

基于球面沃罗诺伊的颗粒表面离散与重构方法

吴 峰¹, 黄林冲¹, 赖正首²

(1. 中山大学 航空航天学院, 深圳 518107; 2. 中山大学 智能工程学院, 深圳 518107.)

摘 要: 提出了一种基于球面沃罗诺伊、球谐函数及计算机断层扫描的岩土颗粒表面离散与重构方法。该方法在球坐标参数空间采样的基础上, 采用带权重的加权球面质心沃罗诺伊对采样点进行自适应分布, 并给出了两种表面重构的加权公式: 基于径向距离加权和基于曲率加权。该方法适用于如二次曲面或球谐函数等隐式函数描述的颗粒表面的网格化离散, 以及通过计算机断层等方法得到的颗粒原始表面的优化重构, 其优点是: 可以重构得到任意数量节点的表面网格; 提供了一种控制表面网格节点分布密度的灵活方法。对重构后的颗粒进行形状参数分析和离散元模拟, 分析并验证了该方法应用于颗粒表面离散与重构的有效性、准确性, 其可以简化复杂的表面网格、减少颗粒表面节点, 同时保证形状参数的误差在较小的范围, 显著减少离散元模拟的时间成本, 而不影响最终模拟结果。

关键词: 岩土工程; 表面重构; 离散元; 沃罗诺伊; 球谐函数

中图分类号: TU451 文献标志码: A doi: 10.6052/j.issn.1000-4750.2022.07.0614

A SPHERICAL VORONOI TESSELLATION-BASED APPROACH FOR PARTICLE SURFACE DISCRETIZATION AND RECONSTRUCTION

WU Feng¹, HUANG Lin-chong¹, LAI Zheng-shou²

(1. School of Aeronautics and Astronautics Engineering, Sun Yat-sen University, Shenzhen 518107, China;

2. School of Intelligent Systems Engineering, Sun Yat-sen University, Shenzhen 518107, China)

Abstract: A spherical Voronoi tessellation and spherical harmonics-based approach is proposed for reconstructing high-quality particle surface from X-ray computed tomography. This approach adopts the spherical coordinate system for particle surface parametrization and utilizes weighted spherical Voronoi tessellation to adaptively adjust the locations of the sampled parametric points. Two formulations of weights for the Voronoi seeds are developed, namely one based on radial distance and one based on curvature. The approach proposed can be applied to the surface discretization of particles represented by implicit functions, such as quadrics or spherical harmonics, and to the reconstruction of particle surfaces that are originally obtained from imaging technical such as X-ray computed tomography. It has two advantages: It can provide surface meshes with any number of nodes; It offers a flexible option to control the distribution of the surface mesh nodes. The shape characterization analysis and discrete element simulation of the reconstructed particles are carried out to analyze and to verify the effectiveness and accuracy of the proposed approach. Analysis results indicate that: the approach can effectively simplify complex surface meshes, reduce particle surface nodes, and preserve shape morphology descriptors; thusly, significantly reduces the time cost of discrete element simulation.

Key words: geotechnical engineering; surface reconstruction; discrete element method; Voronoi; spherical harmonics

投稿日期: 2022-07-07; 修改日期: 2022-11-04;

基金项目: 国家自然科学基金 (51909289, 51978677); 国家自然科学基金国际(地区)合作与交流项目 (NSFC-FWO) (52111530089)。

通讯作者: 赖正首(1990—), 男, 江西赣州人, 博士后, 博士, 主要从事岩土计算力学研究(E-mail: laizhengsh@mail.sysu.edu.cn)。

作者简介: 吴 峰(1996—), 男, 安徽合肥人, 硕士生, 主要从事岩土计算力学研究(E-mail: wufeng36@mail2.sysu.edu.cn);

黄林冲(1980—), 男, 湖北咸宁人, 教授, 博士, 博导, 主要从事地下结构研究(E-mail: hlinch@mail.sysu.edu.cn)。

颗粒表面离散是指通过表面点采样，从而将连续性的颗粒表面用离散的、但彼此连接的多边形网格（如三角形网格）描述；而颗粒表面重构是指生成一套全新的、满足一定网格特征的多边形网格，以替换原来的连续性颗粒表面或多边形网格。颗粒表面离散或重构通常在岩土颗粒材料的微观重构^[1-2]、可视化或数值模拟（如离散元方法^[3-5]）中涉及。比如，为获取岩土颗粒材料的真实颗粒形态，可采用旋转激光扫描^[6]或计算机断层扫描（CT）^[7]、并通过一定的数字图像处理技术得到表示颗粒表面的点云，但该点云难以满足可视化平滑度或数值模拟计算效率的要求。在岩土颗粒材料的离散元数值模拟中，可采用椭球、超椭球、球谐函数等颗粒模型模拟不规则形态颗粒，而一些通用的接触算法（如 node-to-surface 算法^[8]）则需要将隐式的颗粒表面离散成显式的表面节点、进而用于接触判断和接触力计算。

岩土颗粒材料的表面形态一般呈封闭的类球状。在点云的基础上，可采用椭球、超椭球、球谐函数等几何形状去拟合该点云，再基于拟合得到的几何形状并按照一定的采样和拓扑规则进行表面离散，即可把颗粒表面重构问题转化成颗粒表面离散问题。而针对颗粒表面离散问题，假设

颗粒为星状（star-shaped，即由颗粒内部某点为中心往任意方向发生的射线与颗粒表面仅有一个交点），颗粒表面因此可采用球坐标（即天顶角与方位角）进行参数化，进而采用一定的参数抽样及拓扑规则得到多边形网格，实现颗粒表面离散。需要注意的是，不同的应用场景可能需要不同的颗粒表面网格特征。比如，在具有棱角尖锐等特征的颗粒材料的形态表征（如体积、表面积、圆度、粗糙度等）问题中，需要在颗粒棱角部分分布较密的点以尽可能逼近颗粒的真实形态；在基于 node-to-surface 接触算法的离散元模拟中，则需要颗粒表面点云尽可能均匀分布，以提高计算效率与稳定性。

关于颗粒表面点采样，传统方案包括等角网格法、二十面体细分方法和斐波那契或黄金螺旋格方法^[9,10]。第一种方案将导致在极点附近产生严重密集的点，且采样点的数量难以灵活控制；而后两种方案虽然可以在球坐标参数空间提供一个相对均匀的点云，但映射到颗粒表面时，极半径的变化将导致颗粒表面的点云密度差异，即离中心点近的区域点云较密、而远的区域点云较疏（见图 1）。

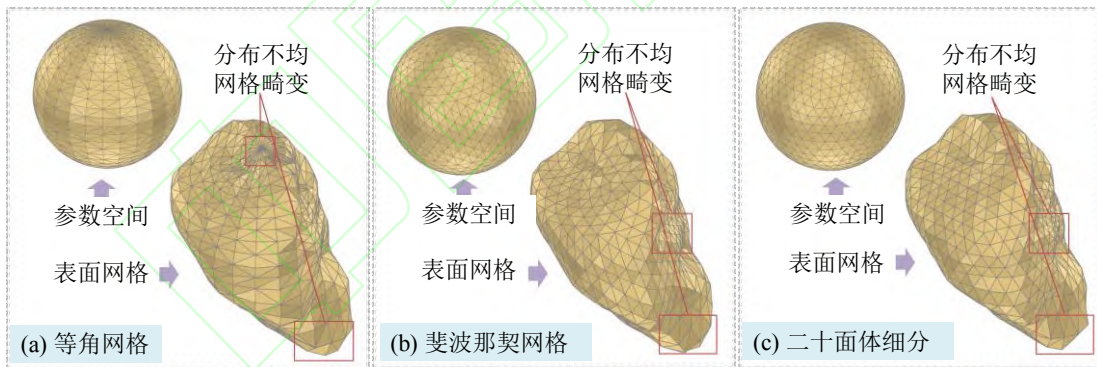


图 1 传统的球坐标参数空间采样及其对应的颗粒表面网格

Fig.1 Classical spherical coordinates sampling schemes and their corresponding particle surface discretization

在计算图形学和数值模拟领域（如有限元^[11,12]），也有较为成熟的针对实体对象表面的网格划分方法，常见的有曲面分解法^[13]、映射法^[14]等。曲面分解法的基本原理是通过将原始曲面不断地递归分解为较小的三角形面片单元，直到这些小单元在给定的误差下可精确模拟原始曲面为止，最终形成对原始曲面的三角划分。这种方法最大的优点就是具有曲面自适应能力，对复杂曲面的逼近程度较好。但它的计算速度较慢且缺乏对网格的

