形态的颗粒.组合方法的优势在于其接触判断可简化为一系列简单的基本颗粒之间的接触判断^[33].组合单元一直在不断地完善与发展,其组成基本颗粒包括球体、椭球体、圆柱体和超二次曲面等.组合球体单元通过将一定数量的球体颗粒组合起来,构造出形状复杂的非规则颗粒,因球体单元易于构造、接触判断简单等优点而最先发展并广泛应用^[34-35].组合椭球体单元基于二次曲面函数,将若干个椭球体颗粒组合而成^[36].与椭球体相比,组合单元更好地描述了颗粒形状的不对称性,更加接近真实颗粒形态.组合超二次曲面单元基于超二次曲面方程,将多个超二次曲面单元进行任意组合,且基本单元之间存在重叠量,可用于构造任意形态颗粒材料^[37].

本文通过组合扩展多面体单元构造了形态各异的颗粒材料.采用背景网格法计算该模型的质量和转动惯量,消除了颗粒间重叠带来的影响.将组合颗粒的接触判断转化为其基本颗粒之间的接触判断.通过不同形态组合颗粒的堆积与卸料过程的离散元模拟,验证了该方法的可行性.

1 基于扩展多面体组合单元模型

基于组合离散元方法构建扩展多面体组合单元,采用背景网格法计算组合单元的质量特性,并将组合单元间的接触问题简化为其基本单元间接触判断,最后对组合单元的平动与转动进行求解.

1.1 基于 Minkowski 和的扩展多面体单元

Minkowski 和理论最早由德国数学家 Herman Minkowski 提出,其在 Euclid 几何空间中给定了两个空间

体 A 和 B , 将两个空间点集相叠加得到新的空间体集合, 其表达式为^[38]

$$A \oplus B = \{x + y \mid x \in A, y \in B\}, \tag{1}$$

式中, x 和 y 分别为空间体 A 和 B 对应的空间坐标。

依据 Minkowski 和的定义, 将 A 和 B 两个空间体设置为任意多面体和扩展球体, 构建得到扩展多面体单元^[39]。通过改变球体的扩展半径可构建具有不同粒子尖锐度的扩展多面体单元, 如图 1 所示。

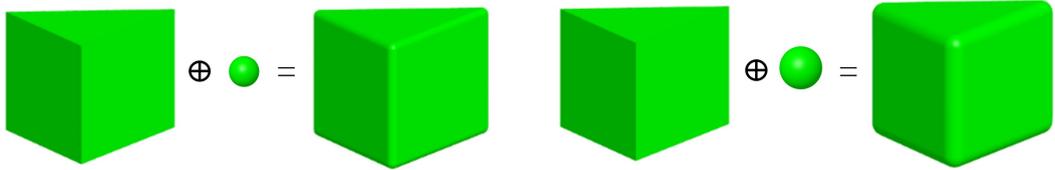


图 1 由不同扩展半径球体与多面体构造的扩展多面体单元

Fig. 1 Dilated polyhedrons composed of various dilated spheres and polyhedrons

1.2 扩展多面体组合单元的构造

以往离散元方法主要集中在构造凸形颗粒单元^[40-42]。为更准确地构建形状更为复杂的凹形颗粒, 本文基于组合离散元方法将多个不同形态的扩展多面体单元组合起来, 且颗粒之间可存在一定重叠量, 进而构造任意形态的颗粒材料。不同颗粒形态的扩展多面体组合单元如图 2 所示。

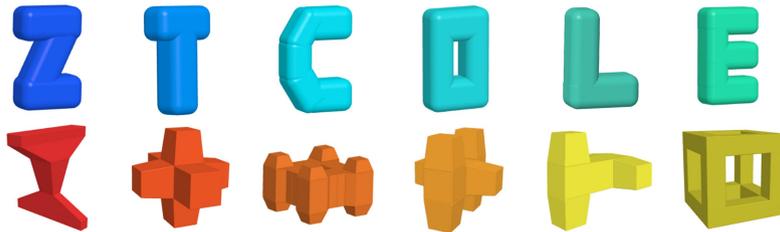


图 2 不同形态的扩展多面体组合单元

Fig. 2 Multi-dilated polyhedron elements with various shapes

1.3 扩展多面体组合单元计算参数的确定

考虑组合单元由可重叠的任意扩展多面体颗粒组成, 且基本颗粒单元之间可存在较大的重叠量。颗粒之间的重叠会导致质量特性的重复计算, 不宜准确得到组合单元的运动信息。为此, 本文采用背景网格法计算组合单元的质量、质心和转动惯量, 以避免重复计算带来的影响^[37], 如图 3 所示。

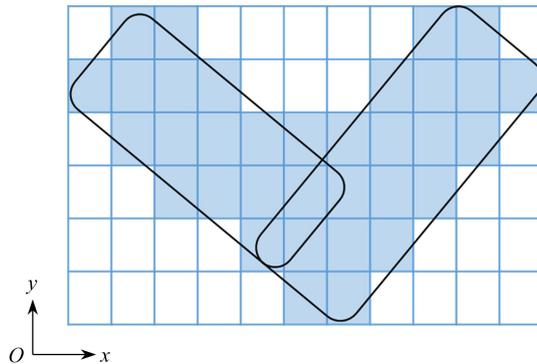


图 3 基于背景网格法的组合单元质量和惯性矩计算

Fig. 3 Calculation of the mass and the moment of inertia for multi-dilated polyhedrons

通过组合单元所在空间位置确定网格的计算区域, 并沿计算区域的 3 个方向进行划分, 由此得到多个微单元。空间网格越多, 微单元越小, 计算精度越高。根据每个微单元网格质心是否在组合单元内来判断有效微单元网格的数量, 通过叠加有效微单元网格的质量得到组合单元质量, 其表达式为

$$m = \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z}, \quad (2)$$

式中, m 为组合单元质量; ρ 为密度; N_x, N_y 和 N_z 分别为 x, y 和 z 方向上有效微单元网格的数量; l_{n_x}, l_{n_y} 和 l_{n_z} 分别为微单元在 x, y 和 z 方向上的边长.

组合单元的质心可写作

$$C_x = \frac{1}{m} \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} x_g, \quad (3)$$

$$C_y = \frac{1}{m} \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} y_g, \quad (4)$$

$$C_z = \frac{1}{m} \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} z_g, \quad (5)$$

式中, C_x, C_y 和 C_z 分别为组合单元质心在 x, y 和 z 方向上的坐标位置; x_g, y_g 和 z_g 分别为微单元网格在 x, y 和 z 方向上的中心坐标位置.

