

基于超圆颗粒模型的二维离散元法计算方法

付宏¹, 贾慧敏², 张晓旭¹, 于建群³

(1. 吉林大学 计算机科学与技术学院, 长春 130012; 2. 大连交通大学 软件学院, 辽宁 大连 116000; 3. 吉林
大学 生物与农业工程学院, 长春 130022)

摘要:采用超圆方程建立复杂形状颗粒的二维离散元法分析模型, 提出采用外接矩形进行初步的接触检测, 采用牛顿下山法进行精确的接触检测、接触点求解和接触叠合量的计算, 建立了基于超圆方程的颗粒二维离散元法计算方法。实例验证证明了所建立方法的正确性和有效性, 为复杂形状颗粒运动的离散元法仿真分析提供了一种可行的方法。

关键词:计算机软件; 离散元法; 超圆方程; 碰撞检测; 颗粒材料

中图分类号: TP391.9 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-5497(2008)06-1383-06

2D DEM calculation methods based on superquadratics particles modeling

FU Hong¹, JIA Hui-min², ZHANG Xiao-xu¹, YU Jian-qun³

(1. College of Computer Science and Technology, Jilin University, Changchun 130012, China; 2. College of Software, Dalian Jiaotong University, Dalian 116000, China; 3. School of Biological and Agricultural Engineering, Jilin University, Changchun 130022, China)

Abstract: In the analysis of contact action between particles and correlative machine components by Discrete Element Method (DEM), a key issue that influences the analysis precision and efficiency is how to build the DEM model of the particles with complicated shapes. In this paper, the superquadratics equation is employed to build the 2D DEM analysis models of complicated particles. A method using exterior rectangles for preliminary contact inspection is proposed. The accurate contact inspection, contact point solution and contact overlapping calculation are carried out using Newton downhill method. The effectiveness and feasibility of the proposed method are verified by numerical simulation, which is viable to analyze and resolve the movement of complicated particles.

Key words: computer software; DEM; superquadratics equation; detecting of contact; granular material

在工农业生产中,大量存在着颗粒材料(如颗粒农产品、颗粒肥料、土壤、颗粒药品和煤炭等)与机械部件的接触作用和颗粒材料的流动过程。采用连续介质力学方法研究颗粒材料与相关机械部件的接触作用,只能把颗粒材料作为一个整体来考虑,无法分析颗粒之间及颗粒与边界(机械部件)之间时而接触时而分离的不连续性,因而不能

很好地解决该问题^[1]。目前进行有关机械部件设计时,大都依靠设计者的经验或试验方法,既费时费力又得不到理想的设计效果。据估计仅由颗粒材料输送所造成的相关设备利用损失就达40%,远未达到优化设计和节省能源的要求^[2]。

20世纪70年代末Cundall等^[3]提出离散元法,其基本思想是把颗粒群体简化成具有一定形

收稿日期:2007-05-25.

基金项目:国家自然科学基金项目(60673033,50775097);“863”国家高新技术研究发展计划项目(2006AA04Z125).

作者简介:付宏(1960-),女,教授.研究方向:计算机仿真与软件工程. E-mail: fuhong@jlu.edu.cn

状和质量颗粒的集合,赋予接触颗粒间及颗粒与接触边界间某种接触力学模型和模型中的参数,以考虑颗粒之间及颗粒与边界之间的接触作用和颗粒与边界的不同物理机械性质。离散元法采用动态松弛法、牛顿第二定律和时步迭代求解每个颗粒的运动速度和位移,因而特别适合于求解非线性问题。当采用不同的接触模型时,还可以分析颗粒结块、颗粒群整体的破坏过程(如粉碎和切断等)、多相流动甚至可以包括化学反应和传热等问题。正是由于具有诸多优点,使得离散元法已成为研究颗粒群体动力学问题的一种通用方法,并在岩土工程(如滑坡)与风沙流动(如雪崩、风化),颗粒材料的输送、混合、分离和筛分,颗粒(如土壤)的结块与冲击碰撞,土壤与机械(如挖掘机)的相互作用,化工过程装备(如流化床)和矿山装备(如球磨机)等研究领域得到较多应用^[4]。