局部控制能力。而映射法首先在曲面的二维参数空间中利用平面域网格生成方法进行网格剖分，然后将剖分结果反向映射回物理空间，形成曲面网格。曲面网格剖分的映射法也称为参数空间法。平面域网格生成方法已经相对成熟，可以生成质量良好的三角形单元网格。但是参数空间上单元形状良好的网格映射到物理空间后往往会出现畸变。许多学者针对此问题对传统映射法进行了不懈的改进，使映射法的曲面适应能力得到了增强。

但是上述基于有限元发展而来的网格划分方法，其对象表面多由规则曲面如球面、圆锥面、圆柱等构成，将上述方法应用于岩土颗粒材料的颗粒表面与重构时仍具有一定的局限性，且计算效率较低。Feng^[15]提出了一种颗粒表面三角网格的建模策略。其特点是：1) 在单位球上使用斐波那契法为星形颗粒的曲面生成任意数量顶点/三角形的初始三角形网格；2) 应用边缘收缩网格简化算法将网格尺寸减小到任何期望的水平；特别地，边缘收缩算法适用于任何三角形网格。它在算法上非常简单和高效，并且可以很容易地合并到现有的离散元素框架中。但是在从参数空间映射到颗粒表面时，依然可能出现网格畸变的现象，难以实现对于局部点云密度的有效控制。

有鉴于此，本文提出一种基于加权球面质心沃罗诺伊 (weighted spherical centroidal Voronoi tessellation, WSCVT) 的颗粒表面离散与重构方法，它在球坐标参数空间采样的基础上，针对表面点的分布提出了新的权重函数，采用带权重的球面质心沃罗诺伊对采样点进行自适应分布。此方法的两大优点是：1) 其可以用来获得任意数量的表面点，2) 简化网格分布较密，节点数量较多的颗粒表面，3) 其提供了一种灵活的控制点云局部密度的方法，以满足不同网格特征的颗粒表面离散或重构的需求。

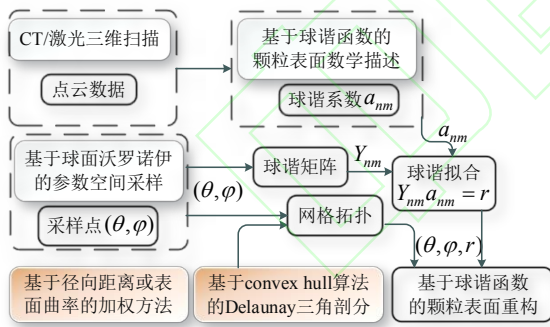


图 2 颗粒表面重构流程图

Fig.2 Flow chart of particle surface reconstruction

本文提出的算法是在 CT 或激光扫描得到的点云数据的基础上实现。通过点云数据生成三角形网格，以此为初始的网格拓扑和采样点，将其用球谐函数拟合，得到球谐系数用于后续重构；然后用加权球面质心沃罗诺伊实现对参数空间的重采样；最后用重采样的参数坐标和球谐系数重构颗粒表面。流程如图 2 所示，具体实施细节见

下一章节。

1 基于球面沃罗诺伊的颗粒表面离散与重构方法

1.1 球坐标参数空间与球谐函数

对于三维星状不规则颗粒，将其形心移至坐标轴原点，则其表面点可以用球坐标系描述，如图 3 所示。

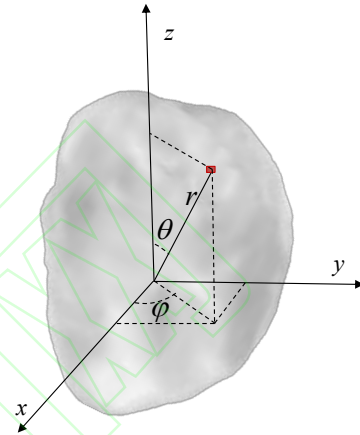


图 3 颗粒表面的球坐标描述

Fig.3 Spherical coordinate description of particle surface

在球坐标系下，原点到颗粒表面的径向距离 r 可以表示为天顶角与方位角 (θ, φ) 的函数 $r(\theta, \varphi)$ 。球坐标 (r, θ, φ) 与笛卡尔坐标 (x, y, z) 可以通过下式转换：

$$(x, y, z) = r(\theta, \varphi)(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) \quad (1)$$

不失一般性的，三维星状颗粒的表面或者径向距离函数 $r(\theta, \varphi)$ 可表示扩展为球谐函数的唯一线性组合^[16,17]：

$$r(\theta, \varphi) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=-n}^n a_{n,m} Y_n^m(\cos \theta) \quad (2)$$

其中， n 为度数、 m 为阶数、 N 为截断度数、 $a_{n,m}$ 为球谐系数， $Y_{n,m}(\theta, \varphi)$ 为球谐函数，其具体形式为：

$$Y_n^m(\theta, \varphi) = \begin{cases} (-1)^m \sqrt{2} c_{n,m} P_n^{-m}(\cos \theta) \sin(-m\varphi) & m < 0 \\ \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}} P_n^m(\cos \theta) & m = 0 \\ (-1)^m \sqrt{2} c_{n,-m} P_n^m(\cos \theta) \cos(m\varphi) & m > 0 \end{cases} \quad (3)$$

其中， $P(x)$ 为伴随勒让德函数， $c_{n,m}$ 为归一

化常数:

$$c_{n,m} = \sqrt{\frac{(2n+1)(n+m)!}{4\pi(n-m)!}} \quad (4)$$

1.2 基于球谐函数的颗粒表面离散与重构

颗粒表面离散一般包括两个重要步骤: 点采样和网格拓扑。点采样可通过参数坐标 (θ, φ) 抽样得到, 网格拓扑可通过球坐标参数空间中的采样点的球面狄洛尼 (Delaunay) 三角形网格剖分得到。其中参数坐标 (θ, φ) 抽样将通过加权球面质心沃罗诺伊方法进行, 具体方法将在下一小节讨论。

对于颗粒表面重构, 给定描述颗粒表面的点云 (可通过旋转激光扫描或计算机断层扫描得到), 将其依次带入式 (2) 可关于球谐系数 $a_{n,m}$ 的线性方程组:

$$\begin{bmatrix} Y_1^1 & Y_1^1 & \dots & Y_1^{(n+1)^2} \\ Y_2^1 & Y_2^2 & \dots & Y_2^{(n+1)^2} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ Y_i^1 & Y_i^2 & \dots & Y_i^{(n+1)^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^1 \\ a^2 \\ \vdots \\ a^{(n+1)^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_i \end{bmatrix} \quad (5)$$

式中, 下标 i 表示点的编号、上标为二维编号 n 及 m 的一维形式, 即 N 度的球面调和级数一共包含 $(n+1)^2$ 项。求解方程组即可得到颗粒表面对应的球谐系数, 而后基于球谐函数对颗粒表面重新离散即可完成对颗粒表面的重构。

1.3 基于球面沃罗诺伊的参数空间采样

1.3.1 球面沃罗诺伊

沃罗诺伊剖分是计算图形学领域一种常用的空间剖分方法^[18,19]。假设空间内有 n 个不重合的种子点 (seed), 把空间分为 n 个单元 (cell), 使得每个单元内的点到它所在单元的种子的距离比到其它单元种子点的距离近, 则此单元划分方式即为沃罗诺伊剖分, 每个单元称为该种子对应的沃罗诺伊单元。

不同于传统的沃罗诺伊剖分, 球面沃罗诺伊是一种特殊的针对球面空间的剖分方式, 沃罗诺伊种子、点之间的距离和沃罗诺伊单元都定义在球面空间上。如图 4, 黑色的点表示沃罗诺伊种子, 多边形面片表示沃罗诺伊单元。在球面沃罗诺伊剖分中, 两点之间的距离定义为大圆的劣弧长度, 每个沃罗诺伊单元格由一组大圆劣弧组成。在球面沃罗诺伊的基础上, 可定义球面质心沃罗诺伊, 其特点是每个沃罗诺伊单元的种子都在单

元的质心上。进一步的, 加权球面质心沃罗诺伊剖分表示: 每个单元内的点到它所在单元的种子点的加权距离比到其它单元种子点的加权距离近。在本文中, 沃罗诺伊的种子点将作为参数坐标 (θ, φ) 抽样的采样点, 而沃罗诺伊对应的狄洛尼三角剖分将作为表面网格的拓扑关系, 进而实现颗粒表面的离散或重构。

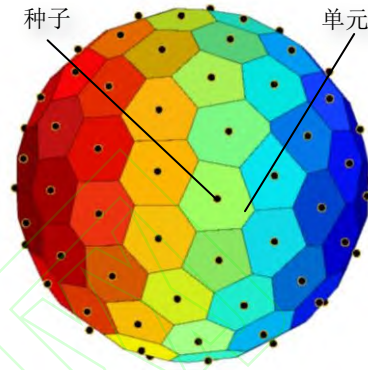


图 4 球面质心沃罗诺伊示意图

Fig.4 Illustrative diagram of spherical centroidal Voronoi tessellation

1.3.2 构造算法

为构造加权球面质心沃罗诺伊剖分, 首先定义三角形的加权质心和球面多边形的加权质心如下。给定顶点为 A 、 B 、 C 的三角形, 其加权质心 O 满足:

$$\begin{aligned} d_w(x_O, x_A, w_A) &= d_w(x_O, x_B, w_B) \\ &= d_w(x_O, x_C, w_C) \end{aligned} \quad (6)$$