组合单元的惯性张量可写作

$$I_{xx} = \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} [(y_g - C_y)^2 + (z_g - C_z)^2], \quad (6)$$

$$I_{yy} = \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} [(x_g - C_x)^2 + (z_g - C_z)^2], \quad (7)$$

$$I_{zz} = \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} [(x_g - C_x)^2 + (y_g - C_y)^2], \quad (8)$$

$$I_{xy} = I_{yx} = - \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} (x_g - C_x)(y_g - C_y), \quad (9)$$

$$I_{xz} = I_{zx} = - \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} (x_g - C_x)(z_g - C_z), \quad (10)$$

$$I_{yz} = I_{zy} = - \sum_{n_z=1}^{N_z} \sum_{n_y=1}^{N_y} \sum_{n_x=1}^{N_x} \rho l_{n_x} l_{n_y} l_{n_z} (y_g - C_y)(z_g - C_z). \quad (11)$$

1.4 组合单元的接触判断

接触判断是离散元数值模拟的一个重要环节,对计算效率有很大的影响.这里采用二阶多面体扩展函数与球面函数加权求和的方法得到扩展多面体的包络函数,从而将扩展多面体间的接触问题转化为两个包络函数之间的优化问题.通过求解优化问题快速确定颗粒间的接触法向和重叠量,有效地提高了扩展多面体单元的接触搜索效率^[43].该包络函数的归一化形式为

$$f(x, y, z) = (1 - k) \left(\sum_{i=1}^N \frac{\langle a_i x + b_i y + c_i z - d_i \rangle^2}{r^2} - 1 \right) + k \left(\frac{x^2 + y^2 + z^2}{R^2} - 1 \right), \quad (12)$$

式中, k 为颗粒光滑度系数, R 为球面函数的半径.

优化模型的表达式为:

$$\begin{cases} \text{design variable:} & (x, y, z), \\ \text{objective function:} & f_A(x, y, z) + f_B(x, y, z), \\ \text{constraint condition:} & f_A(x, y, z) - f_B(x, y, z) = 0, \end{cases} \quad (13)$$

式中, f_A 和 f_B 分别为两个基本单元的包络函数.

由包络函数构造的扩展多面体颗粒需要满足严格凸形的条件^[44],而扩展多面体组合单元形态往往是不规则的、凹形的.但事实上,已证明了两个组合单元之间的接触重叠,至少存在一对基本单元相互接触^[33].因此,两个组合单元之间的接触问题可转化为其基本单元即扩展多面体颗粒之间的接触问题.组合单元可采用与扩展多面体颗粒相同的接触判断方法.图4为两个相互接触的组合单元.

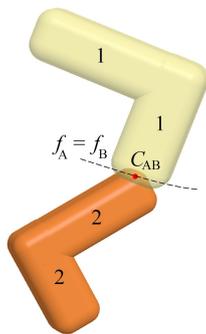


图 4 扩展多面体组合单元间的接触判断

Fig. 4 The contact detection between multi-dilated polyhedrons

1.5 扩展多面体组合单元的运动

1.5.1 组合单元合力、合力矩计算

组合单元的运动可分为平动和转动两部分,根据 Newton 第二定律列出其运动方程如下:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \sum \mathbf{F} + m\mathbf{g}, \quad (14)$$

$$\mathbf{I} \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \sum \mathbf{M}, \quad (15)$$

式中, m, \mathbf{I} 分别为组合单元的质量和惯性张量; $d\mathbf{v}/dt, d\boldsymbol{\omega}/dt$ 分别为组合单元的加速度和角加速度; $\sum \mathbf{F}, \sum \mathbf{M}$ 分别为组合单元的合力和合力矩; \mathbf{g} 为重力加速度。

由此组合单元之间的接触已转换为其基本单元之间的接触。组合单元的接触力、力矩是在其基本单元接触力、力矩计算的基础上再进行计算。这里采用非线性接触力模型简化基本单元之间的接触力计算,法向接触力 \mathbf{F}_n 由弹性接触力 \mathbf{F}_n^e 和黏滞力 \mathbf{F}_n^v 组成,可表示为^[45]

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{F}_n^e + \mathbf{F}_n^v = k_n \delta_n^{3/2} \boldsymbol{\delta}^{3/2} + c_n \sqrt{\delta_n} \dot{\boldsymbol{\delta}}, \quad (16)$$

式中, k_n 为法向接触刚度,且 $k_n = 4E^* \sqrt{R^*} / 3$; δ_n 为颗粒间法向接触重叠量; $\dot{\boldsymbol{\delta}}$ 为法向相对速度; c_n 为法向阻尼系数,且 $c_n = \zeta_n \sqrt{m_{AB} k_n}$, m_{AB} 为等效质量, ζ_n 为无量纲阻尼系数,且 $\zeta_n = -\ln e / \sqrt{\pi^2 + (\ln e)^2}$, e 为回弹系数。

切向接触力 \mathbf{F}_t 由弹性接触力 \mathbf{F}_t^e 和黏滞力 \mathbf{F}_t^v 组成,可表示为^[45]

$$\mathbf{F}_t = \mathbf{F}_t^e + \mathbf{F}_t^v = \mu |\mathbf{F}_n^e| \left[1 - \left(1 - \frac{\delta_t}{\delta_t^{\max}} \right)^{3/2} \right] + c_t \sqrt{\frac{6\mu m_{AB} |\mathbf{F}_n^e| \sqrt{1 - \delta_t / \delta_t^{\max}}}{\delta_t^{\max}}} \dot{\boldsymbol{\delta}}_t, \quad (17)$$

式中, μ 为摩擦因数; δ_t 为切向重叠量; δ_t^{\max} 为最大切向重叠量,且 $\delta_t^{\max} = \mu \delta_n (2 - \nu) / (2 - 2\nu)$; $\dot{\boldsymbol{\delta}}_t$ 为切向相对速度; c_t 为切向阻尼系数,且 $c_t = c_n / (2(1 + \nu))$ 。

对于组合单元来说,合力 $\sum \mathbf{F}$ 和合力矩 $\sum \mathbf{M}$ 的计算是将所有基本单元的接触力、接触力矩进行叠加,将作用在基本单元上的接触力相对于组合单元质心进行累加。

1.5.2 组合单元的平动与转动

组合单元所在空间坐标系可分为整体坐标系(G)和以组合单元质心为原点的全局坐标系(GL)和局部坐标系(B)。组合单元平动时,局部坐标系(B)随之发生平动,其动力学方程可写作

$$\mathbf{a}^{k+1} = \mathbf{F}^{k+1} / m, \quad (18)$$

$$\mathbf{v}^{k+1} = \mathbf{v}^k + \frac{1}{2} (\mathbf{a}^k + \mathbf{a}^{k+1}) \cdot \Delta t, \quad (19)$$

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{v}^{k+1} \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \mathbf{a}^k \cdot \Delta t^2, \quad (20)$$

式中, \mathbf{F} , \mathbf{a} 和 \mathbf{v} 分别为组合单元的合力、加速度和速度; \mathbf{x} 为组合单元的位置信息; $k, k+1$ 分别表示当前时刻和下一时刻, 其间隔用 Δt 表示。

组合单元是一个刚体, 所有基本单元与组合单元之间的相对位置都是恒定的, 因此, 通过更新组合单元的坐标位置与所有基本单元和组合单元的相对位置, 就可以得到所有基本单元的位置信息, 可表示为

$$\mathbf{x}_i^{k+1} = \mathbf{x}_i^{k+1} + \Delta \mathbf{x}_i^{k+1}, \quad (21)$$