在采用离散元法分析颗粒材料与机械部件的接触作用时,需要建立颗粒的离散元法分析模型。研究表明,超圆(球)方程可以模拟自然界中 80% 的颗粒形状^[5]。但采用超圆方程建立复杂形状颗粒的离散元法分析模型时,如何进行颗粒之间及颗粒与边界之间的接触检测、接触点(力的作用点)求解和叠合量的计算,将直接影响分析精度和计算效率,也是该颗粒模型能否成功应用的关键问题之一。

作者采用超圆方程建立复杂形状颗粒的二维离散元法分析模型,提出采用外接矩形进行初步的接触检测,采用牛顿下山法进行精确的接触检测、接触点求解和叠合量计算,建立了基于超圆方程的颗粒二维离散元法计算方法,为复杂形状颗粒运动的离散元法仿真分析提供了一种可行的方法。

1 颗粒模型及颗粒运动求解

当采用超圆方程建立复杂形状颗粒的离散元法分析模型时,颗粒模型表示如下^[6]

$$\left| \frac{x}{A} \right|^{n_1} + \left| \frac{y}{B} \right|^{n_2} = 1 \quad (1)$$

式中: n_1 、 n_2 、 A 、 B 均为颗粒形状的参数,通过改变这 4 个参数,该方程就可以表示不同形状的颗粒,如图 1 所示^[5]。由于自然界中大部分颗粒都是外凸的,所以本文只考虑 n_1 和 n_2 均大于 1 时的情况。

为了采用离散元法分析颗粒之间及颗粒与边

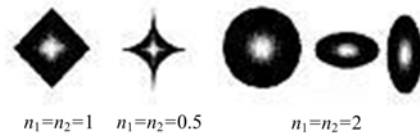


图 1 超圆方程所表示的几种典型颗粒形状
Fig. 1 Several typical particles' shapes

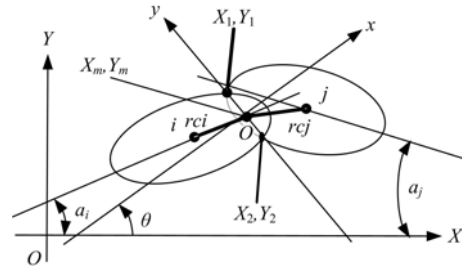


图 2 全局坐标系和局部坐标系的建立

Fig. 2 Building of global and local coordinate system

界之间的接触作用,建立如图 2 所示的全局坐标系 XOY 和局部坐标系 xoy 。图中两个基于超圆方程的接触颗粒 i 和 j 的质心在全局坐标系下坐标为 (X_i, Y_i) 和 (X_j, Y_j) ,两颗粒交点在全局坐标系下坐标为 (X_1, Y_1) 和 (X_2, Y_2) ,两颗粒 i 与 j 交点连线的中点为两颗粒的接触点,也为局部坐标系的原点,其在全局坐标系下的坐标为 (X_m, Y_m) ,颗粒 i 与 j 的作用半径(接触点指向颗粒中心)分别为 r_{ci} 、 r_{cj} ,颗粒 i 与 j 的主轴与全局坐标系 X 轴的夹角分别为 α_i 和 α_j 。局部坐标系 y 轴为颗粒 i 与 j 交点的连线,垂直方向为 x 轴, x 轴的正向由颗粒 i 指向颗粒 j 的方向, y 轴的正向符合右手法则。局部坐标系的 x 轴正向与全局坐标系 X 轴正向之间夹角为 θ ,且逆时针取正、顺时针取负。颗粒 i 与颗粒 j 的作用半径与局部坐标系 x 轴正向的夹角分别为 θ_1 和 θ_2 ,与全局坐标系 X 轴正向的夹角分别为 θ_3 和 θ_4 ,且逆时针取正、顺时针取负。此时在全局坐标系下颗粒 i 和 j 的超圆方程变为

