

УДК 519.63

© А. С. Караваяев, С. П. Копысов, А. С. Сармакеева

ПОСТРОЕНИЕ АГЛОМЕРАТОВ СФЕР В МЕТОДЕ ДИСКРЕТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

В работе предложен алгоритм построения агломерата сфер при аппроксимации геометрии тел произвольной формы в методе дискретных элементов. Для оценки получаемой поверхности произвольных тел введена мера, характеризующая микрорельеф поверхности сформированного агломерата.

Ключевые слова: метод дискретных элементов, агломерат сфер, оценка погрешности.

Введение

Метод дискретных элементов (МДЭ), широко используемый для исследования деформационных процессов в гранулированных (сыпучих), слабосвязанных средах, впервые был предложен в работе [1], где среда представлялась через ансамбль взаимодействующих сфер. Методом дискретных элементов также моделируют динамику твердых тел сложной формы [2], и в этом случае каждое тело состоит из множества жесткосвязанных сфер и представляется как мультисферный агломерат.

Существует несколько алгоритмов построения агломератов сфер. Построение агломерата из поверхностной треугольной сетки исследовано в [3]. При таком построении каждая сфера определяется четырьмя узлами поверхностной сетки путем решения, соответствующего уравнения второго порядка. В этом случае неизбежно появление сфер, находящихся за пределами модели, и необходимо применение специальной двухшаговой процедуры для их удаления.

В [4] исходной информацией для построения является множество точек, распределенных на поверхности моделируемого тела. Объем заполняется сферами разного радиуса, а построение начинается от случайно выбранной точки на поверхности, далее диаметр сферы растет вдоль направления внутренней нормали точки до достижения им максимального размера, когда сфера пересекает другую точку на поверхности модели. Процесс выбора новых точек регулируется расстоянием до уже построенных предыдущих сфер агломерата. К недостаткам этого алгоритма можно отнести сложность поиска максимального диаметра вписанной сферы и, как следствие, непростую программную реализацию метода. Отметим, что качество модели возрастает с увеличением плотности точек на поверхности. Развитием данного подхода можно считать [5], где также используется построение сфер из множества точек, описывающих поверхность моделируемого тела, которая предварительно покрывается сеткой с кубических ячейками. Добавление сфер в агломерат идет последовательно, начиная со сфер, охватывающих максимальное число кубических ячеек внутри тела. Однако построение сетки, содержащей кубические ячейки, для сложных тел является нетривиальной задачей. В этом случае в качестве исходных данных может быть использована геометрическая сетка, полученная путем компьютерной томографии реального физического тела [6]. Сетка характеризуется наличием внутренних и граничных узлов. Центры и радиусы сфер агломерата вычисляются путем анализа минимального расстояния от внутренних узлов до узлов на поверхности. Производительность предлагаемого метода существенно снижается для тел с развитой криволинейной поверхностью, когда для описания модели потребуется значительное число граничных узлов.

В работе [7] рассматривается метод построения агломерата из объемных данных в формате «знакоопределенных полей расстояний», когда каждый воксель сохраняет наименьшее расстояние до поверхности объекта с учетом знака. Построение агломерата осуществляется последовательно, начиная со сфер, имеющих максимальный радиус, аппроксимация модели контролируется количеством сфер, а также плотностью их наложения друг на друга.

Также, основываясь на объемных данных в формате «знакоопределенных полей расстояний», в работе [8] предложен метод построения шестигранных конечноэлементных сеток и алгоритм конвертации начальной поверхностной треугольной сетки, описывающей геометрическую

модель, в формате «знакоопределенных полей расстояний». Метод характеризуется простой программной реализацией, высокой производительностью, а также возможностью применения параллельных вычислений для больших моделей.

В данной работе исследуются возможности предложенных в [8] алгоритмов построения агломератов сфер из объемных данных. Исходные объемные данные получались как из воксельного представления, так и преобразованием поверхностной сетки, описывающей геометрическую модель. Приводятся результаты работы алгоритмов для различного числа сфер и плотности их распределения. Вводятся меры качества для оценки полученных агломератов сфер.