式中, i 为基本单元的编号, \mathbf{x}_i 为下一时刻第 i 个基本单元位置信息; $\Delta \mathbf{x}_i$ 为第 i 个基本单元与其组合单元质心的相对位置。

组合单元转动时其运动可视为局部坐标系(B)在全局坐标系(GL)下的运动。局部坐标系下的坐标 \mathbf{e}^B 与全局坐标系下的坐标 \mathbf{e}^{GL} , 其转换关系可表示为

$$\mathbf{e}^B = \mathbf{R} \cdot \mathbf{e}^{GL}, \quad (22)$$

式中, \mathbf{R} 为转换矩阵, 可由四元数 $\mathbf{q}(q_0, q_1, q_2, q_3)$ 求得, 其可写作

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} q_0^2 + q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 & 2(q_1 q_2 + q_0 q_3) & 2(q_1 q_3 - q_0 q_2) \\ 2(q_1 q_2 - q_0 q_3) & q_0^2 - q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 & 2(q_2 q_3 + q_0 q_1) \\ 2(q_1 q_3 + q_0 q_2) & 2(q_2 q_3 - q_0 q_1) & q_0^2 - q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 \end{bmatrix}. \quad (23)$$

作用在组合单元上的合力矩 \mathbf{M} 在局部坐标系下可表示为 $\mathbf{M}_B = \mathbf{R} \cdot \mathbf{M}$ 。根据组合单元转动的动力学方程可求得下一时刻局部坐标系下组合单元的角速度, 即

$$\omega_{Bx}^{k+1} = \omega_{Bx}^k + \frac{[M_{Bx}^k + (I_{yy} - I_{zz}) \omega_{By}^k \omega_{Bz}^k] dt}{I_{xx}}, \quad (24)$$

$$\omega_{By}^{k+1} = \omega_{By}^k + \frac{[M_{By}^k + (I_{zz} - I_{xx}) \omega_{Bz}^k \omega_{Bx}^k] dt}{I_{yy}}, \quad (25)$$

$$\omega_{Bz}^{k+1} = \omega_{Bz}^k + \frac{[M_{Bz}^k + (I_{xx} - I_{yy}) \omega_{Bx}^k \omega_{By}^k] dt}{I_{zz}}, \quad (26)$$

式中, $\{M_x^B, M_y^B, M_z^B\}^T = \mathbf{M}^B$ 是局部坐标系下单元所受的力矩; $\{\omega_x^B, \omega_y^B, \omega_z^B\}^T = \boldsymbol{\omega}^B$ 是局部坐标系下单元的角速度; I_{xx}, I_{yy} 和 I_{zz} 分别表示三个轴向的转动惯量; dt 为时间间隔。

由式(24)~(26)求得下一时刻局部坐标系下组合单元转速, 然后再对组合单元四元数进行更新, 即

$$\begin{bmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{bmatrix}^{k+1} = \begin{bmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{bmatrix}^k + \frac{1}{2} dt \begin{bmatrix} q_0 & -q_1 & -q_2 & -q_3 \\ q_1 & q_0 & -q_3 & q_2 \\ q_2 & q_3 & q_0 & -q_1 \\ q_3 & -q_2 & q_1 & q_0 \end{bmatrix}^k \begin{bmatrix} 0 \\ \omega_x^B \\ \omega_y^B \\ \omega_z^B \end{bmatrix}^{k+1}. \quad (27)$$

随后, 将更新后的四元数再次代入方程(23)中, 计算得到下一时刻的转换矩阵。通过更新后的转化矩阵将局部坐标系下组合单元的角速度转化为全局坐标系下的转速。

2 扩展多面体组合单元运动过程的离散元分析

通过与已有文献的结果对比了两类组合单元的卸料过程, 验证了该模型的有效性。其次, 模拟不同形态单元的堆积、卸料过程, 并分析颗粒形状对体积分数、卸料流量和配位角的影响。

2.1 颗粒材料在平底漏斗中卸料过程的离散元分析

为验证扩展多面体组合单元的有效性, 并与已有文献结果进行对比^[46]。本文选取了文献[46]中的两类单元, 分别模拟其在长方形平底漏斗中的卸料过程。图5中的这两类单元分别是由一个基本颗粒构成的凸形三棱柱单元和由两个基本颗粒构成的凹形正倒锥体单元, 其可看作是在凸形三棱锥单元基础上将其两个矩形面旋转 45° 得到。

长方形平底漏斗几何形状如图6所示, 其长、宽、高分别为 0.14 m , 0.05 m 和 0.4 m , 漏斗挡板尺寸为 $0.04 \text{ m} \times 0.05 \text{ m}$ 。这里选取 600 个蓝色颗粒和 400 个红色颗粒, 并将其划分为 5 层, 以便更好地观察颗粒的堆积和

卸料过程.表 1 给出了数值模拟中的主要计算参数,包括颗粒的特定参数和一般模拟参数^[46].初始时漏斗中放置挡板,所有颗粒具有随机位置和空间方位,在重力作用下自由下落堆积.当颗粒堆积稳定后撤去挡板,完成漏斗卸料过程.

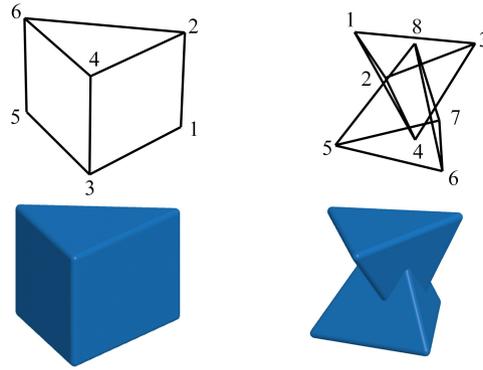


图 5 凸形三棱柱单元和凹形正倒锥体单元

Fig. 5 The convex triangular prism element and the concave upward-downward conical element

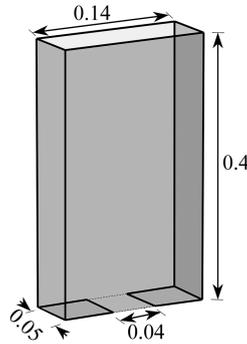


图 6 平底漏斗几何形状(单位: m)

Fig. 6 The geometry shape of the flat bottom hopper (unit: m)

表 1 两种扩展多面体组合单元的主要计算参数

Table 1 Major geometric and physical parameters of the triangular prism and the upward-downward conical elements

parameter	symbol	triangular prism element	upward-downward conical element
element mass	m/g	0.346 9	0.347 0
density	$\rho/(kg/m^3)$	652	1 283
dilating radius	r/mm	0.1	0.1
friction coefficient	μ	0.3	0.3
Young's modulus	E/GPa	1.0	1.0
Poisson's ratio	ν	0.3	0.3

将两种组合单元模拟平底卸料过程所得结果与相关试验以及离散元模拟结果^[46]进行比较分析,如图 7、图 8 所示.在三棱柱单元的模拟中,组合单元的流动从中间向边缘发展,组合单元逐渐呈 V 型流动.这主要是由于漏斗中心的颗粒速度要高于两侧边壁的颗粒速度.已有的试验和模拟中分别在 1.6 s 和 2.4 s 时形成准稳定拱门,但在大多数情况下这些准稳定拱门最终会坍塌^[46].而在本文的模拟中,首先在 1.6 s 处观察到准稳定拱门的形成,而后拱门坍塌,漏斗继续卸料,2.4 s 时再次形成准稳定拱门.这主要是因为凸形颗粒的流动是连续的,也更容易滑动和转动,不能像凹形颗粒一样互锁形成稳定的拱形结构.而对于凹形正倒锥体单元,在已有的试验、模拟以及本文的数值模拟中均在 0.8s 处形成稳定的拱形结构,且在整个模拟过程中拱形结构保持稳定.这主要是因为凹形颗粒之间的互锁结构阻碍了组合颗粒的连续流动.其次,靠近边壁的凹形颗粒更容易形成互锁效应,从而形成更为稳定的拱形结构.

