



SFERINIŲ HARMONINIŲ FUNKCIJŲ TAIKYMAS KUBO FORMOS DALELEI APRAŠYTI

Urtė RADVILAITĖ

*Vilniaus Gedimino technikos universitetas
El. paštas urte.radvilaite@vgtu.lt*

Santrauka. Šiame straipsnyje aptariami įvairūs diskrečiųjų elementų metodo modeliai, taikomi dalelių formoms modeliuoti. Dažniausiai taikomas kelių sferų modelis, bet yra pristatyti ir daugiasienis modelis bei mišrus sferos daugiasienis modelis. Nors aptariami metodai neblogai apksimuoja dalelių formą, atsiranda sunkumų skaičiuojant dalelių kontaktą. Todėl reikalingas universalus metodas, leidžiantis gauti analitinę dalelės formos išraišką. Būtent tokiam tikslui naudojamos sferinės harmoninės funkcijos. Straipsnyje pristatomas sferinių funkcijų modelis bei pateikiami eksperimento rezultatai kubo formos dalelei aprašyti.

Reikšminiai žodžiai: diskrečiųjų elementų metodas, kubo formos dalelė, sferinės harmoninės funkcijos.

Įvadas

Diskrečiųjų elementų metodas (DEM), kurį pristatė Cundall ir Strack, tapo vyraujančiu skaičiuojamuoju įrankiu tiriant biriųjų medžiagų elgseną. Taikant DEM tiesiogiai tiriama formos įtaka nagrinėjant atskirų dalelių sąveiką (Cundall, Strack 1979).

Kadangi apskaičiuoti kontaktą tarp dviejų bet kurios formos dalelių gana sudėtinga, skaičiuojant DEM, dažniausiai dalelės forma aproksimuojama sferine dalele. Sferinei dalelei yra aiškiai apibrėžtos ir Herco kontakto formulės sferos ir sferos bei sferos ir kontakto atvejais, kurios plačiai taikomos modeliuojant kietas biriąsias medžiagas. Deja, tikrovėje dauguma dalelių yra nesferinės bei netaisyklingos geometrijos. Dėl šios priežasties yra daugybė įvairių metodų, taikomų tokioms dalelėms aproksimuoti.

Ansktesni tyrinėjimai, apimantys DEM conceptualius klausimus ir įvairius skaičiuojamuosius aspektus, susijusius su įvairiomis galimomis dalelių formomis, yra aprašyti kitų autorių apžvalgose (Džiugys, Peters 2001; Latham, Munjiza 2004; Cleary 2008; Wachs *et al.* 2012). Egistuojantys DEM dalelių formos modeliai gali būti klasifikuojami pagal deskriptorius, apimančius formos iškilumą ir sudėtingumą; globalios formos apibūdinimą lyginant su sfera pagal sferiškumą, kraštinių santykį ar stačiakampiškumą; viršūnių aštrumą ar dalelės paviršiaus lygumą ar šiurkštumą.

Išgaubtoms daugiasienėms formoms modeliuoti Cundall pasiūlytas ir Chen patobulintas metodas plačiai taikomas skaičiuojant DEM (Cundall 1988; Chen *et al.* 2010).

Daugiasienių formų privalumas tas, kad jomis galima modeliuoti daugybę sudėtingų formų dalelių. Tačiau esančios aštrios viršūnės komplikuoja kontakto skaičiavimus.

Nesferinėms dalelėms modeliuoti dažniausiai taikomas kelių sferų modelis, kuris dalelės formą aprašo iš dalies sutampančiomis sferomis. Höhner pateikia daugiasienio ir kelių sferų modelių, kurie abu sistemiškai konverguoja į apgaubiančią sferą, palyginimą (Höhner *et al.* 2011, 2012).

Neseniai buvo sukurtas mišrus sferos ir daugiasienio modelis siekiant pagreitinti kontakto tarp daugiasienių dalelių skaičiavimą. Šis modelis dalelės formą laiko daugiasiene, tačiau kampai ir viršūnės yra suapvalinami (Pournin, Liebling 2005).