$$\begin{cases} \left| \frac{(X - X_i)\cos\alpha_i + (Y - Y_i)\sin\alpha_i}{A_1} \right|^{n_1} + \left| \frac{(Y - Y_i)\cos\alpha_i - (X - X_i)\sin\alpha_i}{B_1} \right|^{n_2} = 1 \\ \left| \frac{(X - X_j)\cos\alpha_j + (Y - Y_j)\sin\alpha_j}{A_2} \right|^{n_3} + \left| \frac{(Y - Y_j)\cos\alpha_j - (X - X_j)\sin\alpha_j}{B_2} \right|^{n_4} = 1 \end{cases} \quad (2)$$

且有如下关系成立

$$\begin{aligned} \sin\theta &= \frac{X_2 - X_1}{\text{dist}}, \quad \cos\theta = \frac{Y_1 - Y_2}{\text{dist}}, \quad \theta_1 = \theta_3 - \theta, \\ \theta_2 &= \theta_4 - \theta, \quad \sin\theta_3 = \frac{Y_i - Y_m}{rci}, \quad \cos\theta_3 = \frac{X_i - X_m}{rci}, \\ \text{dist} &= \sqrt{(X_1 - X_2)^2 + (Y_1 - Y_2)^2}, \\ \sin\theta_4 &= \frac{Y_j - Y_m}{rcj}, \quad \cos\theta_4 = \frac{X_j - X_m}{rcj}, \\ rci &= \sqrt{(X_m - X_i)^2 + (Y_m - Y_i)^2}, \\ rcj &= \sqrt{(X_m - X_j)^2 + (Y_m - Y_j)^2}. \end{aligned}$$

设颗粒 i 和 j 在局部坐标系下接触点的法向 (x 轴方向)和切向 (y 轴方向)接触作用力分别为 F_n 和 F_s ,则在全局坐标系下颗粒质心的作用力分别为

$$\begin{cases} f_x = F_n \cos\theta - F_s \sin\theta \\ f_y = F_n \sin\theta + F_s \cos\theta \end{cases} \quad (3)$$

颗粒 i 和 j 的接触作用力 F_n 和 F_s 对质心的力矩 (均以逆时针方向为正)为

$$\begin{cases} M_i = rci * (F_n \sin\theta_1 - F_s \cos\theta_1) \\ M_j = rcj * (F_n \sin\theta_2 - F_s \cos\theta_2) \end{cases} \quad (4)$$

由式(3)和(4)计算出每个颗粒上的全部接触作用力、力矩及其合力和合力矩,然后采用牛顿第二定律即可求解每个颗粒在当前时步的速度和位移,由此即可得到每个颗粒的运动过程。

当颗粒 i 与边界接触时,可将边界作为颗粒 j 处理,此时局部坐标系原点为颗粒 i 与边界交点连线的中点,局部坐标系 y 轴为颗粒 i 与边界交点的连线,垂直方向为 x 轴, x 轴的正方向为由颗粒 i 指向边界的方向, y 轴的正方向符合右手法则。

2 颗粒与颗粒的接触求解

在采用上述方法计算颗粒之间及颗粒与边界之间的接触作用力前,首先应判定颗粒与颗粒和颗粒与边界的接触状况,即被计算颗粒与哪些颗粒或边界接触,并计算出接触点坐标和接触的叠合量,以求出接触颗粒或边界间的法向和切向接触力 F_n 和 F_s 。在离散元法中,为了减少判定颗粒与颗粒及颗粒与边界是否接触的计算量,在进行接触判定前还应先进行邻居搜索。

2.1 邻居搜索和迭代初始点的确定

对于用超圆方程表示的颗粒,也可采用网格法进行邻居搜索^[7]。为了减少精确判定接触的计算量,本文提出用判定两个颗粒外切矩形相交的方法,初步确定两个颗粒或颗粒与边界可能接触