式中: x_A 、 x_B 、 x_C 和 x_O 分别为顶点 A 、 B 、 C 、 O 点的坐标; w 为顶点处对应的权值; d_w 为加权距离函数, 定义为:

$$d_w(x_O, x_A, w_A) = |x_A - x_O|^2 - w_A \quad (7)$$

式中, 符号 $|x|$ 表示欧氏距离。对于某些特定组合的权重值, 上述定义的三角形加权质心可能并不存在。因此, 本工作采用近似的三角形加权质心, 其计算步骤如下:

- 1) 假设三角形各边的加权中点分别为 O_{AB} 、 O_{BC} 和 O_{AC} , 其分别满足:

$$d_w(x_{O_{AB}}, x_A, w_A) = d_w(x_{O_{AB}}, x_B, w_B) \quad (8)$$
- 2) 绘制通过每条边的加权中点并垂直于相应边的三条垂线, 并计算两两相交的垂线的三个交点 I_A 、 I_B 、 I_C , 见图 5 (a);
- 3) 计算内三角形三个顶点的算法平均值作为这大三角形的加权质心 O_i ;

4) 将三角形的加权质心通过它的欧氏距离进行归一化, 从而将其投影到单位球上。

如图 5 (b) 所示, 球面多边形的质心计算为:

$$x_{O_v} = \frac{\sum_i^N A_i x_{O_i}}{\sum_i^N A_i} \quad (9)$$

式中: A_i 为三角形 $V_i V_{i+1} O_v$ 的面积 (欧几里得); O_v 为质心的初始假设值, 大小可以设为球面多边形所有顶点的算术平均值; x_{O_i} 为三角形 $V_i V_{i+1} O_v$ 的质心; 下标 i 表示索引, N 为顶点数。此外, x_{O_v} 将通过其欧氏距离进行归一化, 以投影到单位球面上。

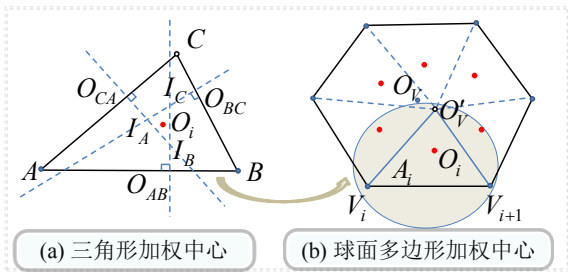


图 5 三角形加权质心及球面多边形加权质心示意图

Fig.5 Illustrative diagram of the weighted centroid of (a) triangle and (b) spherical polygon

需要注意的是, 利用三角形距离和平面面积代替精确的大圆距离和球面面积, 简化了三角形加权质心和球面多边形质心的计算。在有大量的沃罗诺伊种子的情况下, 由于这种简化而造成的误差影响可以忽略不计。

其中基于三角形加权质心和球面多边形加权质心的计算方法, 加权球面质心沃罗诺伊的构造算法如下:

1) 初始化一组随机的沃罗诺伊种子;

2) 根据当前种子的位置和选用的权重函数, 计算它们的权重;

3) 利用 convex hull 算法建立沃罗诺伊种子的 Delaunay 三角剖分;

4) 计算三角剖分中每个三角形的加权质心 (中心);

5) 针对每个沃罗诺伊种子, 收集其所在的所有 Delaunay 三角形的加权质心, 并按逆时针次序排序, 构建与其相对应的沃罗诺伊单元;

6) 计算每个沃罗诺伊单元的质心 (中心), 并将其种点移动到该质心;

7) 重复步骤 2-6, 直到沃罗诺伊种子和沃罗

诺伊单元质心之间的距离在误差范围内, 或达到最大迭代次数。

1.3.3 两类权重函数

为适应不同网格特征的需要, 本文提出两种基于曲面特征来控制采样点分布的权重函数如下:

1) 基于表面点径向距离的权值公式, 写为:

$$w = \frac{S}{N\pi r_i^2} \quad (10)$$

式中: S 为颗粒的表面积; N 为沃罗诺伊种子的数量; r_i 为颗粒表面点在对应的沃罗诺伊种子的径向距离。

2) 基于表面点曲率的权值公式, 写为:

$$w = \frac{4(E_{c_i} - \mu)}{N \cdot 3\sigma} \alpha \quad (11)$$

其中, N 为沃罗诺伊种子的数量, α 为无量纲的参数 (本文 $\alpha = 1$)。 i 为下标索引, $c_i, \mu, \sigma, E_{c_i}$ 表示与表面曲率相关的统计分布参数, 由下列公式得到:

$$c_i = \max \{ |c_{i1}|, |c_{i2}| \} \quad (12)$$

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln\left(\frac{1}{c_i}\right), \sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left(\ln\left(\frac{1}{c_i}\right) - \mu\right)^2}{n-1}} \quad (13)$$

$$E_{c_i} = \ln\left(\frac{1}{c_i}\right) \quad (14)$$

其中, c_i 表示三角形网格中某点主曲率绝对值的最大值。曲率的具体计算方法: 1) 在离散表面的基础上, 计算与待求曲率点相连的所有面的法线, 然后计算基于角度加权的面法线平均值, 作为待求曲率点的法线; 2) 旋转数据, 使待求曲率点的法线变为 $(-1, 0, 0)$, 方便后续计算; 3) 基于待求曲率点及其相邻节点, 采用二次曲面函数 $f(x, y) = ax^2 + by^2 + cxy + dx + ey + f$ 进行局部最小二乘拟合, 得到拟合的二次曲面; 4) 基于拟合的二次曲面, 利用 hessian 矩阵 (二阶) 的特征向量和特征值来计算主曲率、均值和高斯曲率^[20]。虽然采用曲面拟合的方法计算曲率可能导致结果失真。但随着计算机断层扫描等技术的发展, 通常我们扫描得到的点云信息已经非常大且细节足够丰富, 可以很大程度降低曲面拟合的误差。

当权重为常系数时, 加权球面质心沃罗诺伊退化成普通球面质心沃罗诺伊, 其在参数空间的采样结果接近于经典的斐波那契法, 但其仍具有

能获得任意数量的表面点的优点。

2 算例与讨论

2.1 基于距离加权的颗粒表面离散与重建

为了获取真实颗粒的表面，通过高精度的 CT 扫描获得颗粒真实形态的原始数据。CT 扫描得到的数据，不仅描述了颗粒表面的形态，还包含了颗粒的内部情况，因此针对 CT 数据还需要数字

图像处理的办法来提取颗粒的表面点云，进而用网格生成算法（如 marching cube）建立表面三角形网格，如图 6（a）和图 6（e）。因为 CT 扫描面的精度在微米级，其表面点数量多，密度大，对颗粒表面形态细节的留真度高。在后文中，由 CT 数据得到的表面网格被称作为颗粒的原始表面。

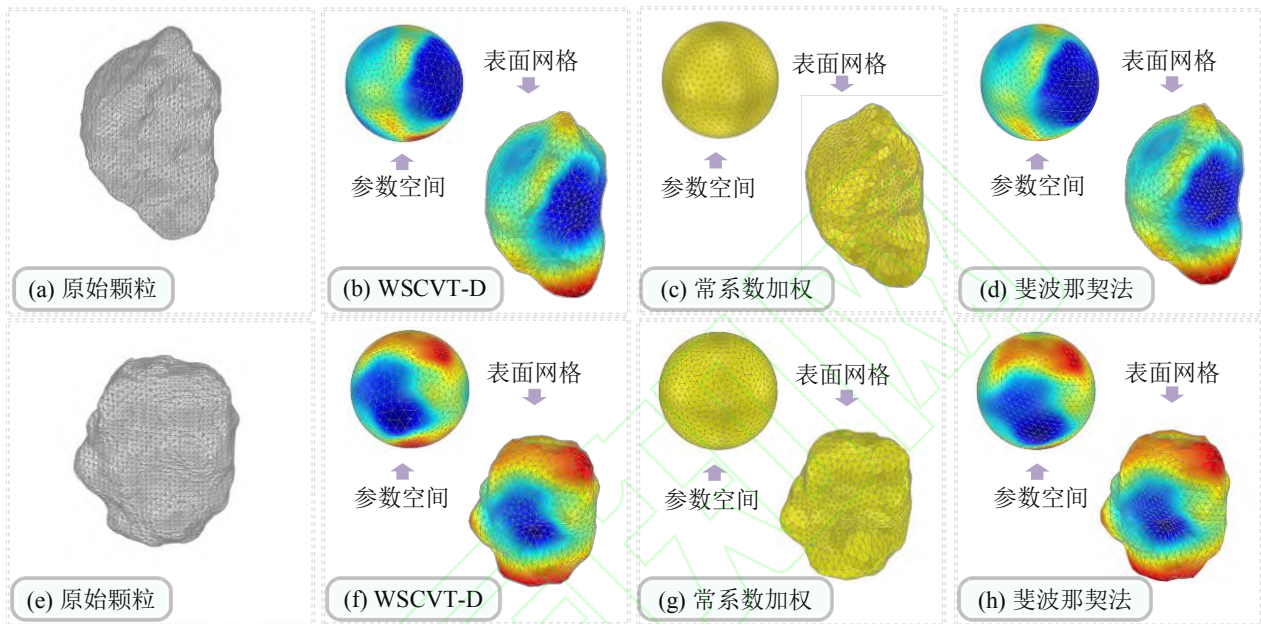


图 6 不同采样方法下的颗粒表面重构对比图（其中颗粒的颜色表示径向距离）

Fig.6 Comparison of the reconstructed particle surfaces based on different sampling schemes