Nors siūloma daugybė įvairių modelių, kurie tinka realioms nesferinėms dalelėms aproksimuoti skaičiuojant DEM, vis dar trūksta universalaus modelio, kuris leistų gauti analitinę dalelės išraišką. Tai ne tik leistų lengviau kontroliuoti gaunamą paklaidą, bet ir turėtų palengvinti kontakto skaičiavimus. Šiuo metu nemažo susidomėjimo sulaukė pusiau analitiniai metodai, iš kurių vienas yra modeliavimas sferinėmis funkcijomis.

Sferinės harmoninės funkcijos yra plačiai taikomas ir gerai suprantamas įrankis taikomojoje matematikoje. Jos pasitelkiamos modeliuojant orą bei klimatą, aprašant gravitacinius, topografinius ir magnetinius duomenis geofizikoje, taip pat skaitiškai sprendžiant lygtis dalinėmis išvestinėmis (Rokhlin, Tygert 2006). Sferinės funkcijos

taikomos tokiuose uždaviniuose kaip elektromagnetizmas, gravitacija, mechanika ar hidrodinamika (Morris *et al.* 2005). Neblogi sferinių funkcijų taikymo pavyzdžiai apima Mėnulio regolito dalelių (Garboczi 2011) bei smėlio dalelių (Liu *et al.* 2011) modeliavimą.

Šiame darbe nagrinėjama kubo formos dalelė. Kubo forma yra būdingas briaunotos daugiakampės dalelės, turinčios aštrias briaunas ir smailias viršunes, pavyzdys. Kubo pranašumas, kad tai ideali dalelės forma su tiksliai žinomais rodikliais, dėl to tokia dalelė ir jo modeliai gali būti vertinami kaip briaunotų dalelių etalonas.

Teorinis sferinių funkcijų modelis

Sferinės harmoninės funkcijos sudaro pilnąją ortonormuotų funkcijų aibę, todėl bet kokia tolydžioji funkcija $F(\theta, \varphi)$, kuri yra apibrėžta sferinėmis koordinatėmis (t. y. $0 \leq \varphi < 2\pi$ apibūdina azimutinį kampą xy plokštumoje, prasidedantį nuo x ašies, ir $0 \leq \theta < \pi$ žymi polinį kampą su z ašimi), gali būti aprašyta sferinėmis harmonikomis. Atliekant skaičiavimus, funkcija skleidžiama baigtinio skaičiaus N sferinių harmonikų suma:

$$F(\theta, \varphi) \cong \sum_{l=0}^N \sum_{m=-l}^l a_l^m Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (1)$$

čia $Y_l^m(\theta, \varphi)$ yra sferinė harmoninė funkcija ir a_l^m yra jos koeficientas (Wang *et al.* 2006).

Sferinės harmoninės funkcijos yra apibrėžiamos taip:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = N_l^{|m|} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (2)$$

čia $N_l^{|m|}$ yra normalizacijos konstanta ir $P_l^{|m|}(\cos \theta)$ yra jungtinis Ležandro daugianaris (Mousa *et al.* 2008).

Kadangi skaičiuojant dažniausiai taikomos tik realių reikšmių funkcijos, todėl patogiau apibrėžti ir realias sferines funkcijas, kurios atrodo taip:

$$y_l^m = \begin{cases} \sqrt{2} \operatorname{Re}(Y_l^m) = \sqrt{2} N_l^m \cos(m\varphi) P_l^m(\cos \theta), & \text{kai } m > 0 \\ Y_l^0 = N_l^0 P_l^0(\cos \theta), & \text{kai } m = 0. \\ \sqrt{2} \operatorname{Im}(Y_l^m) = \sqrt{2} N_l^{|m|} \sin(|m|\varphi) P_l^{|m|}(\cos \theta), & \text{kai } m < 0 \end{cases} \quad (3)$$