(相交),即在生成颗粒同时生成每个颗粒的外切矩形(如图 3 所示),当两个颗粒相交时,其外切矩形必定相交。

对于两个外切矩形相交的颗粒,当采用数值迭代法精确求解接触状况和求解接触点时,可选取两个外切矩形的交点作为初始迭代点(如图 3 和图 4 所示)。一般来说这样确定的初始点,可以在很大程度上提高迭代的速度。

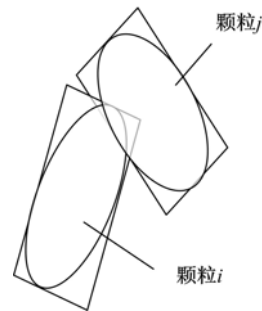


图 3 两个颗粒接触相交简图

Fig. 3 Sketch of two particles' intersection

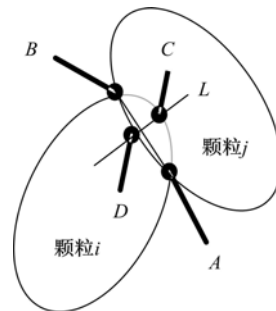


图 4 两个颗粒接触求解简图

Fig. 4 Sketch of two particles' contact solution

2.2 接触点求解和叠合量的计算

初步确定的两个可能相交颗粒方程可变形为

$$\begin{cases} F_i(x, y) = 0 \\ F_j(x, y) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

式中: $F_i(x, y) = 0$ 表示颗粒 i 的超圆方程变形; $F_j(x, y) = 0$ 为颗粒 j 的超圆方程变形。设由两个颗粒外切矩形求得的初始迭代点为 (x_0, y_0) ,则在 (x_0, y_0) 点附近将式(5)展开并取到一次项有

$$\begin{cases} F_1 \approx F_1(x_0, y_0) + (x - x_0) \frac{\partial F_1(x_0, y_0)}{\partial x} + \\ \quad (y - y_0) \frac{\partial F_1(x_0, y_0)}{\partial y} = 0 \\ F_2 \approx F_2(x_0, y_0) + (x - x_0) \frac{\partial F_2(x_0, y_0)}{\partial x} + \\ \quad (y - y_0) \frac{\partial F_2(x_0, y_0)}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (6)$$

$$\text{假定行列式 } J = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x} & \frac{\partial F_1}{\partial y} \\ \frac{\partial F_2}{\partial x} & \frac{\partial F_2}{\partial y} \end{pmatrix} \text{ 在 } (x_0, y_0) \text{ 邻}$$

域不为零,加入下山因子 λ ,即可通过牛顿下山法由迭代求出方程(6)的根。当两颗粒相交时则方程(6)有两个根,如图 4 中的 A、B 两点,作 A、B 两点的中垂线 L,该中垂线与两颗粒的交点 C、D 的距离即为接触的叠合量。当两颗粒不相交时则方程无根,叠合量为零;当两颗粒相切时则方程只有一个根,叠合量也为零。

3 颗粒与边界的接触求解

3.1 邻居搜索和迭代初始点的确定

当颗粒与直线、圆弧或椭圆弧边界接触时,邻居搜索和迭代初始点的选取同 2.1 节,区别仅在于边界外切矩形的边需平行于坐标轴,也可用邻居搜索的网格作为边界的外切矩形。

3.2 接触点求解和叠合量的计算

3.2.1 直线边界的计算

当某颗粒与一直线段边界方程无根时,则颗粒与该直线段边界无接触,接触叠合量为零;当颗粒与该直线段边界方程有一个根时,则颗粒与直线边界相切,接触叠合量为零;当颗粒与该直线段边界方程有 2 个根时,则颗粒与直线段边界可能接触,此时又有 3 种情况(参见图 5):①若直线段边界不通过两个交点(根) A、B 之一,见图 5(a),或直线段边界一个端点与较近的交点重合,见图 5(b),则颗粒与直线段边界无接触,接触叠合量为零;②若直线段边界通过一个交点,且边界的一个端点在两个交点之间还过(或在)两个交点连线