为进一步验证本文离散元方法的可靠性,下面将卸料过程的流量进行对比分析.文献[46]共进行了 20 次试验和 5 次数值模拟,其中 20 次试验的结果存在一定差异,这主要是由于颗粒材料的初始排列状态具有

很强的随机分布规律,导致最终堆积状态不同,这会对卸料结果产生一定影响^[46].图9为平底漏斗卸料过程中剩余颗粒比例随时间的变化情况,在此给出了文献[46]20次试验结果的上下限和一次数值模拟的结果.可以看到,对于凸形三棱柱单元,本文模拟结果在文献[46]试验结果的区域范围内,且与离散元模拟结果在趋势上是一致的.此外,本文模拟结果与文献[46]的模拟结果最终剩余颗粒比例相近,不同的是开始时本文模拟漏斗卸料速度更快.这主要是因为在本次模拟中我们选择的基本单元为扩展多面体单元,即使给定的扩展半径很小,但其较多面体而言,颗粒表面更为光滑,颗粒也更易流动.

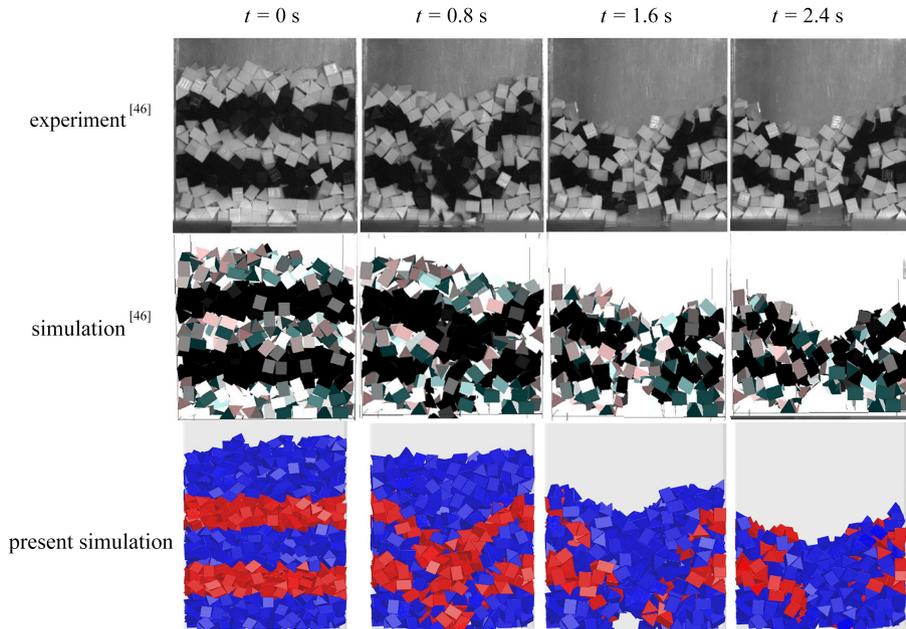


图7 凸形三棱柱单元卸料过程的离散元模拟与试验对比

Fig. 7 The convex triangular prism element's discharge process simulated with the DEM and compared with the physical experimental results

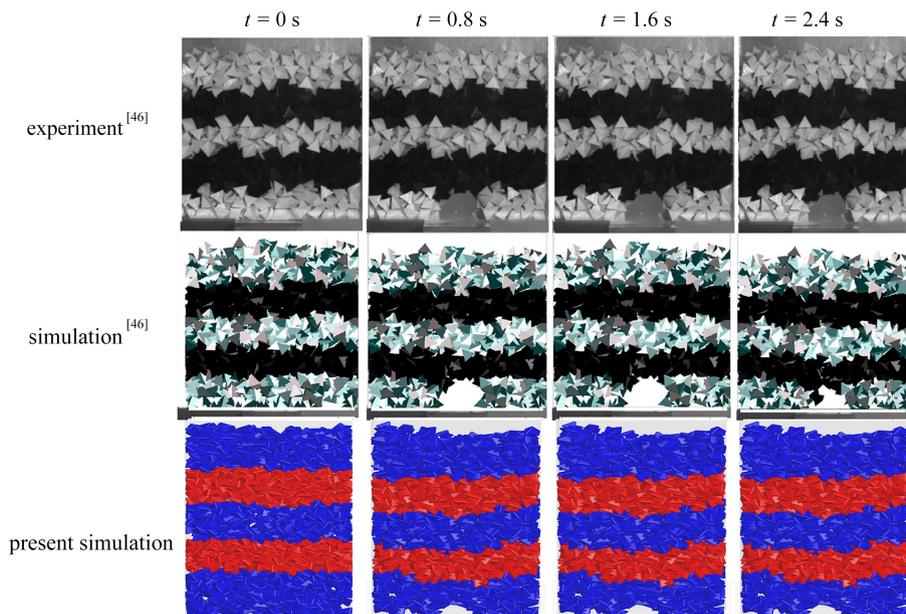


图8 凹形正倒锥体单元卸料过程的离散元模拟与试验对比

Fig. 8 The concave upward-downward conical element's discharge process simulated with the DEM and compared with the physical experimental results