Koeficientai randami taikant mažiausiųjų kvadratų metodą:

$$\min_a \left\{ \sum_{i=1}^n (r_i - F_i(a))^2 \right\}, \quad (4)$$

čia $F_i(a) = \sum_{j=1}^k y_{i,j} a_j$, $i = 1 \dots n$ yra sferinių funkcijų skleidinys taške (θ_i, φ_i) , a_j yra nežinomi skleidinio koeficientai, $r_i = r(\theta_i, \varphi_i)$ – taškų koordinatės, $y_j = y_l^m(\theta, \varphi)$ – sferinės harmoninės funkcijos, surašytos į vienmatį masyvą, kur indeksas apskaičiuojamas taip: $j = (l+1)l + m$.

Tokį uždavinį nesunku suformuluoti matriciniu pavidalu taip palengvinant lygčių sistemos sprendimą, nes tereikia surasti sistemos matricos atvirkštinę matricę. Sistemos matrica A ne visada gali būti kvadratinė, t. y. taikomų sferinių funkcijų skaičius gali būti mažesnis arba didesnis nei taškų skaičius. Tokiais atvejais naudojama tariamai atvirkštinė matrica:

$$A^+ = A^T (AA^T)^{-1}. \quad (5)$$

Norint įvertinti gautojo modelio tikslumą, reikalingi tam tikri įverčiai, todėl reikia mokėti apskaičiuoti sumodeliuotos formos paviršiaus plotą bei inercijos momentą:

$$S = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} F^2 \sin \theta d\varphi d\theta, \quad (6)$$

$$I0 = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} F^4 \sin \theta d\varphi d\theta. \quad (7)$$

Nors ir gaunama modelio analitinė išraiška, plotą bei inercijos momentą skaičiuoti integruojant nepatogu, nes reikalingi nemaži kompiuteriniai bei laiko resursai. Todėl integralai (6)–(7) formulėse pakeičiami baigtinėmis sumomis ir įverčiai skaičiuojami skaitiškai. Modelio tikslumui vertinti taikomos absoliučiosios paklaidos:

$$\Delta S = |S^{tikr} - S^{eskp}|, \quad (8)$$

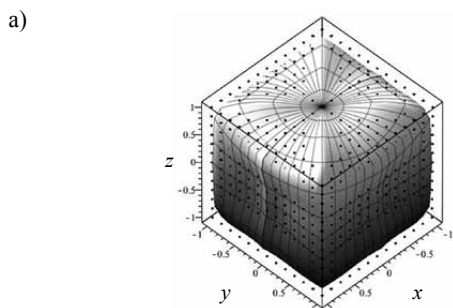
$$\Delta I0 = |I0^{tikr} - I0^{eskp}|. \quad (9)$$

Rezultatai

Aptartai modeliavimo strategijai patikrinti bei įvertinti buvo atlikti keli testai. Norint ne tik vizualiai įvertinti modelio tikslumą, bet ir turėti galimybę palyginti gauto modelio paviršiaus ploto bei inercijos momentus su teoriškai apskaičiuotais, testams buvo pasirinktas žinomos geometrijos kūnas.

Eksperimentui atlikti pasirinktas kubas, kurio briaunos ilgis yra 2. Paviršiaus taškai generuojami reguliariu tinkleliu. Eksperimentui buvo pasirinktas taškų skaičius $Nt = 866$ ir bandoma gauti kuo tikslesnį modelį. 1 pav. pateikiamas kubo modelis, gautas taikant 9 sferines funkcijas.

Gautas modelis vertinamas taikant absoliučiąją paklaidą. Paklaida skaičiuojama vis didinant taškų skaičių, taip siekiant nustatyti, koks taškų skaičius būtų optimalus vertinant modelio paklaidą. Šios priklausomybės grafikas pateiktas 2 pav. Kaip matyti iš grafiko, kol taškų skaičius nedidelis, paklaida šokinėja labiau. Imant didesnį taškų skaičių, nei buvo naudota kubo modeliui sugeneruoti, paklaida nešokinėja ir daugmaž nusistovi vienodo dydžio. Todėl vertinant modelio paklaidą reikėtų naudoti ne mažesnį taškų skaičių nei generuojant modelį.