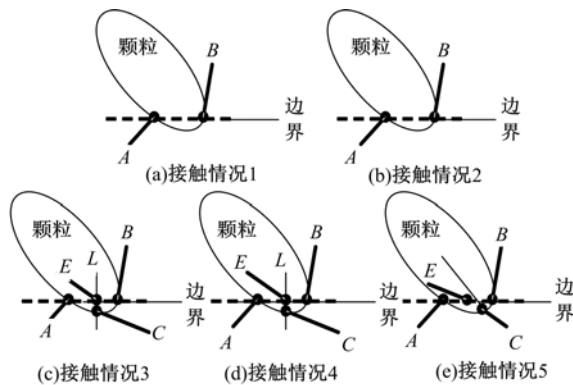


图 5 颗粒与直线段边界的接触求解和叠合量计算简图

Fig. 5 Sketch of particles & lines boundaries' contact solution and overlaps calculation

的中点 E,见图 5(c),或直线段边界通过两个交点,见图 5(d),则作交点连线的中垂线 L,L 与颗粒的交点为 C,两交点的中点 E 为接触点,E 点与 C 点的距离为接触的叠合量;③若直线边界一个端点在两个交点之间,但不过连线中点 E,则过颗粒中心与该直线边界端点连线,该线与颗粒交点为 C,C 点与直线段边界端点的距离为接触的叠合量,见图 5(e)。

3.2.2 圆弧和椭圆弧边界的计算

圆弧或椭圆弧边界与颗粒方程组的求解方法与 2.2 节中颗粒间求解方法相同,只是需用圆弧或椭圆弧边界方程代替第二个颗粒方程即可。

当某颗粒与圆弧或椭圆弧段边界方程无根时,则颗粒与边界无接触,接触叠合量为零;当颗粒与圆弧或椭圆弧边界方程有一个根时,则颗粒与边界相切,接触叠合量为零;当颗粒与圆弧或椭圆弧边界方程有 2 个根时,则颗粒与边界可能接触,此时又有 3 种情况(参见图 6):①若边界段不通过两个交点(根) A、B,见图 6(a),或仅边界段端点与交点重合,见图 6(b),则颗粒与边界无接触,接触叠合量为零;②若边界段的一个端点在两个交点(根)之间且过(或在)两个交点连线的中点 E,见图 6(c),或边界段通过两个交点见图 6(d),则作交点连线的中垂线 L,L 与颗粒的交点为 C,L 与边界的交点 F 与点 C 的距离为接触的叠合量,中点 E 为接触点;③若边界段一个端点在两个交点(根)之间,但不过中点 E,则过颗粒中心与该边界端点连线,该线与颗粒的交点为 C,C 点与边界端点的距离为接触叠合量,边界端点为接触点,见图 6(e)所示。

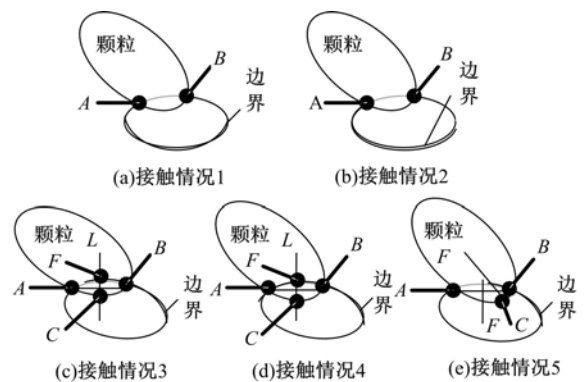


图 6 颗粒与圆弧和椭圆弧段边界的接触求解和叠合量计算简图

Fig. 6 Sketch of particles and arc & ellipse boundaries' contact solution and overlaps calculation