§ 1. Построение агломерата сфер

Для представления модели в виде агломерата сфер \mathcal{P} применяется декартова сетка вокселей \mathcal{V} в формате «знакоопределенных полей расстояний», представляющая собой трехмерный массив вокселей, содержащих наименьшее расстояние до границы модели с учетом знака. Любая сфера φ с центром в вокселе ν и радиусом r , равным значению вокселя f_ν , гарантированно находится внутри моделируемого объекта. Обозначим через Λ список вокселей внутри модели, при этом будем полагать, что элементы в нем отсортированы по значениям f_ν от большего к меньшему.

Построение агломерата \mathcal{P} происходит последовательно из отсортированного списка вокселей Λ внутри модели, начиная с вокселя, значение которого является наибольшим. Сфера $\varphi \in \mathcal{P}$, построенная из вокселя $\nu \in \Lambda$, определяется центром, расположенным в вокселе, и радиусом r_φ , равным значению вокселя f_ν .

Воксель $\nu \in \Lambda$ пропускается алгоритмом, если полученная из него сфера φ' будет целиком содержаться в одной из уже построенных сфер агломерата \mathcal{P} , то есть $\exists \varphi \in \mathcal{P}: \varphi' \subset \varphi$. Кроме того, сфера не строится, если расстояние между $\nu' \in \Lambda$ и центром p_φ одной из сфер $\varphi \in \mathcal{P}$ меньше определенной доли ее радиуса $\exists \varphi \in \mathcal{P}: \|\nu - p_\varphi\| / r_\varphi < \mathcal{R}$, где \mathcal{R} — значение, характеризующее расстояние между центрами сфер агломерата \mathcal{P} . В случае $\mathcal{R} \geq 1$ центр p_φ любой сферы не может располагаться внутри других сфер, при этом для $\mathcal{R} < 1$ возможно расположение точки p_φ внутри другой сферы на расстоянии не ближе \mathcal{R} относительно ее радиуса. Уменьшение параметра \mathcal{R} позволяет создать более плотное наложение сфер друг на друга, тем самым обеспечив сглаженную поверхность модели. Предлагаемый алгоритм включает следующие основные шаги (см. алгоритм 1).

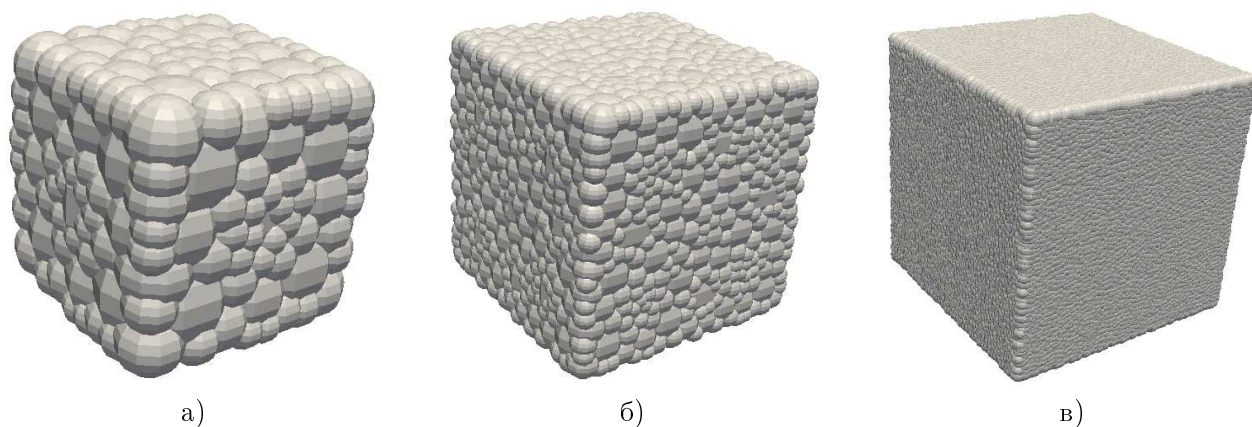


Рис. 1. Модель шестигранного тела, представленная агломератом сфер: а) $\mathcal{R} = 0.85, P = 200$; б) $\mathcal{R} = 0.85, P = 1000$; в) $\mathcal{R} = 0.5, P = 15000$

В реализации алгоритма предусмотрена возможность определения максимального числа элементов P_{\max} , содержащихся в \mathcal{P} , так как с уменьшением параметра \mathcal{R} число сфер P в агломерате возрастает.