图 6 显示了基于距离加权球面沃罗诺伊（简称 WSCVT-D）重构的颗粒表面的两个例子，其中常系数加权法指加权球面质心沃罗诺伊中权值系数为常数。原始颗粒（a）包含 7228 个网格节点，重构为 1000 个网格节点；原始颗粒（e）包含 5658 个网格节点，重构为 1000 个网格节点。通过观察，常系数加权法和斐波那契法得到的参数空间，其表面点均匀的分布在单位球体的球面上，但在映射到颗粒表面时，其三角形网格在径向距离较大的区域处会被拉伸，网格变的稀疏；径向距离较小的区域，会被收缩，网格变的密集。图 6（b）和图 6（f）是用颗粒表面点的径向距离进行加权的重构结果。在基于 WSCVT-D 的参数采样中，径向距离较大的单元（即红色单元）的沃罗诺伊种子用相对较小的权重表示，网格尺寸小且相对密集；而径向距离较小的单元（即蓝色单元）的种子用较大的权重表示，网格尺寸较大且相对稀疏。径向距离越大的区域，采样点越多，反之则采样

点越少，按径向距离缩放（拉伸）后，颗粒表面上的点样本分布更均匀。从图 6 颗粒表面重构的可视化可以直观地看到，基于 WSCVT-D 的颗粒表面重构可以缓解斐波那契采样方案的因为径向距离映射而产生的网格畸变的问题。

为了定量比较不同重构方法的网格质量，特别提取并计算了三角形单元边长及单元纵横比。其中单元纵横比（ R_l ）的定义为三角形单元最长边（ l_{max} ）和最短边（ l_{min} ）的比值： $R_l = l_{max} / l_{min}$ ，比值越小越接近等边三角形。为了对比颗粒表面重构前后三角形单元边长分布的变化，重构后的颗粒表面仍保持和如图 6（a）所示原始颗粒相同的网格节点数，即 7228 个网格节点。结果如图 7 所示，基于 WSCVT-D 的表面重构的颗粒相比于原始颗粒，构成其表面的三角形网格其单元边长分布和三角形单元的纵横比分布，更加均匀。在相同的节点数下，等效半径为 1.0432 cm 的颗粒，经过 WSCVT-D 重构的颗粒，其边长均值在 0.0300

cm, 方差 0.0092, 而原始颗粒的三角单元边长均值 0.0331 cm, 方差 0.0117。在相同的节点数下, 经过 WSCVT-D 重构的颗粒, 其纵横比均值在 1.8748, 方差 0.5397, 而原始颗粒的三角单元纵

横比均值 17.0060, 方差 3.9992。从对比结果看, 经过 WSCVT-D 重采样颗粒表面的点, 构成其表面的三角形单元, 通过球谐拟合按距离映射缩放后, 可以保持着均匀分布。

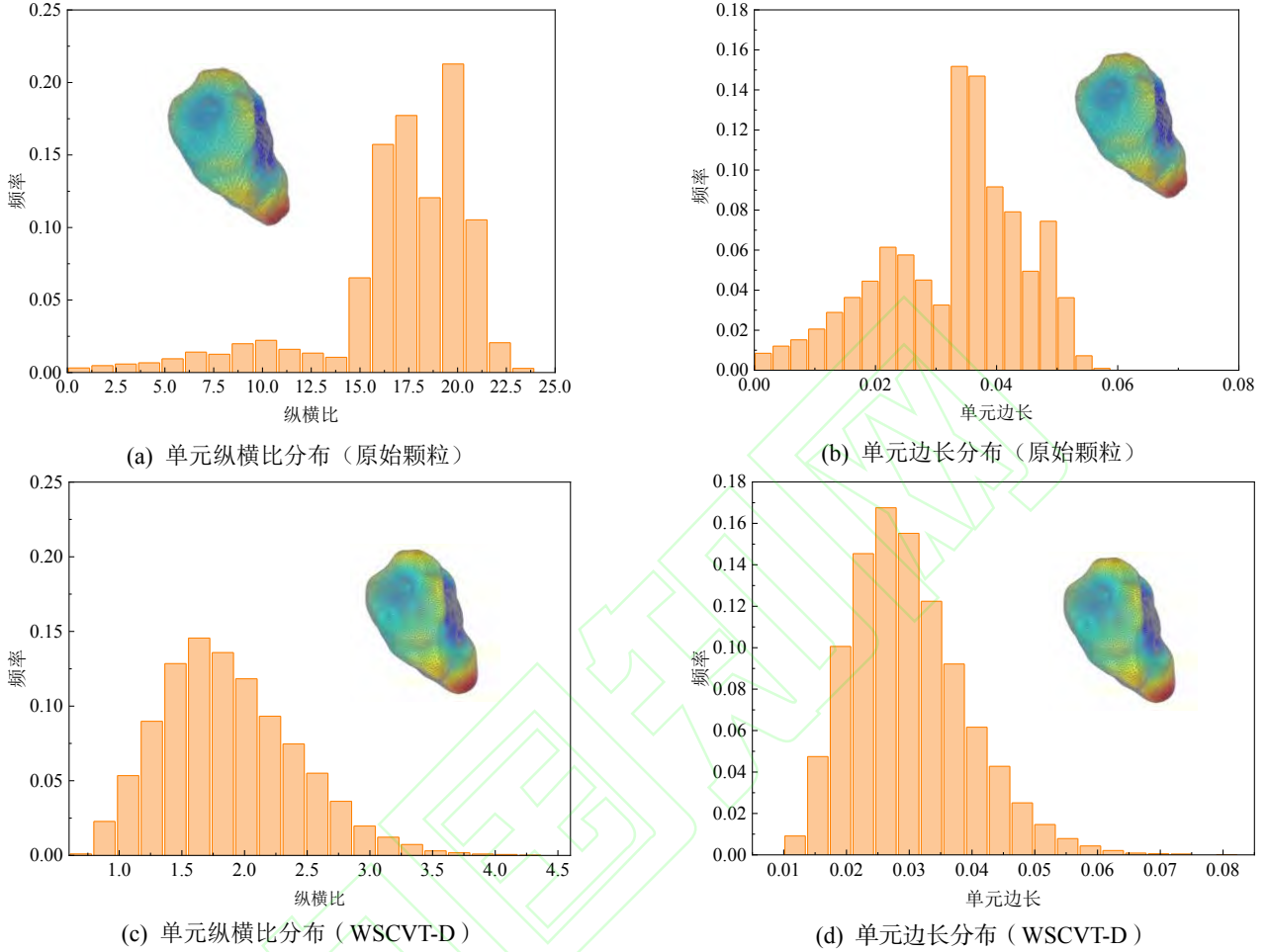


图 7 三角形几何参数对比

Fig.7 Comparison of the triangle geometric features of the reconstructed surface meshes

在对颗粒表面重构时, 不仅对于网格质量有要求, 还需要尽可能地保持它的形状特征, 如体积、表面积、长细比、球度、粗糙度等。

$$A_r = \frac{l_c}{l_a} \quad (15)$$

$$S_p = \frac{\sqrt[3]{36\pi V^2}}{A} \quad (16)$$

式中, A_r 、 S_p 分别表示长细比、球度; l_a 、 l_c 分别为颗粒的长短轴; V 、 A 分别表示颗粒的体积和面积; 粗糙度的定量描述常见的有表面高度的均方根 S_q , 粗糙表面的峰度 S_{ku} , 粗糙表面高度的算术平均 S_a , 粗糙表面高度的均方根梯度 S_{dq} 等^[21-22], 本文只选取 S_{dq} 作为粗糙度的定量指标。