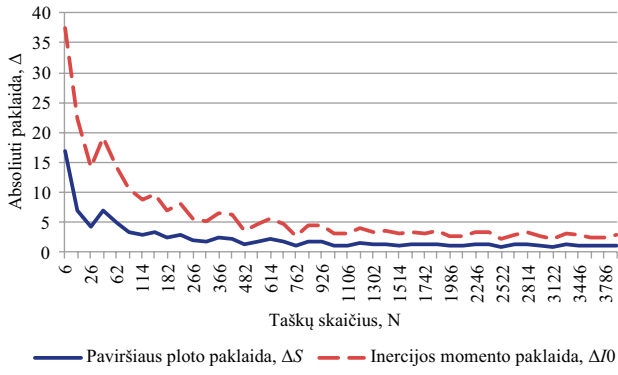


b)

$$F = 2,156 - 0,273 \sin \theta \sin \varphi - 0,553 \cos \theta - 0,273 \sin \theta \cos \varphi - 0,0196(3 - 3 \cos^2 \theta) \sin 2\varphi + 0,271 \cos \theta \sin \theta \sin \varphi - 0,596(1,5 \cos^2 \theta - 0,5) + 0,271 \cos \theta \sin \theta \cos \varphi - 0,189(3 - 3 \cos^2 \theta) \cos 2\varphi$$

1 pav. Kubo modelis, kai sferinių funkcijų skaičius yra 9: a – kubo brėžinys; b – kubo paviršiaus lygtis sferinėmis funkcijomis

Fig. 1. Model for the cube when the number of spherical harmonics is 9: a – cube drawing; b – spherical harmonics of the equation for the cube surface

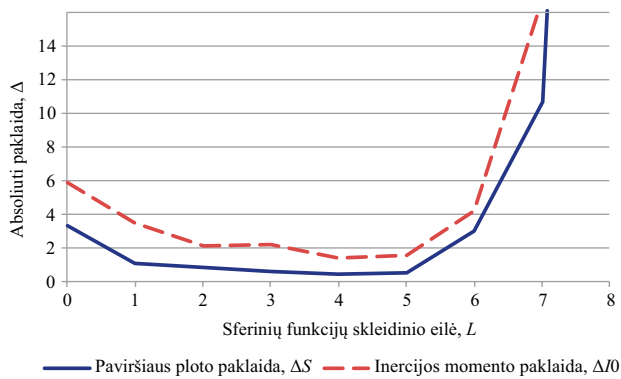


2 pav. Įverčių paklaidos priklausomybė nuo taškų skaičiaus, kai kubo modelis gautas taikant 9 sferines funkcijas

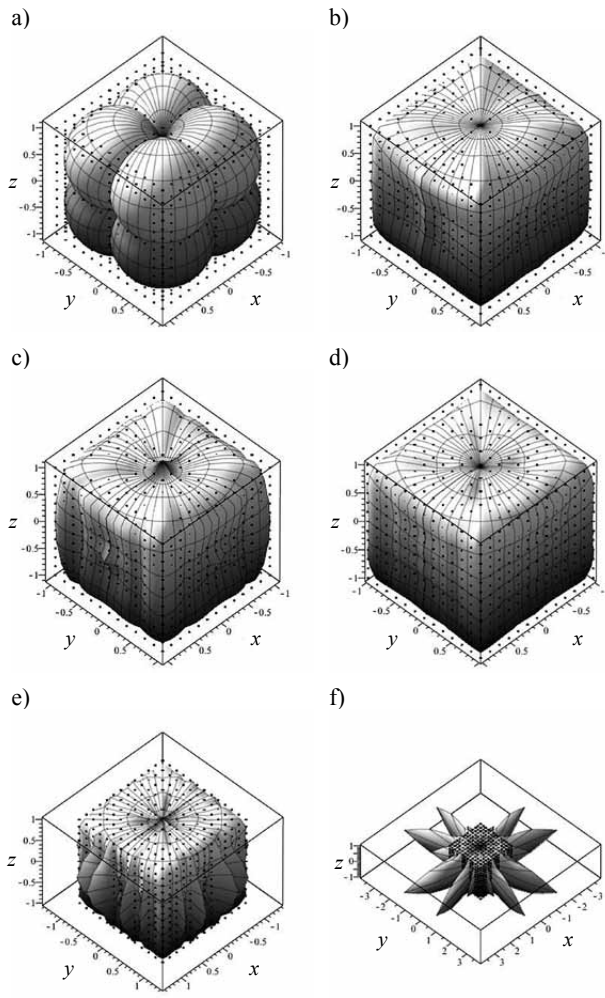
Fig. 2. Dependence of estimate errors on the number of points when the model for the cube is derived using 9 spherical harmonics