На рисунках 1 и 2 представлены аппроксимации моделей куба и расчетной шестигранной сетки модели позвоночника человека соответственно. Характеристики сферических агломератов приведены в таблице 1, где V^P и V^T — объемы агломерата \mathcal{P} и шестигранной сетки \mathcal{T} ,

Алгоритм 1 Построение агломерата сфер $\mathcal{P}(\dim, \mathcal{R})$ трехмерного тела

Require: Сетка вокселей \mathcal{V} размерности

$\dim V = \dim_z \times \dim_y \times \dim_x$ на расчетной области

```

1: Инициализировать список  $\Lambda = \emptyset$ 
2: Инициализировать агломерат  $\mathcal{P} = \emptyset$ 
3: for  $z = 1; z < \dim_z; z++$  do
4:   for  $y = 1; y < \dim_y; y++$  do
5:     for  $x = 1; x < \dim_x; x++$  do
6:       if  $f_{\nu(x,y,z)} > 0$  then
7:         Добавить  $\nu(x,y,z)$  в список  $\Lambda$ 
8:       end if
9:     end for
10:   end for
11: end for
12: Отсортировать список  $\Lambda$  по убыванию
13: for all  $\nu \in \Lambda$  do
14:   if  $P > P_{\max}$  then
15:     break
16:   end if
17:   Инициализировать сферу  $\varphi' : p_{\varphi'} = \nu, r_{\varphi'} = f_{\nu}$ 
18:   if  $\exists \varphi \in \mathcal{P}, \varphi' \subset \varphi \vee \exists \varphi \in \mathcal{P}, \frac{\|\nu - p_{\varphi}\|}{r_{\varphi}} < \mathcal{R}$  then
19:     continue
20:   end if
21:   Добавить  $\varphi'$  в  $\mathcal{P}$ 
22: end for

```

построенных для некоторой рассчитываемой области. Параметр Q_V находится как соотношение $V^{\mathcal{P}}/V^{\mathcal{T}}$ и оценивает точность аппроксимации объема модели, вычисленного для агломерата сфер и соответствующей шестигранной сетки. Значение Q_r — гладкость получаемой поверхности. Отметим, что относительная разница объемов агломерата и модели не превышает 10%, что дает достаточно точную аппроксимацию области, при этом значение Q_V уменьшается с увеличением количества сфер в агломерате.

Таблица 1. Характеристики мультисферных агломератов.

Характеристика	Шестигранник			Позвонок		
	$P = 200$	$P = 1000$	$P = 15000$	$P = 200$	$P = 1000$	$P = 15000$
\mathcal{R}	0.85	0.85	0.5	0.85	0.85	0.5
$V^{\mathcal{P}}$	58.572	61.1457	63.018	31601.4	35338.8	37948.4
$V^{\mathcal{T}}$	64	64	64	39068.6	39068.6	39068.6
Q_V	0.91	0.95	0.98	0.81	0.90	0.97
Q_r	0.92	0.82	0.12	0.82	0.56	0.03

§ 2. Масса и центр инерции агломерата

Объем V и, соответственно, масса агломератов сфер $m = \rho V$ вычисляются на сетке равномерно распределенных точек методом Монте–Карло. Центр инерции \vec{p}_c агломерата определяется как центр инерции системы точек, попавших внутрь агломерата при вычислении его объема.

Для увеличения точности вычисляемого объема шаг распределения точек $\vec{h} = k \cdot h, k \in (0, 1]$ выбирался не превышающим шаг h декартовой сетки вокселей \mathcal{V} , из которой был построен агломерат. В рассмотренных далее примерах принималось $k = 0.5$. При известных координатах $\vec{p}_0, \vec{p}_{\dim}$ первого и последнего вокселя \mathcal{V} и сетки размерности $\dim V = \dim_z \times \dim_y \times \dim_x$ вычисление массы и центра инерции однородного агломерата \mathcal{P} выглядит так, как показано в алгоритме 2.