4 实例验证与对比

为检验所建立算法的正确性和有效性,采用上述方法和 CAD 软件的二次开发编制了一种集成软件^[7]。该集成软件由三部分组成,第一部分为 CAD 软件,用于机械部件的 CAD 设计;第二部分为建模软件,用于自动建立机械部件的离散元法分析模型,其中包括机械部件的 CAD 模型(CAD 设计图)读取、CAD 模型中包含的基本图形元素如直线段、圆弧段的提取、基本图形元素运动属性和材料特性参数添加和存储等;第三部分为采用上述方法开发的离散元法分析软件,用于机械部件工作过程和颗粒运动过程的离散元法仿真分析。

图 7 为由 CAD 软件设计的一种农机工作部件——精密排种器的 CAD 模型,图 8 为由 CAD 模型自动建立的由直线段和圆弧段组成的排种器离散元法分析模型。图 9 为该排种器工作过程的离散元法仿真分析,图 10 为相同条件下该排种器的实际工作状况,比较两图可知排种器内颗粒(大

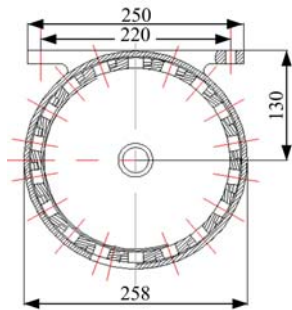


图 7 组合内窝孔精密排种器的 CAD 模型(主视图)

Fig. 7 CAD model of combination inner nest hole precision seed metering devices (main view)

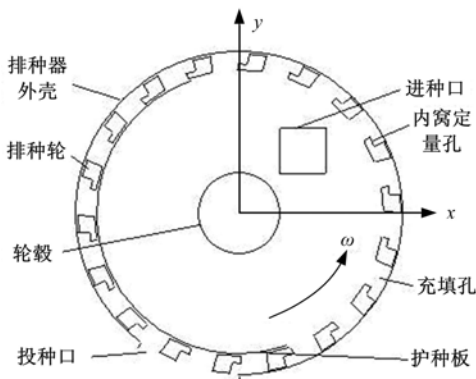


图 8 组合内窝孔精密排种器的离散元法分析模型
Fig. 8 DEM analyses model of combination inner nest hole precision seed metering devices

豆种子)的运动状况较相似。图 11 为改变式(1)中参数得到的不同模型颗粒的运动过程仿真分析,图 12 为改变该排种器 CAD 模型中尺寸时的工作过程仿真分析,图 13 为改变 CAD 模型得到的两种外充式排种器的工作过程仿真分析。上述实例初步证明了本文所建立方法的正确性及有效性。

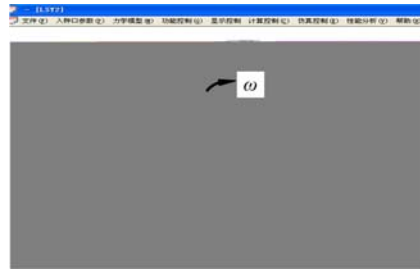


图 9 组合内窝孔精密排种器工作过程仿真分析(椭圆形颗粒)

Fig. 9 Working process simulation of a kind of precision seed metering devices

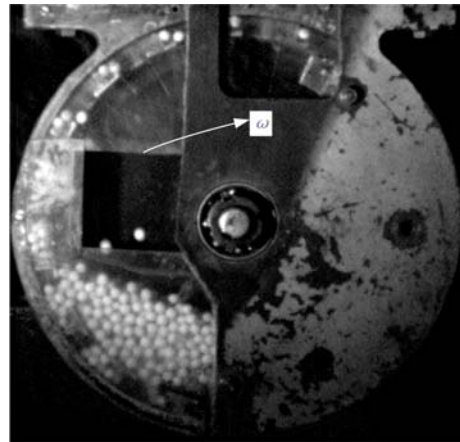


图 10 组合内窝孔精密排种器工作过程实验
Fig. 10 Working process experiment of precision seed metering devices