注 为了解释图中的颜色,读者可以参考本文的电子网页版本,后同。

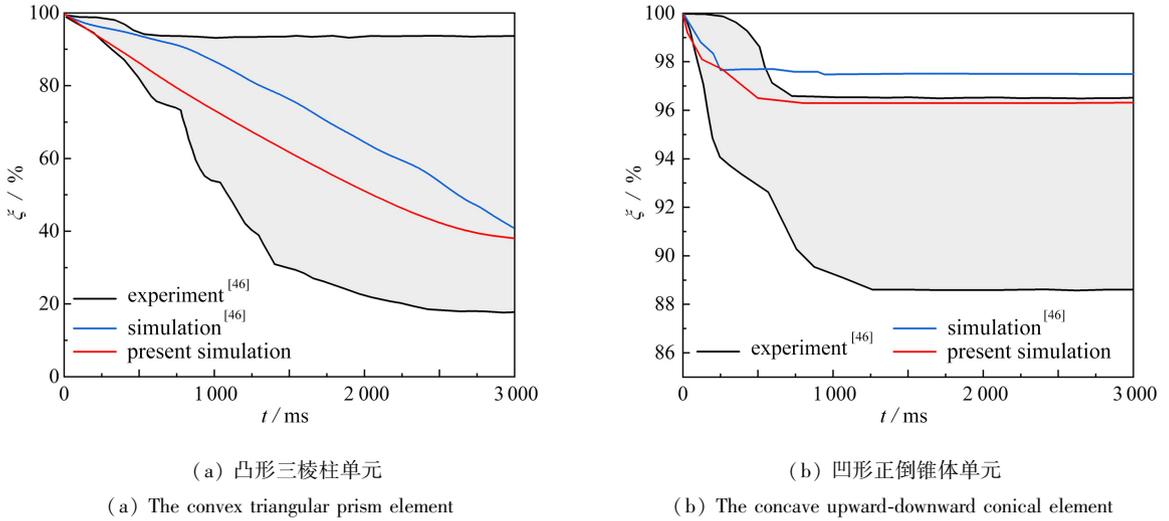


图 9 卸料过程漏斗剩余颗粒比例随时间变化

Fig. 9 The time histories of the residual particle fractions during hopper discharge

对于凹形正倒锥体单元,本文模拟所得结果与文献[46]的试验、离散元模拟结果在趋势上一致,且其位于试验结果的区域范围内.显然,在最终稳定状态下平底漏斗中剩余颗粒比例与已有试验结果上限相近.从整体上看,本文模拟结果与文献[46]的试验和离散元模拟结果是一致的.

2.2 颗粒材料堆积过程的离散元模拟

通过组合扩展多面体颗粒构造 6 种不同形态的组合单元,如图 10 所示,其中 L, W 和 H 分别表示颗粒的长、宽和高,这里取 $L = 100 \text{ mm}$, $W = 30 \text{ mm}$, $H = 180 \text{ mm}$.采用 4 000 个颗粒材料进行堆积过程的离散元模拟,其主要计算参数列于表 2 中.

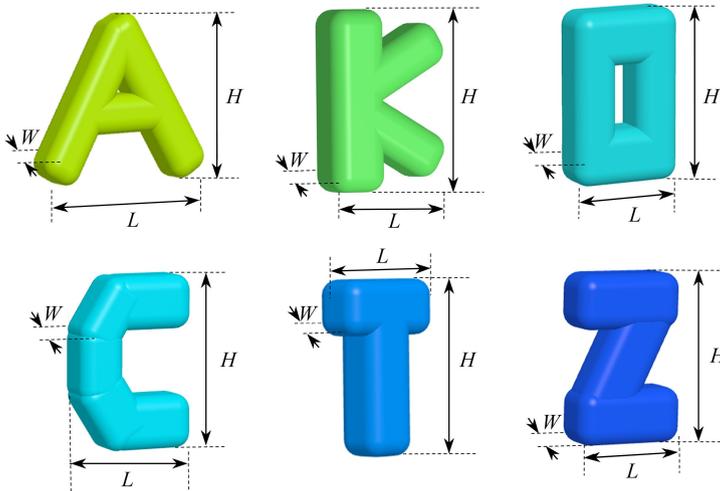


图 10 不同形态的扩展多面体组合单元

Fig. 10 Multi-dilated polyhedrons with various shapes

表 2 扩展多面体组合单元的主要几何和物理参数

Table 2 Major geometric and physical parameters of multi-dilated polyhedrons

parameter	value	parameter	value
density $\rho / (\text{kg}/\text{m}^3)$	2 500	Poisson's ratio ν	0.3
Young's modulus E / GPa	10	friction coefficient μ	0.3
dilating radius r / m	0.02	restitution coefficient η	0.3

长方体容器的长、宽和高分别为 $L_0 = 1.8 \text{ m}$, $W_0 = 1.8 \text{ m}$ 和 $H_0 = 5.0 \text{ m}$.初始时刻,所有组合单元具有随机位置和空间方位,且组合单元之间无重叠,在重力作用下下落堆积.下落一段时间后,组合单元保持静止,形

成稳定的颗粒床,如图 11 所示,其中颗粒颜色表示其距离底部的距离.颗粒形状对堆积分数的影响如图 12 所示.不同颗粒之间堆积密度大不相同,其中 O 形颗粒较其他颗粒具有更高的堆积密度和更低的孔隙率.这主要是由于 O 形构造使得其空心部分位于颗粒中间,难以与其他颗粒勾结互锁,颗粒更容易发生相对滑动和转动.其次,T 形、Z 形和 K 形相比于 A 形和 C 形有更高的堆积密度和更低的孔隙率.这主要是由于 A 形、C 形相较于 T 形、Z 形和 K 形的空心部分更大,其更容易与多个颗粒产生显著的互锁效应,使得颗粒之间难以发生相对运动.由此可见,颗粒形状对颗粒床的堆积密度有显著影响,且随颗粒形状复杂度的增加,颗粒的体积分数不断降低.