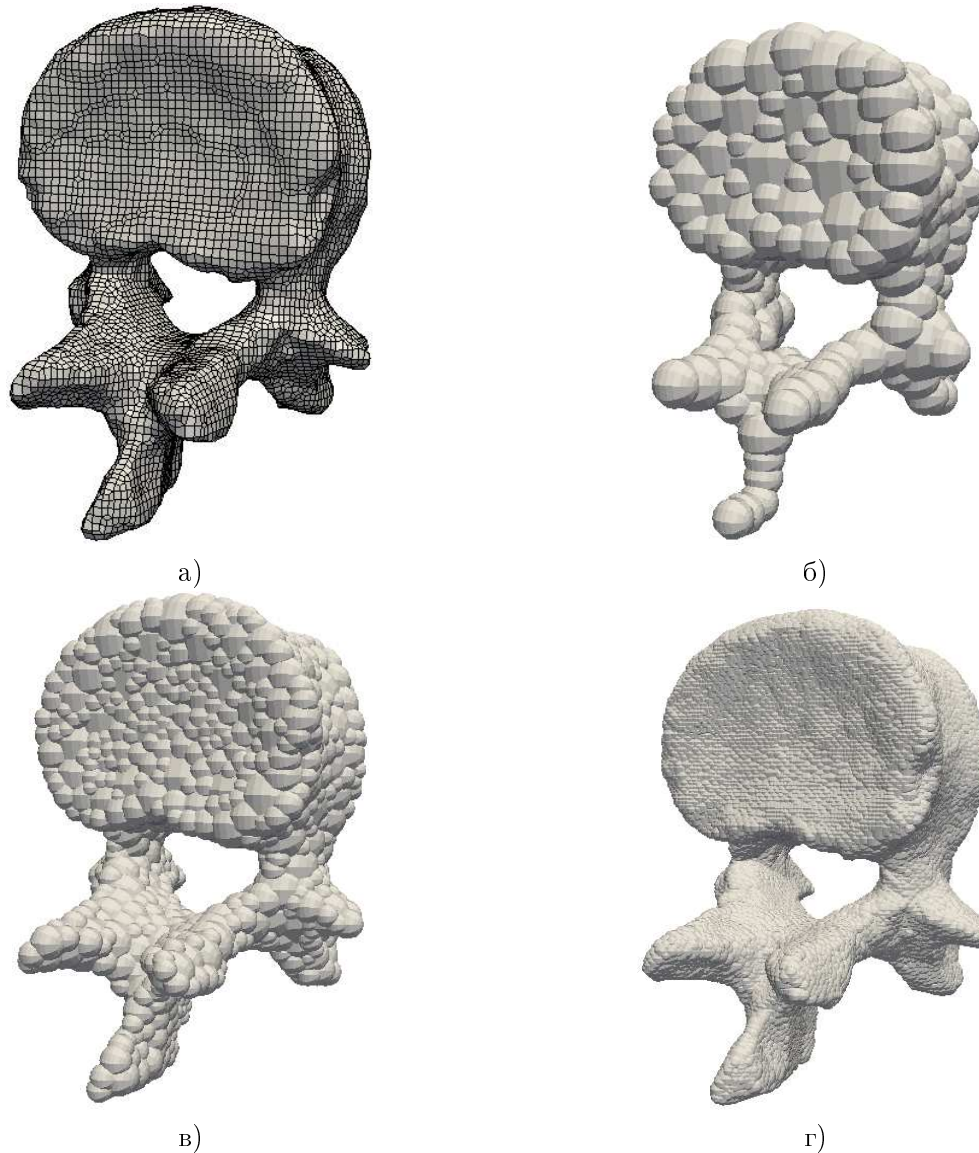


Рис. 2. Модели отдельного позвонка позвоночного столба: а) конечно-элементная сетка шестигранных ячеек; агломераты сфер для МДЭ: б) $\mathcal{R} = 0.85, P = 200$; в) $\mathcal{R} = 0.85, P = 1000$; г) $\mathcal{R} = 0.5, P = 15000$

Представленный алгоритм позволяет с заданной точностью определять инерциальные свойства агломерата сфер. Отметим, что наряду с простотой метода он обладает значительными вычислительными затратами. При практической реализации алгоритма необходимо использовать технологии параллельных вычислений.

§ 3. Оценка качества построения поверхности агломерата сфер

Другими значимыми параметрами агломератов при рассмотрении динамики соударения твердых тел являются параметры формы тел такие, как [9] сферичность, определяемая как отношение радиуса наибольшей вписанной в тело сферы к минимальному радиусу сферы, описанной вокруг тела; эллиптичность, вычисляемая как отношение осредненного радиуса кривизны поверхности к радиусу максимальной сферы, вписанной в тело; гладкость/шероховатость поверхности, которая определяется совокупностью неровностей на базовой длине.