长细比、球度、粗糙度的计算公式如下所示:

$$S_{dq} = \sqrt{\frac{1}{A} \iint_A \left[\left(\frac{\partial r(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial r(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right)^2 \right] d\theta d\varphi} \quad (17)$$

为探究基于 WSCVT-D 颗粒表面重构对颗粒形状参数的影响, 选择体积、表面积、长细比和球度四个三维的形状参数来量化颗粒的三维形状。

如图 8 所示, 相比于以 CT 扫描得到的颗粒形状参数, 在节点数分别为 100、500、1000、2000 时, WSCVT-D 的体积误差分别为 6.59%、1.35%、0.66%、0.34%, 表面积误差分别为 7.89%、3.19%、2.31%、1.81%, 长细比误差分别为 3.48%、0.88%、0.55%、0.71%; 球度的误差分别为 3.74%、2.36%、1.91%、1.67%; 其中, 球度 (Sphericity) 是对颗

粒平均棱角性的定量表述，它是由体积和面积计算得来。因此，基于 WSCVT-D 的采样方法在重构表面的时候，在节点数大于 500 时，其体积、表面积、长细比和球度的误差可以控制在一个非

常小的范围。而且，WSCVT-D 方法普遍优于斐波那契法，而常系数加权球面沃罗诺伊法跟斐波那契法具有相似的性能。

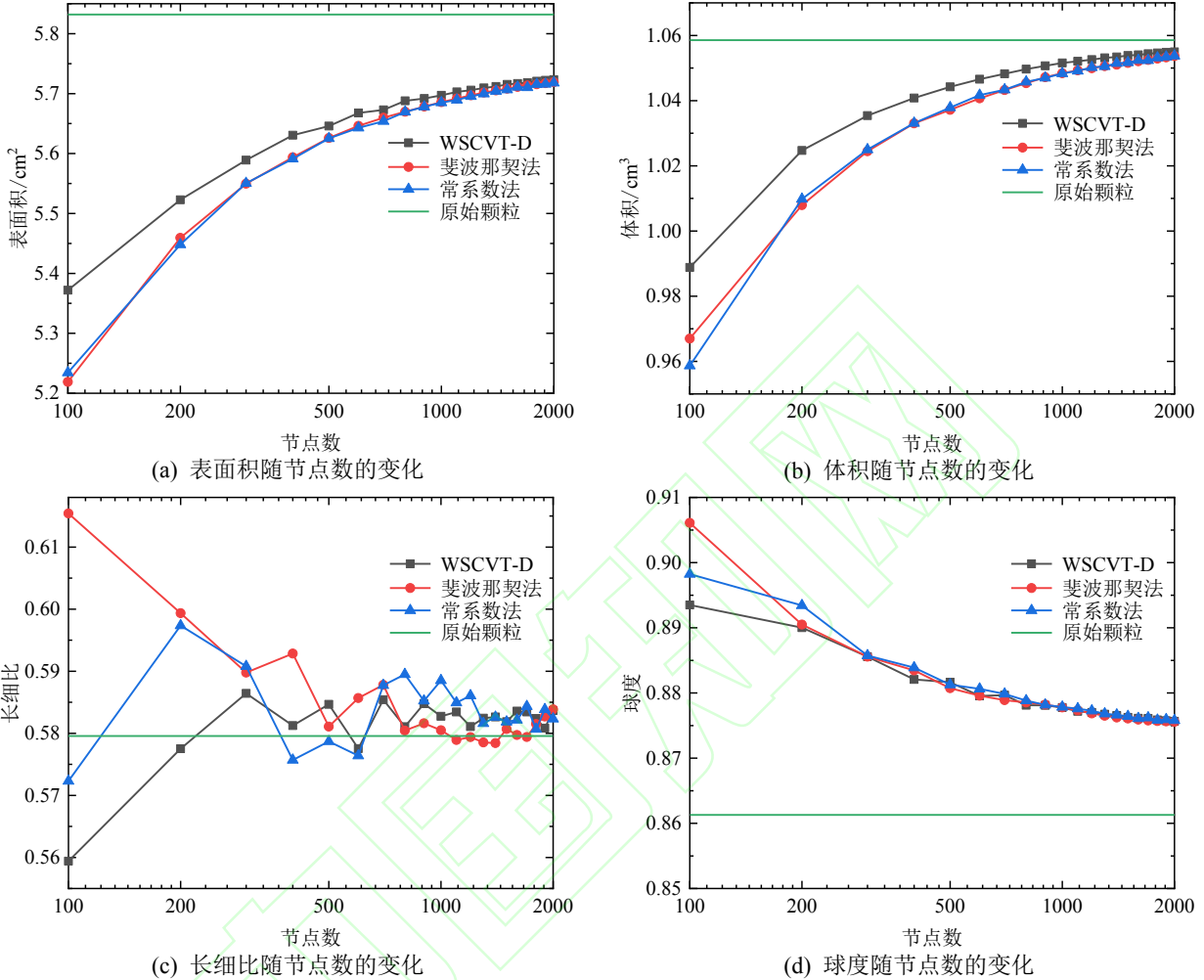


图 8 重构颗粒的形状参数

Fig.8 Shape descriptors of the reconstructed particle

2.2 基于曲率加权的颗粒表面离散与重建

应用基于表面点曲率的权值公式(见式(11))来控制网格的生成，曲率越大的区域，权值越大，分配的采样点越多，三角形网格越多。相反的，曲率越小的区域(即越平坦)，分配的采样点越少，网格数量越少。这样可以有效地保证在相同节点数下，基于 WSCVT-C 重构的颗粒表面在曲率大的区域有更多的网格，使得在投影缩放(拉伸)时不会因为距离的问题而损失更多的细节。图 9 列出了四个颗粒的不同网格重构方式的结果，包

括基于 WSCVT-C 和斐波那契法重构表面，重构后的表面节点数为 1000。WSCVT-C 方法重构的颗粒表面，在曲率较大(如边界、尖角)区域会有优先分配更多的网格(蓝色、红色单元)，而在曲率较小(或平坦)区域，则分配更少的网格。而斐波那契法重构的颗粒表面，其表面网格的分布，只受节点数的控制，虽能均匀的分布在参数空间，但是在映射到颗粒表面时，受径向距离的影响，在曲率大的区域可能保留网格较少，曲率小的区域聚集较多网格。

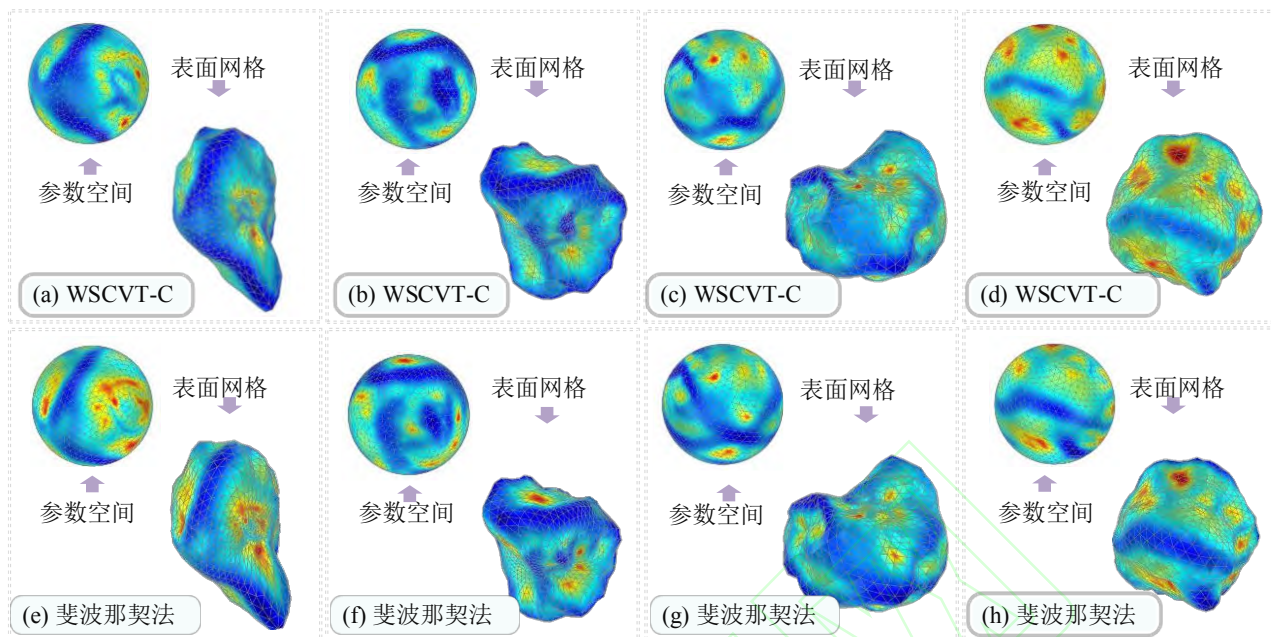
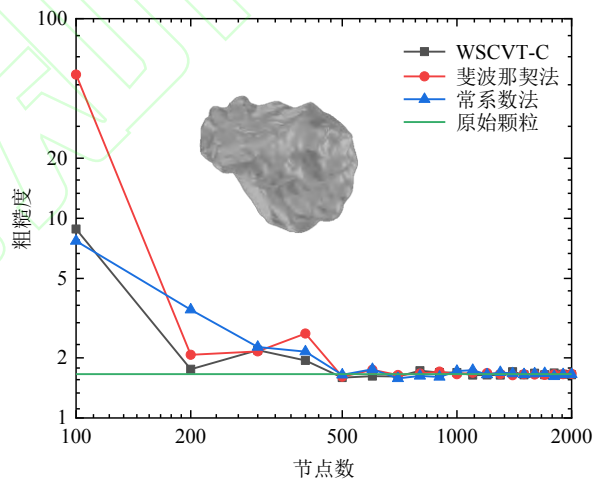