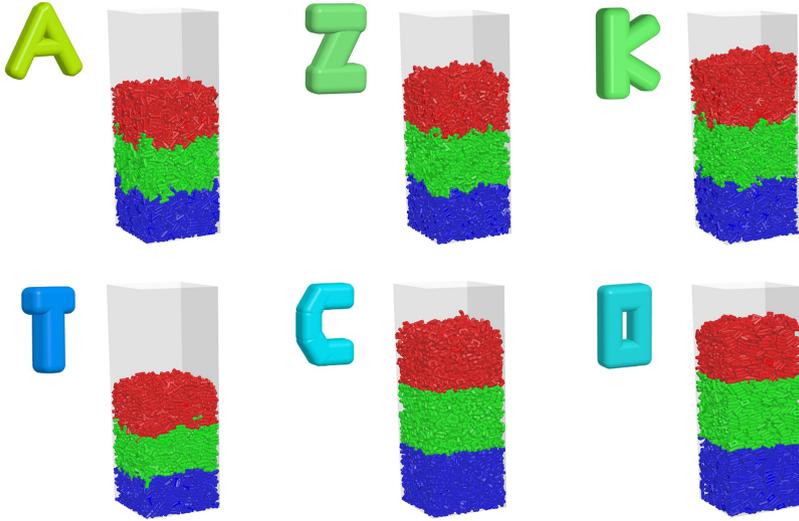


图 11 扩展多面体组合单元形成的稳定颗粒床

Fig. 11 Stable granular beds composed of multi-dilated polyhedrons

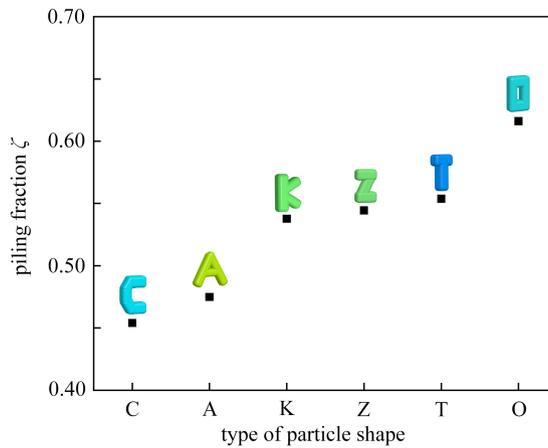


图 12 颗粒形状对堆积分数的影响

Fig. 12 Effects of particle shapes on the piling fraction

2.3 颗粒材料卸料过程的离散元模拟

通过不同扩展多面体颗粒可构造形态各异的组合单元,其颗粒形态将影响流动行为.这里采用扩展多面体的不同组合形式构造 4 种组合单元,组合单元总数为 4 000,其长、宽和高均相同,分别为 $L = 1 \text{ m}$, $W = 1 \text{ m}$, $H = 1 \text{ m}$.初始时刻,组合颗粒在上部漏斗中进行堆积,形成稳定床后,采用 3 种颜色按照高度对颗粒床均匀地划分为 3 层(蓝色、绿色和红色).颗粒床堆积稳定后,将上部漏斗的孔口打开,颗粒开始卸料.图 13 显示了不同时刻颗粒的卸料过程.颗粒尺寸较大且凹形颗粒之间易形成互锁结构阻碍颗粒流动,因此,将上部漏斗的孔口尺寸设置偏大, $L_1 = W_1 = 8 \text{ m}$.其中, $L_0 : W_0 : H_0 = 2 : 2 : 1$,如图 14 所示.漏斗孔口打开后底层蓝色颗粒全部流出,颗粒逐渐呈 V 型流动,这主要是由于漏斗中心的颗粒速度高于靠近边壁的颗粒速度.凹形颗

粒之间易形成互锁结构,颗粒不易滑动和滚动,因此在卸料结束后颗粒出现明显的分层图案。

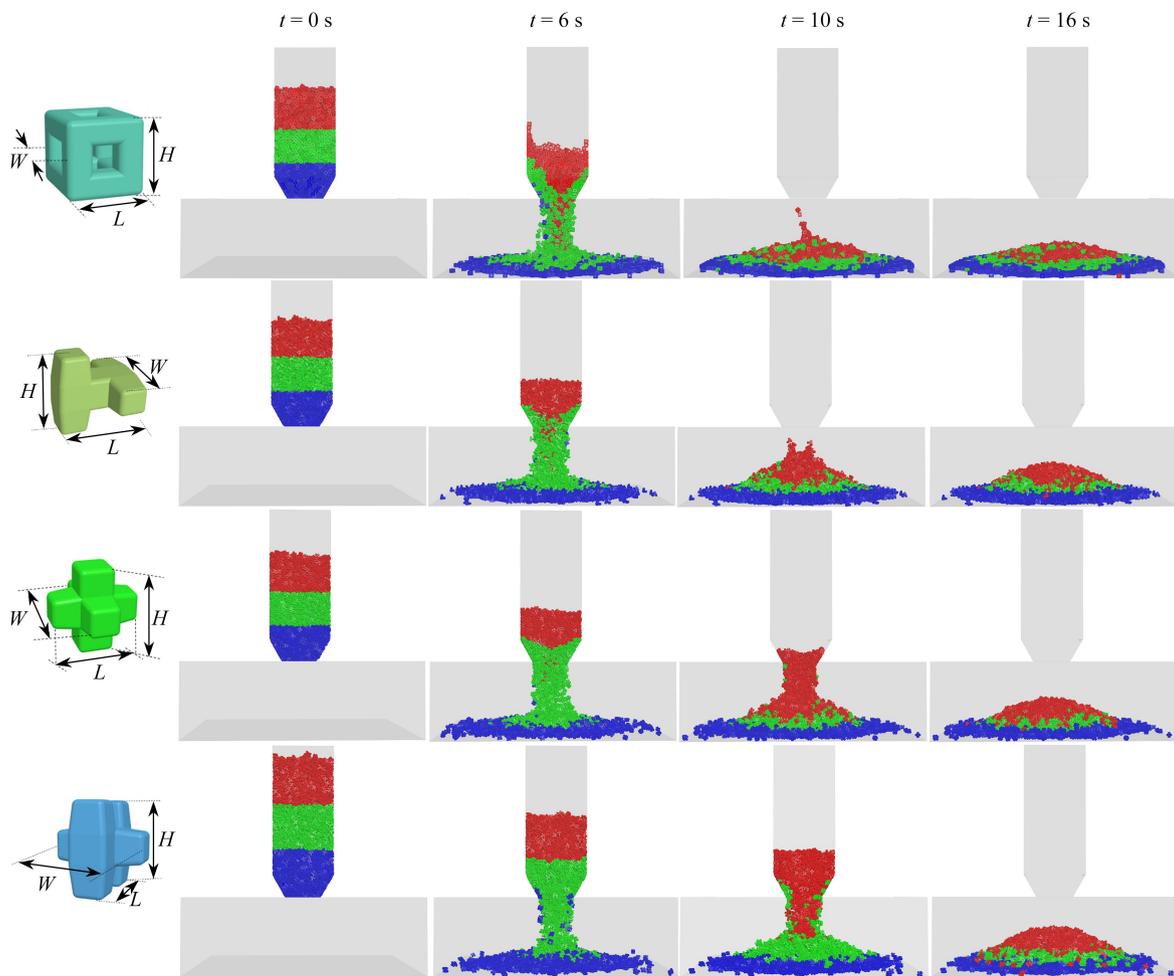


图 13 不同时刻下组合单元的卸料过程

Fig. 13 Discharging processes of multi-dilated polyhedrons at different moments

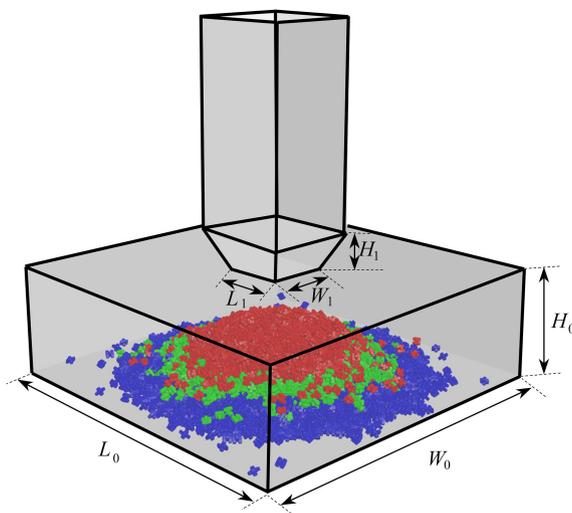


图 14 卸料漏斗的几何尺寸

Fig. 14 The geometry shape of the hopper model

不同颗粒形状所对应的卸料流量和休止角影响如图 15 所示.在卸料过程中,空心体组合单元具有最快

的流动速率且最先完成卸料过程,而扭王字组合单元具有最慢的流动速率.卸料完成后,组合单元在漏斗底部保持静止,形成稳定的堆积床.其中,空心体组合单元具有最小的休止角,而扭王字组合单元具有最大的休止角.这主要是因为颗粒材料形状的复杂度显著影响颗粒的堆积和卸料过程,凹形颗粒形状越复杂,颗粒之间的互锁效应越明显,颗粒之间越不容易滑动和相对转动.