При построении агломерата сфер микрорельеф поверхности формируется за счет множества непересекающихся частей сфер. По аналогии с вычислением объема для оценки гладкости/шероховатости поверхности агломерата предлагается следующий алгоритм.

Определим декартову сетку \bar{V} с шагом распределения $\bar{h} = k \cdot h$, $k \in (0, 1]$ (в рассмотренных

Алгоритм 2 Вычисление массы и центра инерции агломерата \mathcal{P}

Require: Сетка вокселей \mathcal{V} , агломерат сфер \mathcal{P}

```

1:  $\bar{h} \approx k \cdot h$ 
2:  $V = 0, \vec{p}_c = \vec{0}, n_1 = 0, n_2 = 0$ 
3: for  $z = 1; z < dim_z; z++$  do
4:   for  $y = 1; y < dim_y; y++$  do
5:     for  $x = 1; x < dim_x; x++$  do
6:       Вычислить  $\vec{p} = (\bar{h}x + \vec{p}_0[1], \bar{h}y + \vec{p}_0[2], \bar{h}z + \vec{p}_0[3])$ 
7:        $out = \mathbf{true}$ 
8:       for all  $\varphi \in \mathcal{P}$  do
9:         if  $\|\vec{p}_\varphi - \vec{p}\| \leq r_\varphi$  then
10:            $out = \mathbf{false}$ 
11:           break
12:         end if
13:       end for
14:       if  $out$  then
15:          $n_2 = n_2 + 1$ 
16:       else
17:          $n_1 = n_1 + 1$ 
18:          $\vec{p}_c = \vec{p}_c + \vec{p}$ 
19:       end if
20:     end for
21:   end for
22: end for
23:  $\vec{p} = \vec{p}_{dim} - \vec{p}_0$ 
24:  $V = \frac{n_1}{n_2} \vec{p}[1] \vec{p}[2] \vec{p}[3]$ 
25:  $\vec{p}_c = \vec{p}_c / n_1$ 

```

далее в примерах принималось $k = 0.5$). На основе \bar{V} построим поверхностную четырехугольную сетку \mathcal{T} для линии уровня I_α согласно алгоритму [8]. Гладкость поверхности агломерата Q_r определим отношением числа узлов \tilde{N} поверхностной сетки, которые не попали внутрь \mathcal{P} к общему числу узлов N , содержащихся в множестве вершин \mathcal{N} сетки \mathcal{T} .

На рисунке 3, а) серым изображена линия уровня $I_{\alpha'}$ для $\alpha = 0$, совпадающая с границей аппроксимируемой модели куба. В таком случае $I_{\alpha'}$ целиком включает в себя агломерат \mathcal{P} , обозначенный более темным цветом, и пересекается с ним только в отдельных точках. С увеличением α до $\alpha = 1.5$ линия уровня $I_{\alpha''}$ продвигается «внутрь» объекта, что приводит к появлению областей пересечений, как показано на рисунке 3, б). Построенная четырехугольная сетка \mathcal{T} для $I_{\alpha''}$ изображена на рисунке 3, в). Вершины сетки, которые не попали в области пересечений \mathcal{P} и \mathcal{T} (обозначены темным), составляют множество \tilde{N} . Представим алгоритм оценки