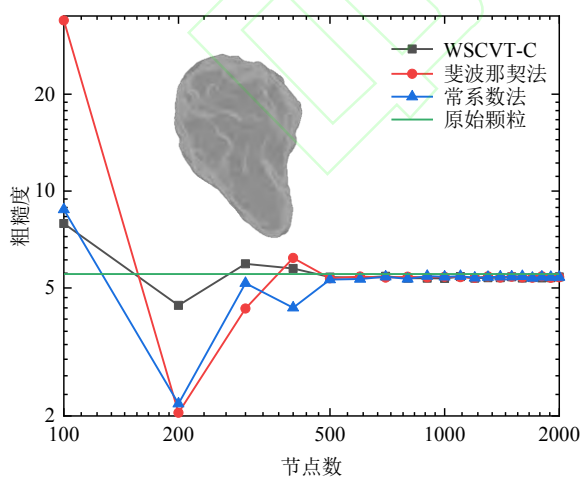
图 9 基于 WSCVT-C 重构的颗粒表面

Fig.9 Particle surface reconstruction based on WSCVT-C

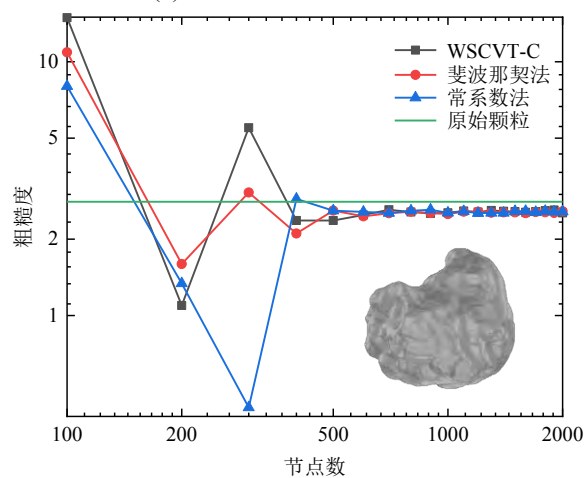
在不同的形态表征参数中，粗糙度（Roughness）是表征颗粒表面粗糙程度的度量。以图 9 所示颗粒为例，分析其粗糙度随表面节点数的变化情况，粗糙度结果如图 10 所示。从计算结果可知，在节点数大于 500 时重构后颗粒表面的粗糙度与原始表面误差可以忽略不计；在节点数小于 500 时，相同节点数下基于 WSCVT-C 的重构的表面相比于常系数和斐波那契法误差更小。



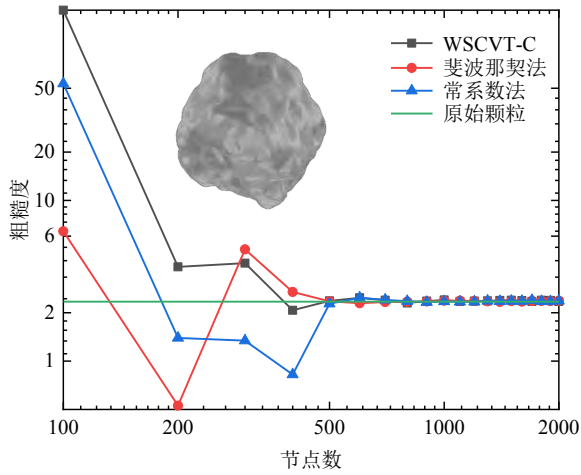
(b) 粗糙度随节点数的变化



(a) 粗糙度随节点数的变化



(c) 粗糙度随节点数的变化



(d) 粗糙度随节点数的变化
图 10 重构颗粒的粗糙度

Fig. 10 Roughness of the reconstructed particle

2.3 离散元数值模拟应用

由 CT 数据重构得到的颗粒表面网格，其表面节点数受其扫描精度的影响，扫描精度越高，节点数越高，三角形单元数量也就越多。而节点数量直接影响着后续的 DEM 模拟的计算成本。但是扫描精度低，虽然会减少其节点数，相应的也会造成颗粒形状细节的丢失，使得重构后的颗粒与真实颗粒相差甚远，对离散元模拟的结果的可靠性有较大的影响。本文提出的算法可以将高精度扫描得到的颗粒表面，在权值函数控制下，合理的简化网格密集、节点数量巨大的颗粒表面。下面将基于开源离散元软件 NetDEM (https://apaam.github.io/netdem_docs/) 对重构后的颗粒做离散元分析。

以图 6 (a) 所示的颗粒，做自然堆积的离散元模拟。分别以原始颗粒 (7228 个节点) 和基于 WSCVT-D 重构的颗粒 (颗粒等效粒径为 0.1 m)，其中重构的颗粒分为 100 个节点和 1000 个节点两种，一共进行三组离散元模拟。模拟采用球谐颗粒模型，采用基于有向距离场 (SDF) 的统一接触算法做接触判断与接触几何特征的计算^[23]。在有向距离场下粒子内部的符号距离为正，粒子外的符号距离为负，SDF 的零等值面表示粒子表面。基于 node-to-surface 接触算法中两个颗粒的接触计算，需要将其中一个颗粒的表面进行离散，进而求解接触。因此，在 SDF 方法下通过检查表面节点的距离符号，可以很容易地实现两个粒子之间的接触状态和重叠的判断。而接触模型采用了 Feng 的基于能量的接触模型 (*energy-conserving linear normal contact model*) 是一种适用于任意不规则形状粒子的，基于距离势能量守恒的接触理论。

在模拟中，每组释放的颗粒由同一种的颗粒组成，以 5×5 阵列每隔 0.1 s 瞬间产生，以速度 2.0 m/min 的向下初速度并在重力下落向一个正方形的容器。接触模型采用线弹性模型，其中的法向刚度 $k_n = 2 \times 10^6$ N/m，切向刚度 $k_t = 1 \times 10^6$ N/m，摩擦系数 $\mu = 0.5$ ，数值阻尼 $\beta = 0.7$ ；时间步长计算为 0.0001 s，执行 40000 步，总物理时间为 4.0 s，每组总颗粒数为 500，模拟结果见图 11 所示。

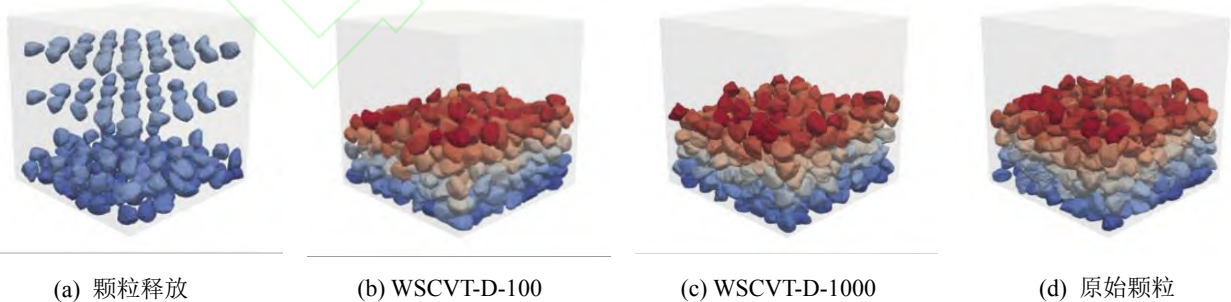


图 11 颗粒材料自然堆积的离散元模拟

Fig. 11 Discrete element simulation of random packing of granular material

如图 11 (a) 所示，由于颗粒是以阵列的形式产生的，三组模拟在颗粒产生阶段完全相同，并且设置同样的物理参数和接触模型，使得两种模拟具有相同的条件。最终自由沉降的结果可以从