Bandoma gauti tikslesnį kubo modelį nei taikant 9 sferines funkcijas, todėl skaičiuojama padidinant sferinių funkcijų skaičių. Paviršiaus ploto bei inercijos momento paklaidų įvertinimas pateikiamas 3 pav., iš kurio matoma, kad modeliai gaunami šiek tiek tikslesni, kai $L = 3$, $L = 4$ ir $L = 5$. Naudojant sferinių funkcijų laipsnį, didesnį nei 5, tikslesnis modelis nėra gaunamas.

Kubo modelių, gautų esant skirtingiems sferinių funkcijų laipsniams, brėžiniai pateikiami 4 pav., a, b, c, d, e ir f dalyse. Kaip matyti iš paveikslėlių, didesnio nei 5 laipsnio modeliai turi iškilumą virš kubo paviršiaus. Būtent tokius nuokrypius nuo kubo ir rodo išaugusios paklaidos grafike.



3 pav. Modelio priklausomybė nuo funkcijų skaičiaus
Fig. 3. Dependence of the model on the number of spherical harmonics



4 pav. Skirtingi kubo modeliai: a – modelis, kai $L = 1$; b – modelis, kai $L = 2$; c – modelis, kai $L = 3$; d – modelis, kai $L = 5$; e – modelis, kai $L = 7$; f – modelis, kai $L = 8$
Fig. 4. Different models for the cube: a – model when $L = 1$; b – model when $L = 2$; c – model when $L = 3$; d – model when $L = 5$; e – model when $L = 7$, f – model when $L = 8$

Išvados

Straipsnyje pateiktas sferinių funkcijų modelis, kuris pritaikomas kubo formos dalelei modeliuoti. Remiantis pateiktais grafikais ir atliktais eksperimentais, nustatyta, kad turint 866 taškus kubas tiksliausiai sumodeliuojamas, kai sferinių funkcijų skleidinio eilė yra $L = 5$. Tačiau tokio modelio analitinė išraiška yra ilgoka ir tolesniems skaičiavimams gali netikti, nes reikalautų didesnių resursų, palyginti su žemesnės eilės modeliais. Gana tikslus kubo modelis gaunamas ir skleidinio eilei esant $L = 2$. Todėl skaičiavimuose galima taikyti ir šį modelį siekiant sutaupyti laiko ir kompiuterio resursų.