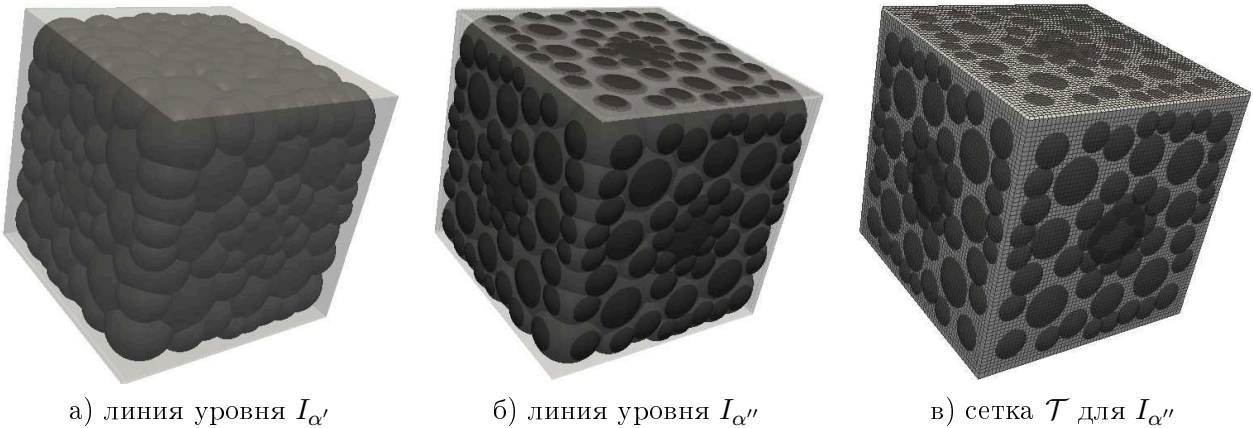


Рис. 3. Мера гладкости поверхности агломерата.

качества поверхности агломерата сфер так, как показано в алгоритме 3:

Алгоритм 3 Вычисление гладкости поверхности агломерата \mathcal{P}

Require: Сетка вокселей \mathcal{V} , агломерат сфер \mathcal{P}

```
1:  $\bar{h} = k \cdot h, \tilde{N} = 0$ 
2: Построить сетку вокселей  $\tilde{\mathcal{V}}$  с шагом  $\bar{h}$ 
3: На основе  $\tilde{\mathcal{V}}$  построить сетку  $\mathcal{T}$  для линии уровня  $I_\alpha$ , соответствующей значению  $\alpha$  [8]
4: for all  $p \in \mathcal{N} \subset \mathcal{T}$  do
5:    $out = \mathbf{true}$ 
6:   for all  $\varphi \in \mathcal{P}$  do
7:     if  $\|\vec{p}_\varphi - \vec{p}\| \leq r_\varphi$  then
8:        $out = \mathbf{false}$ 
9:       break
10:    end if
11:  end for
12:  if  $out$  then
13:     $\tilde{N} = \tilde{N} + 1$ 
14:  end if
15: end for
16:  $Q_r = \tilde{N}/N$ 
```

Оценки гладкости Q_r для агломератов куба и позвонка представлены в таблице 1. Как видно из таблицы, для фиксированного значения α параметр Q_r уменьшается с возрастанием количества сфер в агломерате и уменьшением \mathcal{R} . В случае увеличения α значение гладкости улучшается и с некоторого момента становится равным идеальному значению $Q_r = 0$, однако при уменьшении α наблюдается увеличение Q_r . Значение $Q_r \approx 1$ достигается при значении $\alpha = 0$, когда линия уровня совпадает с поверхностью аппроксимируемой модели. Для увеличения точности работы алгоритма возможно увеличение множества вершин $\mathcal{N} \subset \mathcal{T}$, что достигается перестроением четырехугольной сетки, а также добавлением произвольных точек в ее ячейках.

Полученные агломераты использовались в вычислительных экспериментах дискретно-элементного моделирования динамики соударения твердых тел.

Список литературы

1. Cundall P., Starck O. A discrete numerical model for granular assemblies // *Géotechnique*. 1979. Vol. 29. № 1. P. 47–65. DOI: 10.1680/geot.1979.29.1.47
2. Luding S. Introduction to discrete element methods: basic of contact force models and how to perform the micro-macro transition to continuum theory // *European Journal of Environmental and Civil Engineering*. 2008. Vol. 12. № 7–8. P. 785–826. DOI: 10.1080/19648189.2008.9693050
3. Price M., Murariu V., Morrison G. Sphere clump generation and trajectory comparison for real particles // *Proceedings of 5th International Conference on Discrete Element Methods*. LCPC. Paris, 2007. P. 239–246.
4. Ferrellec J.-F., McDowell G. R. A method to model realistic particle shape and inertia in DEM // *Granular Matter*. 2010. Vol. 12. № 5. P. 459–467. DOI: 10.1007/s10035-010-0205-8
5. Garcia X., Latham J.-P., Xiang J., Harrison J.P. A clustered overlapping sphere algorithm to represent real particles in discrete element modelling // *Géotechnique*. 2009. Vol. 59. № 9. P. 779–784. DOI: 10.1680/geot.8.T.037
6. Gao R., Du X., Zeng Y., Li Y., Yan J. A new method to simulate irregular particles by discrete element method // *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*. 2012. Vol. 4. № 3. P. 276–281.
7. Amberger S., Friedl M., Goniva C., Pirker S., Kloss C. Approximation of objects by spheres for multisphere simulations in DEM // *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2012)*. Vienna, 2012. P. 5446–5458.
8. Караваев А.С., Копысов С.П. Метод построения неструктурированных шестигранных сеток из объемных данных // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2013. Вып. 5. С. 11–24.
9. Cho G.-C., Dodds J., Santamarina J.C. Particle Shape Effects on Packing Density, Stiffness, and Strength: Natural and Crushed Sands // *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*. 2006. Vol. 132. № 5. P. 591–602.