图 11 直观的观察，基于 WSCVT-D 表面重构后的颗粒，其离散元模拟结果与原始颗粒并无明显差别。在模拟过程中颗粒系统的平动动能、转动动能、总动能的演化见图 12。如图 12 所示，每

隔 0.1 s 都会有新的颗粒产生, 每次注入都会导致总能量的增加; 注入完成后, 由于摩擦力和阻力的耗散效应, 平动动能和转动动能都开始下降, 最终完全耗散。能量曲线的稳定收敛也表明了所使用简化网格的颗粒的稳定性。图 12 中三种动能的演化曲线清楚地显示了在不同网格简化水平下的两种模拟之间的一致性。图 12 (c) 中的简化后的最终总能量与原始颗粒存在较小的差异。值得

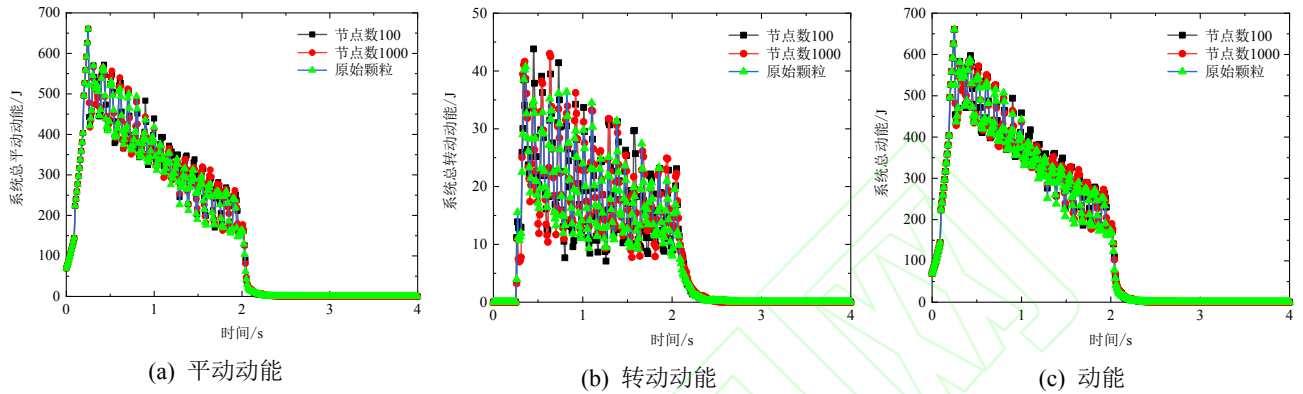


图 12 原始颗粒与 WSCVT-D 重构颗粒的模拟堆积过程中的能量演化

Fig.12 Evolution of energies of the particles during random packing process for original particles and WSCVT-D reconstructed particle

针对不同颗粒适用不同的加权方法, 例如对于类球体颗粒, 适用基于径向距离加权的方法。对于表面棱角多, 曲率变化丰富的颗粒, 则基于曲率加权比较适用。因此针对颗粒类型的不同或者应用场景的不同, 后续的离散元模拟需要提供何种类型的颗粒模板, 根据需求可以选择不同的加权方法, 以提供性能优良的颗粒模板。例如在有限元-离散元耦合计算(FDEM)中针对如土石混合体的数值模拟^[24], 用以生成块体单元, 网格分布良好的块体单元可以大提高有限元计算的收敛性、精度或效率。前人的研究也已经验证了块体颗粒的边角对力学性能的影响比相对平坦的区域更大。因此本文提出的基于表面点曲率加权方法可以实现角区使用精细网格而在平面区使用稀疏网格, 更好的平衡计算效率和精度。

如图 13 所示, 关于生成块体颗粒的抛石防波堤数值模拟, 采用 WSCVT-C 加权方法。摩擦系数为 0.65, 颗粒等效直径 0.18 m, 生成 10000 个块体颗粒, 其中的法向刚度 $k_n = 1 \times 10^5 \text{ N/m}^{1/2}$, 切向刚度 $k_t = 1 \times 10^4 \text{ N/m}$, 执行 120000 步, 总物理时间为 12.0 s, 其他参数均与自然堆积模拟一致。特别的, 关于计算使用的 CPU 处理器为 intel

注意的是原始颗粒表面有 7228 个节点, 总计算时间约为 3.5 h; WSCVT-D 重构后 100 个节点的颗粒, 总计算时间仅为 77.0 s; 1000 个节点的计算时间为 1033.9 s。可见 WSCVT-D 方法重构后的颗粒, 表面网格的简化大大均减少了离散元模拟的时间成本, 提高了计算效率, 保证了最终模拟结果的准确性。

10908XE (24.75M 高速缓存, 3.00 GHz) 18 核 36 线程。

WSCVT-C 重构后 500 个节点的颗粒, 总计算时间仅为 18.9 h, 其中关于接触部分的计算占到总计算时间的 99.7%; 1000 个节点的计算时间为 37.8 h, 其中关于接触部分 (包括接触的检测、接触力的计算等) 的计算占到总计算时间的 99.8%。由此可知, 当颗粒数量较多时, 节点数增加一倍, 计算时间也增加一倍, 接触部分的计算是制约计算效率的主要原因。

通过上述离散元模拟的分析可知, 在大型的工程应用和数值计算中, 颗粒的数量更多, 颗粒形态更复杂, 计算成本和难度较大, 如在流固耦合计算(CFDEM)中 (工程应用如抛石防波堤), CFD 流体相的求解一般采用传统计算流体力学方法, 相对成熟, 并不是制约该类方法的难点。DEM 颗粒相的求解, 虽然在算法上较为简单, 但巨大的颗粒数目导致计算量巨大, 往往限制了该类方法的应用。因此大型工程如边坡或者隧道工程, 做离散元数值模拟时需要较多的颗粒参与计算, 而如果使用这种不规则颗粒模板时, 颗粒数量越多、颗粒表面节点越多, 计算时间就越长, 计算成本就越大; 基于 WSCVT-D (C) 的方法可以根

据实际情况,尽可能的减少网格(节点)数量,减少计算成本同时又能保证结果准确性。

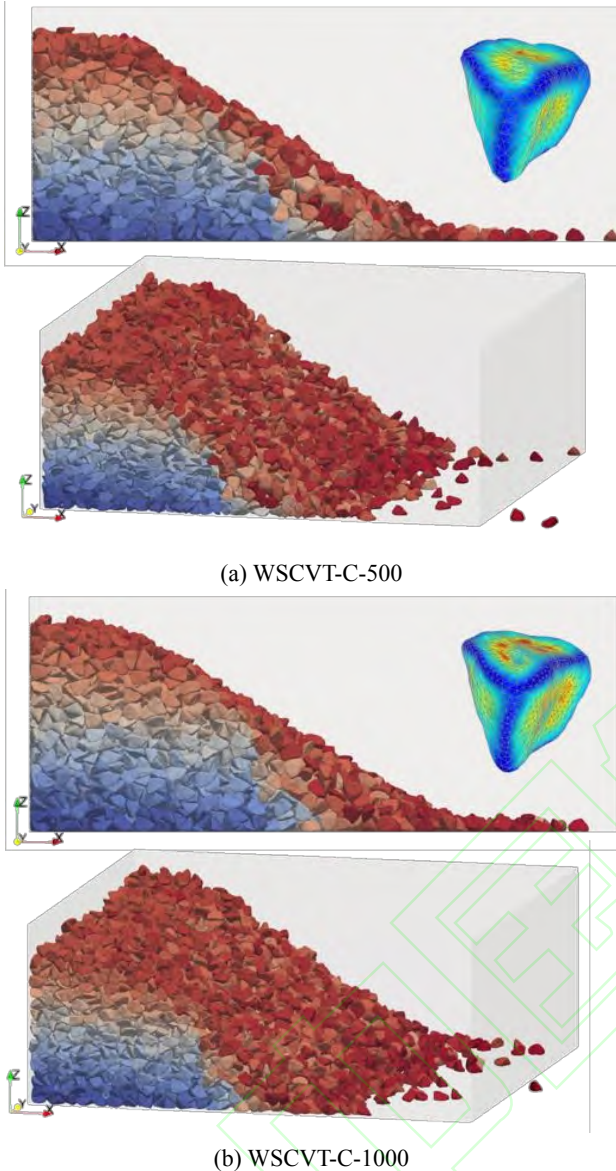


图 13 抛石防波堤离散元模型

Fig.13 Discrete element model of ripple breakwater

3 结论

本文提出了一种基于球面沃罗诺伊和球谐函数的表面离散与重构方法,并给出了基于径向距离和基于曲率的两种权重函数。针对 CT 扫描获取的岩土颗粒初始表面网格进行了算例分析,并与斐波那契法作对比,分析了重建后颗粒的表面网格几何特征、颗粒形态特征以及离散与模拟结果随表面节点数的变化情况,主要结论如下:

(1) WSCVT-D 方法可以避免现有斐波那契法等参数空间映射到颗粒表面空间时发生的网

格畸变问题。与斐波那契法相比,其重构的颗粒的表面网格三角形单元的边长分布与纵横比相较于原始颗粒方差更小,边长尺寸和纵横比分布较为集中且更均匀;在相同网格节点数的情况下,WSCVT-D 方法重构颗粒的形状表征参数(面积、体积、长细比、球度)可以较快地收敛于 CT 数据得到的原始颗粒的形状表征参数。

(2) 基于 WSCVT-C 方法重构后的颗粒,实现了以曲率加权的自适应网格划分,能在划分网格时根据曲率的大小,在曲率大的区域布置更多的采样点,以提高采样后颗粒表面细节的保真度。以球度和圆度表征颗粒表面的粗糙程度,与斐波那契法相比,基于 WSCVT-C 方法可以较快地收敛于 CT 数据得到的原始颗粒的形状表征参数。

(3) 重构颗粒的自然堆积离散元模拟结果表明:基于 WSCVT-D 法重构的 100 节点和 1000 节点颗粒,总计算时间分别仅为原始颗粒(7228 个节点)的 0.61%和 8.21%;有效地降低了离散元模拟的计算复杂性。在颗粒的数量、释放方式、接触模型和时间步长及总物理时间都相同的情况下,简化后的颗粒与原始颗粒,自然堆积模拟的结果,并未观察到显著差异,能量曲线也能稳定收敛。

(4) 重构颗粒的抛石防波堤离散元模型的生成结果表明:基于 WSCVT-C 法重构的 500 节点和 1000 节点颗粒,在颗粒数量为 10000 时,接触部分的计算时间占整个模拟时间的百分比高达百分之九十以上;在大型工程中合理的简化颗粒模型对控制计算成本是有着重要意义。

参考文献:

- [1] Garboczi E J, Bullard J W. 3D analytical mathematical models of random star-shape particles via a combination of X-ray computed microtomography and spherical harmonic analysis[J]. *Advanced Powder Technol*, 2017, 28(2): 325-339.
- [2] Zhou B, Wang J F, Zhao B D. Micromorphology characterization and reconstruction of sand particles using micro X-ray tomography and spherical harmonics[J]. *Engineering Geology*, 2015, 184(14): 126-137.
- [3] 蒋明镜. 现代土力学研究的新视野——宏微观土力学[J]. *岩土工程学报*, 2019, 41(2): 195-254.
Jiang Mingjing. New paradigm for modern soil mechanics: Geomechanics from micro to macro[J].

- Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2019, 41(2): 195-254. (in Chinese)
- [4] 蒋明镜, 王富周, 朱合华. 单粒组密砂剪切带的直剪试验离散元数值分析[J]. 岩土力学, 2010, 31(1): 253-257+298.
Jiang Mingjing, Wang Fuzhou, Zhu Hehua. Shear band formation in ideal dense sand in direct shear test by discrete element analysis[J]. Rock and Soil Mechanics, 2010, 31(1): 253-257+298. (in Chinese)
- [5] 杨贞军, 黄宇劫, 尧锋, 刘国华. 基于粘结单元的三维随机细观混凝土离散断裂模拟[J]. 工程力学, 2020, 37(8): 158-166.
Yang Zhenjun, Huang Yujie, Yao Feng, Liu Guohua. Three-dimensional meso-scale cohesive fracture modeling of concrete using a Python script in ABAQUS[J]. Engineering Mechanics, 2020, 37(8): 158-166.
- [6] 石崇, 沈俊良. 岩土颗粒三维形状表征参数对比分析[J]. 沈阳工业大学学报, 2017, 39(4): 469-474.
Shi Chong, Shen Junliang. Comparative analysis for 3D shape characterization parameters of rock and soil particles[J]. Journal of Shenyang University of Technology, 2017, 39(4): 469-474. (in Chinese)
- [7] 程壮, 王剑锋. 用于颗粒土微观力学行为试验的微型三轴试验仪[J]. 岩土力学, 2018, 39(3): 1123-1129.
Cheng Zhuang, Wang Jianfeng. A mini-triaxial apparatus for testing of micro-scale mechanical behavior of granular soils[J]. Rock and Soil Mechanics, 2018, 39(3): 1123-1129. (in Chinese)
- [8] Khoei A R, Biabanaki SOR, Vafa A R, Yadegaran I, Keshavarz S. A new computational algorithm for contact friction modeling of large plastic deformation in powder compaction processes[J]. International Journal of Solids and Structures, 2009, 46(2): 287-310.
- [9] Garboczi E J, Bullard J W. Contact function, uniform-thickness shell volume, and convexity measure for 3D star-shaped random particles[J]. Powder Technology, 2013, 237: 191-201.
- [10] Zhu Z G, Chen H S, Xu W X, Liu L. Parking simulation of three-dimensional multi-sized star-shaped particles[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2014, 22(3): 035008.
- [11] 王永亮, 王建辉, 张磊. 含多裂纹损伤圆弧曲梁自由振动扰动的有限元网格自适应分析[J]. 工程力学, 2021, 38(10): 24-33.
Wang Yongliang, Wang Jianhui, Zhang Lei. Adaptive mesh refinement analysis of finite element method for free vibration disturbance of circularly curved beams with multiple cracks[J]. Engineering Mechanics, 2021, 38(10): 24-33.
- [12] 徐磊, 崔姗姗, 姜磊, 任青文. 基于双重网格的混凝土自适应宏观细观协同有限元分析方法[J]. 工程力学, 2022, 39(4): 197-208.
Xu Lei, Cui Shanshan, Jiang Lei, Ren Qingwen. Adaptive macro-mesoscopic-scale concurrent finite element analysis approach of concrete using dual mesh[J]. Engineering Mechanics, 2022, 39(4): 197-208.
- [13] 梅中义, 范玉青, 胡世光. NURBS曲面的有限元网格三角剖分[J]. 计算机辅助设计与图形学学报, 1997(4): 2-7.
Mei Zhongyi, Fan Yuqing, Hu Shiguang. Finite element mesh generation of NURBS surface[J]. Journal of Computer-Aided Design & Computer Graphics, 1997, 9(4): 289-294. (in Chinese)
- [14] Ryppl D, Krysl P. Triangulation of 3D surfaces[J]. Engineering with Computers, 1997, 13(2): 87-98.
- [15] Feng Y T. An effective energy-conserving contact modelling strategy for spherical harmonic particles represented by surface triangular meshes with automatic simplification[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2021, 379: 113750.
- [16] Brechbuhler C, Gerig G, Kubler O. Parametrization of closed surfaces for 3D shape description[J]. Computer Vision and Image Understanding, 1995, 61(2): 154-170.
- [17] Su D, Yan W M. Prediction of 3D size and shape descriptors of irregular granular particles from projected 2D images[J]. Acta Geotechnica, 2020, 15(6): 1533-1555.
- [18] Preparata F P, Shamos M I. Computational geometry: An introduction[M]. New York: Springer-Verlag, 1985: 226-329.
- [19] Davis N, Raina G, Jagannathan K. Grids Versus Graphs: Partitioning Space for Improved Taxi Demand-Supply Forecasts[J]. Ieee Transactions on Intelligent Transportation Systems, 2021, 22(10): 6526-6535.
- [20] Zhou B, Wang J F, Wang H. A novel particle tracking method for granular sands based on spherical harmonic rotational invariants[J]. Géotechnique, 2018, 68(12): 1-23.
- [21] Angelidakis V, Nadimi S, Utili S. SHape Analyser for particle engineering (SHAPE): seamless characterisation and simplification of particle morphology from imaging data[J]. Computer Physics Communications, 2021, 265: 107983.
- [22] 付茹, 胡新丽, 周博, 汪华斌, 王剑峰. 砂土颗粒三维形态的定量表征方法[J]. 岩土力学, 2018, 39(2):

483-490.

Fu Ru, Hu Xinli, Zhou Bo, Wang Huabin, Wang Jianfeng. A quantitative characterization method of 3D morphology of sand particles[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2018, 39(2): 483-490. (in Chinese)

- [23] Lai Z S, Zhao S W, Zhao J D, Huang L C. Signed distance field theory for unified DEM modeling of granular media with arbitrary particle shapes[J]. *Computational Mechanics*, 2022.

- [24] Zhai L H, Zhang H, Pan D B, Zhu Y, Zhu J, Zhang Y, Chen C. Optimisation of hydraulic fracturing parameters based on cohesive zone method in oil shale reservoir with random distribution of weak planes[J]. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2020, 75: 103130.