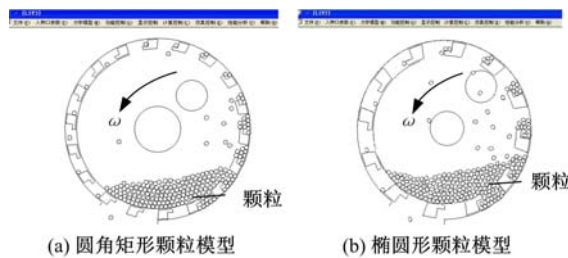


图 11 改变颗粒模型时精密排种器的工作过程仿真分析
Fig. 11 Working process simulation analyses of precision seed metering devices when changing particles' model

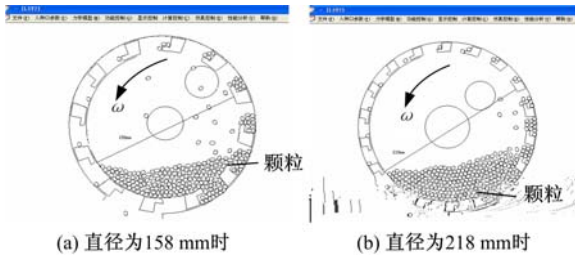


图 12 改变 CAD 模型中排种轮直径时精密排种器的工作过程仿真分析(椭圆形颗粒)

Fig. 12 Working process simulation analyse of precision seed metering devices when changing CAD model (Ellipse particles)

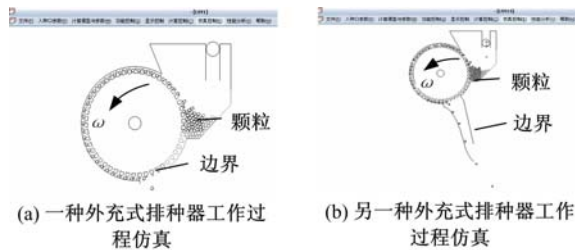


图 13 改变 CAD 模型后两种外充式排种器工作过程仿真分析(椭圆形颗粒)

Fig. 13 Working process simulation analyse of outside precision seed metering devices when changing CAD model(Ellipse particles)

5 结束语

采用超圆方程建立了复杂颗粒形状的二维离散元法分析模型,提出采用外切矩形进行初步的接触检测,采用牛顿下山法进行超圆颗粒的精确接触检测、接触点求解和接触叠合量的计算,初步建立了基于超圆颗粒模型的二维离散元法颗粒的

计算方法,还用实例证明了本文所建立方法的正确性及有效性,为复杂形状颗粒运动的离散元法仿真分析提供了一种可行的方法。

参考文献:

[1] Bertrand F, Leclaire L A, Levecque G. DEM-based models for the mixing of granular materials [J]. Chemical Engineering Science, 2005, 60: 2517-2531.

[2] Jaeger H M, Nagel S R, Behringer R P. The physics of granular materials[J]. Physics Today, 1996, 49(2): 32-38.

[3] Cundall P A, Strack O L. A discrete numerical model for granular assemblies [J]. Geotechnique, 1979, 29(1): 47-65.

[4] Langston P A, Al-Awamleh M A, Fraige F Y, et al. Distinct element modelling of non-spherical frictionless particle flow[J]. Chemical Engineering Science, 2004, 59: 425-435.

[5] Williams J R, Pentland A P. Superquadratics and modal dynamics for discrete elements in interactive design [J]. Engineering Computations, 1992, 9: 115-127.

[6] Williams J R, Rege N. The development of circulation cell structures in granular materials undergoing compression [J]. Powder Technology, 1997, 90: 187-194.

[7] 付宏, 董劲男, 刘振宇, 等. 精密排种器的集成分析设计系统开发研究 [J]. 计算机集成制造系统, 2005, 11(5): 744-750.

Fu Hong, Dong Jin-nan, Liu Zhen-yu, et al. R&D of integrated analyzing & designing system for precision seed metering devices [J]. Computer Integrated Manufacturing Systems, 2005, 11(5): 744-750.