Поступила в редакцию 30.09.2015

Караваяев Александр Сергеевич, аспирант, Институт механики УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.

E-mail: karavaev-alexander@yandex.ru

Копысов Сергей Петрович, д. ф.-м. н., заведующий лабораторией, Институт механики УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.

E-mail: s.kopysov@gmail.com

Сармакеева Анастасия Семеновна, младший научный сотрудник, Институт механики УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.

E-mail: asarmakeeva@gmail.com

A. S. Karavaev, S. P. Kopysov, A. S. Sarmakeeva
Construction of clumps for discrete element method

Keywords: discrete element method, clump, error estimation.

MSC: 65M55, 65M75

In this article an algorithm of clumps construction under approximation of the arbitrary shaped bodies geometry in the discrete element method is reviewed. To estimate the surface of arbitrary bodies a measure characterizing the surface microrelief of the formed clump is introduced.

REFERENCES

1. Cundall P., Strack O. A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, 1979, vol. 29, no. 1, pp. 47–65. DOI: 10.1680/geot.1979.29.1.47
2. Luding S. Introduction to discrete element methods: basic of contact force models and how to perform the micro-macro transition to continuum theory, *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 2008, vol. 12, no. 7-8, pp. 785–826. DOI: 10.1080/19648189.2008.9693050
3. Price M., Murariu V., Morrison G. Sphere clump generation and trajectory comparison for real particles, *Proceedings of 5th International Conference on Discrete Element Methods*, LCPC, Paris, 2007, pp. 239–246.
4. Ferrellec J.-F., McDowell G.R. A method to model realistic particle shape and inertia in DEM, *Granular Matter*, 2010, vol. 12, no. 5, pp. 459–467. DOI: 10.1007/s10035-010-0205-8
5. Garcia X., Latham J.-P., Xiang J., Harrison J.P. A clustered overlapping sphere algorithm to represent real particles in discrete element modelling, *Géotechnique*, 2009, vol. 59, no. 9, pp. 779–784. DOI: 10.1680/geot.8.T.037
6. Gao R., Du X., Zeng Y., Li Y., Yan J. A new method to simulate irregular particles by discrete element method, *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 2012, vol. 4, no. 3, pp. 276–281.
7. Amberger S., Friedl M., Goniva C., Pirker S., Kloss C. Approximation of objects by spheres for multisphere simulations in DEM, *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2012)*, Vienna, 2012, pp. 5446–5458.
8. Karavaev A.S., Kopysov S.P. The method of constructing unstructured hex mesh for volumetric data, *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovaniye*, 2013, vol. 5, pp. 11–24 (in Russian).
9. Cho G.-C., Dodds J., Santamarina J.C. Particle shape effects on packing density, stiffness, and strength: natural and crushed sands, *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 2006, vol. 132, no. 5, pp. 591–602.

Received 30.09.2015

Karavaev Aleksandr Sergeevich, Post-Graduate Student, Institute of Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. T. Baramzinoi, 34, Izhevsk, 426067, Russia.

E-mail: karavaev-alexander@yandex.ru

Kopysov Sergei Petrovich, Doctor of Physics and Mathematics, Head of Laboratory, Institute of Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. T. Baramzinoi, 34, Izhevsk, 426067, Russia.

E-mail: s.kopysov@gmail.com

Sarmakeeva Anastasiya Semenovna, Junior Researcher, Institute of Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. T. Baramzinoi, 34, Izhevsk, 426067, Russia.

E-mail: asarmakeeva@gmail.com