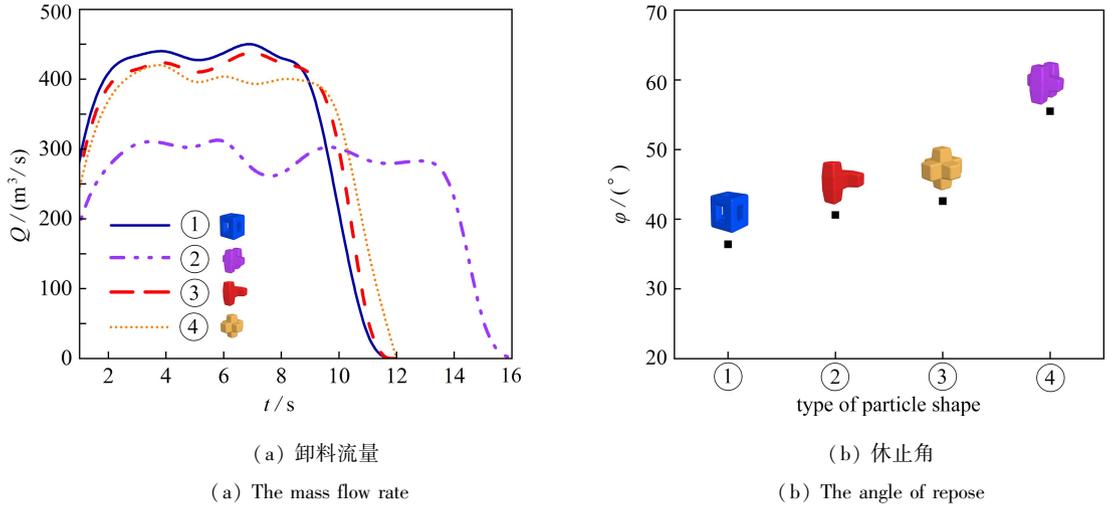


图 15 颗粒形状对流动和堆积特性的影响

Fig. 15 Effects of particle shapes on the flow and packing characteristics

3 结 论

本文以 Minkowski 和方法构造的扩展多面体颗粒为基本单元,基于组合单元方法提出了一种任意形态扩展多面体组合模型.为验证该模型的准确性,分别模拟了凸形三棱柱单元、凹形正倒锥体单元在平底漏斗中的卸料过程,并与已有试验结果进行了对比验证.基于组合方法构造了形状各异的颗粒材料,并进行了试验验证,包括下落堆积和动态漏斗卸料.此外,本文还研究了颗粒形状对堆积密度、卸料流量和休止角的影响.计算结果表明,组合单元形状的复杂度显著影响颗粒材料的堆积与卸料,并且随着组合单元形状复杂度的增加,颗粒的堆积密度与流动速率随之降低,而休止角随之增加.组合单元模型的有效应用,为任意形态颗粒材料的离散元数值模拟提供了一种新思路.

参考文献 (References):

- [1] CUNDALL P A, STRACK O D L. A discrete numerical model for granular assemblies[J]. *Geotechnique*, 1979, **29**(1): 47-65.
- [2] KRUGGEL-EMDEN H, RICKELT S, WIRTZ S, et al. A study on the validity of the multi-sphere discrete element method[J]. *Powder Technology*, 2008, **188**(2): 153-165.
- [3] FERELLE C J F, MCDOWELL G R. A simple method to create complex particle shapes for DEM[J]. *Geomechanics and Geoenvironment: an International Journal*, 2008, **3**(3): 211-216.
- [4] HOHNER D, WIRTZ S, SCHERER V. A numerical study on the influence of particle shape on hopper discharge within the polyhedral and multi-sphere discrete element method[J]. *Powder Technology*, 2012, **226**: 16-28.
- [5] KHAZENI A, MANSOURPOUR Z. Influence of non-spherical shape approximation on DEM simulation accuracy by multi-sphere method[J]. *Powder Technology*, 2018, **332**: 265-278.
- [6] LU L Q, GAO X, SHAHNAM M, et al. Simulations of biomass pyrolysis using glued-sphere CFD-DEM with 3-D intra-particle models[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2021, **419**(6): 129564.
- [7] ZHOU L, YU J Q, LIANG L S, et al. Study on key issues in the modelling of maize seeds based on the multi-

- sphere method[J]. *Powder Technology*, 2021, **394**: 791-812.
- [8] 任石磊, 韩飞鹏, 谢斌, 等. 基于三维 CFD-DEM 的多孔介质流场数值模拟[J]. 应用数学和力学, 2017, **38**(10): 1093-1102. (REN Shilei, HAN Feipeng, XIE Bin, et al. Numerical simulation of flow fields in porous media based on the 3D CFD-DEM[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2017, **38**(10): 1093-1102. (in Chinese))
- [9] 边学成, 李伟, 李公羽, 等. 基于颗粒真实几何形状的铁道路砟剪切过程三维离散元分析[J]. 工程力学, 2015, **32**(5): 64-75. (BIAN Xuecheng, LI Wei, LI Gongyu, et al. Three-dimensional discrete element analysis of railway ballast's shear process based on particles' real geometry[J]. *Engineering Mechanics*, 2015, **32**(5): 64-75. (in Chinese))
- [10] 罗滔, 李刚, OOI E T, 等. 堆石体宏观细观力学特性演化机制的离散元模拟[J]. 武汉大学学报(工学版), 2018, **51**(7): 607-612. (LUO Tao, LI Gang, OOI E T, et al. DEM modelling of macro- and meso-mechanisms for rockfill materials[J]. *Engineering Journal of Wuhan University*, 2018, **51**(7): 607-612. (in Chinese))
- [11] ZHAO B, AN X Z, WANG Y, et al. Packing of different shaped tetrahedral particles: DEM simulation and experimental study[J]. *Powder Technology*, 2020, **360**: 21-32.
- [12] PODLOZHNYUK A, PIRKER S, KLOSS C. Efficient implementation of superquadric particles in discrete element method within an open-source framework[J]. *Computational Particle Mechanics*, 2017, **4**(1): 101-118.
- [13] 王蕴嘉, 宋二祥. 堆石料颗粒形状对堆积密度及强度影响的离散元分析[J]. 岩土力学, 2019, **40**(6): 2416-2426. (WANG Yunjia, SONG Erxiang. Discrete element analysis of the particle shape effect on packing density and strength of rockfills[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2019, **40**(6): 2416-2426. (in Chinese))
- [14] 张成功, 尹振宇, 吴则祥, 等. 颗粒形状对粒状材料圆柱塌落影响的三维离散元模拟[J]. 岩土力学, 2019, **40**(3): 1197-1203. (ZHANG Chenggong, YIN Zhenyu, WU Zexiang, et al. Three-dimensional discrete element simulation of influence of particle shape on granular column collapse[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2019, **40**(3): 1197-1203. (in Chinese))
- [15] HOHNER 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[J]. *Powder Technology*, 2015, **278**: 286-305.
- [16] 孔亮, 彭仁. 颗粒形状对类砂土力学性质影响的颗粒流模拟[J]. 岩石力学与工程学报, 2011, **30**(10): 2112-2119. (KONG Liang, PENG Ren. Particle flow simulation of influence of particle shape on mechanical properties of quasi-sands[J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2011, **30**(10): 2112-2119. (in Chinese))
- [17] LU G, THIRD J R, MULLER C R. Discrete element models for non-spherical particle systems: from theoretical developments to applications[J]. *Chemical Engineering Science*, 2015, **127**: 425-465.
- [18] LIN X, NG T. Contact detection algorithms for three-dimensional ellipsoids in discrete element modelling[J]. *International Journal for Numerical & Analytical Methods in Geomechanics*, 1995, **19**(9): 653-659.
- [19] YAN B, REGUEIRO R A, STURE S. Three-dimensional ellipsoidal discrete element modeling of granular materials and its coupling with finite element facets[J]. *Engineering Computations*, 2010, **27**(4): 519-550.
- [20] CLEARY P W. Industrial particle flow modelling using discrete element method[J]. *Engineering Computations*, 2009, **26**(6): 698-743.
- [21] 崔泽群, 陈友川, 赵永志, 等. 基于超二次曲面的非球形离散单元模型研究[J]. 计算力学学报, 2013, **30**(6): 854-859. (CUI Zequn, CHEN Youchuan, ZHAO Yongzhi, et al. Study of discrete element model for non-sphere particles base on super-quadrics[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2013, **30**(6): 854-859. (in Chinese))
- [22] 王嗣强, 季顺迎. 基于 CUDA-GPU 架构的超二次曲面离散单元并行算法[J]. 应用数学和力学, 2019, **40**(7): 751-767. (WANG Siquang, JI Shunying. A parallel algorithm for super-quadric discrete elements based on the CUDA-GPU architecture[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019, **40**(7): 751-767. (in Chinese))
- [23] NASSAUER B, LIEDKE T, KUNA M. Polyhedral particles for the discrete element method[J]. *Granular Mat-*