Literatūra

- Chen, J.; Schinner, A.; Matuttis, H.-G. 2010. Discrete element simulation for polyhedral granular particles, *Theoretical and Applied Mechanics Japan* 59: 335–346.
- Cleary, P. 2008. The effect of particle shape on simple shear flows, *Powder Technology* 179: 144–163. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2007.06.018>
- Cundall, P.; Strack, O. 1979. A discrete numerical model for granular assemblies, *Geotechnique* 29: 47–65. <http://dx.doi.org/10.1680/geot.1979.29.1.47>
- Cundall, P. A. 1988. Formulation of a three-dimensional distinct element model – part 1: a scheme to detect and represent contacts in a system composed of many polyhedral blocks, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 25(3): 107–116. [http://dx.doi.org/10.1016/0148-9062\(88\)92293-0](http://dx.doi.org/10.1016/0148-9062(88)92293-0)
- Džiugys, A.; Peters, B. 2001. An approach to simulate the motion of spherical and non-spherical fuel particles in combustion chambers, *Granular Matter* 3: 231–266. <http://dx.doi.org/10.1007/PL00010918>
- Garboczi, E. J. 2011. Three dimensional shape analysis of JSC-1A simulated lunar regolith particles, *Powder Technology* 207: 96–103. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2010.10.014>
- Höhner, D.; Wirtz, S.; Kruggel-Emden, H.; Scherer, V. 2011. Comparison of the multi-sphere and polyhedral approach to simulate non-spherical particles within the discrete element method: influence on temporal force evolution, *Powder Technology* 208: 643–656. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2011.01.003>
- Höhner, D.; Wirtz, S.; Scherer, V. 2012. A numerical study on the influence of particle shape on hopper discharge within the polyhedral and multi-sphere discrete element method, *Powder Technology* 226: 16–28. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2012.03.041>
- Latham, J.; Munjiza, A. 2004. The modelling of particle systems with real shapes, *Philosophical Transactions A* 362: 1953–1972.
- Liu, X.; Garboczi, E. J.; Grigoriu, M.; Lu, Y.; Erdogan, S. T. 2011. Spherical harmonic-based random fields based on real particle 3D data: improved numerical algorithm and quantitative comparison to real particles, *Powder Technology* 207: 78–86. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2010.10.012>
- Morris, R. J.; Najmanovich, R. J., et al. 2005. Real spherical harmonic expansion coefficients as 3D shape descriptors for protein binding pocket and ligand comparisons, *Bioinformatics* 21(10): 2347–2355. <http://dx.doi.org/10.1093/bioinformatics/bti337>
- Mousa, M.-H.; Chaine, R.; Akkouche, S.; Galin, E. 2008. Toward an efficient triangle-based spherical harmonics representation of 3D objects, *Computer Aided Geometric Design* 25: 561–575. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cagd.2008.06.004>
- Pournin, L.; Liebling, T. M. 2005. A generalization of distinct element method to tridimensional particles with complex shapes, in *Powders & Grains 2005*, 17–22 July 2005, Stuttgart, Germany, 1375–1478.
- Rokhlin, V.; Tygert, M. 2006. Fast algorithms for spherical harmonic expansions, *SIAM Journal on Scientific Computing* 27(6): 1903–1928. <http://dx.doi.org/10.1137/050623073>
- Wang, H.; Wu, P.; Wang, Z. 2006. An approach for spherical harmonic analysis of non-smooth data, *Computers and Geosciences* 32: 1654–1668. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cageo.2006.03.004>
- Wachs, A.; Girolami, L.; Vinay, G.; Ferrer, G. 2012. Grains 3D, a flexible DEM approach for particles of arbitrary convex shape – Part I: numerical model and validations, *Powder Technology* 224: 374–389. <http://dx.doi.org/10.1016/j.powtec.2012.03.023>

THE APPLICATION OF SPHERICAL HARMONICS FOR DESCRIBING A CUBE-SHAPE PARTICLE

U. Radvilaitė

Abstract

The paper discusses various models for discrete element methods of modelling particle shapes. The multi-sphere method is most frequently used, though a polyhedral approach and a hybrid spheropolyhedral model can also be introduced. All above mentioned methods precisely approximate particle shapes, and difficulties in modelling contact between particles arise. Thus, there is a need to have an universal method that gives the analytical expression of the shape. For this purpose, spherical harmonics have been introduced. The article presents the concept of the spherical harmonics model and experimental results describing the cube-shape particle.

Keywords: discrete element method, spherical harmonics, cube-shape particle.