- ter, 2013, **15**(1): 85-93.
- [24] 洪俊, 李建兴, 沈月, 等. 多面体颗粒的接触识别及离散元动力学建模[J]. 东南大学学报(自然科学版), 2018, **48**(6): 1082-1087. (HONG Jun, LI Jianxing, SHEN Yue, et al. Contact detection and dynamic model for polyhedral particles based on discrete element method[J]. *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)*, 2018, **48**(6): 1082-1087. (in Chinese))
- [25] GALINDO-TORRES S A, ALONSO-MARROQUIN F, WANG Y C, et al. Molecular dynamics simulation of complex particles in three dimensions and the study of friction due to nonconvexity[J]. *Physical Review E*, 2009, **79**: 060301.
- [26] 刘璐, 姜庆郁, 季顺迎. 基于扩展多面体单元的 DEM-SPH 耦合算法及应用[J]. 水动力学研究与进展, 2019, **34**(4): 456-466. (LIU Lu, JIANG Qingyu, JI Shunying. Dilated polyhedron-based on DEM-SPH coupling algorithm and applications[J]. *Chinese Journal of Hydrodynamics*, 2019, **34**(4): 456-466. (in Chinese))
- [27] LIU L, JI S Y. Ice load on floating structure simulated with dilated polyhedral discrete element method in broken ice field[J]. *Applied Ocean Research*, 2018, **75**: 53-65.
- [28] LI C B, PENG Y X, ZHANG P, et al. The contact detection for heart-shaped particles[J]. *Powder Technology*, 2019, **346**: 85-96.
- [29] 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[J]. 中国科学: 物理学 天文学, 2022, **52**(2): 42-57. (WANG Siquang, QIAO Ting, ZHANG Linfeng, et al. A discrete element method with spherical harmonics for irregular granular materials based on the level set contact algorithm[J]. *Scientia Sinica: Physica, Mechanica & Astronomica*, 2022, **52**(2): 42-57. (in Chinese))
- [30] FENG Y T. An energy-conserving contact theory for discrete element modelling of arbitrarily shaped particles: basic framework and general contact model[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, **373**: 113454.
- [31] FENG Y T. An energy-conserving contact theory for discrete element modelling of arbitrarily shaped particles: contact volume based model and computational issues[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, **373**: 113493.
- [32] LIU Z H, ZHAO Y Z. Multi-super-ellipsoid model for non-spherical particles in DEM simulation[J]. *Powder Technology*, 2020, **361**: 190-202.
- [33] 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[J]. *Computational Particle Mechanics*, 2019, **6**: 55-84.
- [34] NAN X, HOU J M, SHEN Z H, et al. CFD-DEM coupling with multi-sphere particles and application in predicting dynamic behaviors of drifting boats[J]. *Ocean Engineering*, 2022, **247**: 110368.
- [35] LU L Q, GAO X, SHAHNAM M, et al. Open source implementation of glued sphere discrete element method and non-spherical biomass fast pyrolysis simulation[J]. *AIChE Journal*, 2021, **67**: 17211.
- [36] ZHANG B N, 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[J]. *Engineering Computations*, 2018, **35**(2): 733-771.
- [37] WANG S Q, JI S Y. Flow characteristics of nonspherical granular materials simulated with multi-superquadric elements[J]. *Particuology*, 2021, **54**(1): 25-36.
- [38] VARADHAN G, MANOCHA D. Accurate Minkowski sum approximation of polyhedral models[J]. *Graphical Models*, 2006, **68**(4): 343-355.
- [39] GALINDO-TORRES S A, PEDROSO D M, WILLIAMS D J, et al. Breaking processes in three-dimensional bonded granular materials with general shapes[J]. *Computer Physics Communications*, 2012, **183**(2): 266-277.
- [40] 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[J]. *Powder Technology*, 2012, **224**: 374-389.

- [41] SEELEN L, PADDING J T, KUIPERS J. A granular discrete element method for arbitrary convex particle shapes: method and packing generation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2018, **189**: 84-101.
- [42] ZHANG Q, JIA C J, YU J, et al. Multisphere representation of convex polyhedral particles for DEM simulation [J]. *Advances in Civil Engineering*, 2021, **2021**: 8846004.
- [43] 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[J]. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, **49** (6): 13-27. (LIU Lu, JI Shunying. A fast detection algorithm based on the envelope function of dilated polyhedron[J]. *Scientia Sinica: Physica, Mechanica & Astronomica*, 2019, **49**(6): 13-27. (in Chinese))
- [44] HOULSBY G T. Potential particles: a method for modelling non-circular particles in DEM[J]. *Computers & Geotechnics*, 2009, **36**(6): 953-959.
- [45] LIU S D, ZHOU Z Y, ZOU R P, et al. Flow characteristics and discharge rate of ellipsoidal particles in a flat bottom hopper[J]. *Powder Technology*, 2014, **253**: 70-79.
- [46] GOVENDER N, WILKE D N, WU C Y, et al. Hopper flow of irregularly shaped particles (non-convex polyhedra): GPU-based DEM simulation and experimental validation[J]. *Chemical Engineering Science*, 2018, **188**: 34-51.