

DOI:10.3876/j.issn.1000-1980.2015.02.013

一种基于概率密度函数的 DEM 试样生成法

沈超敏,刘斯宏,张燎军,王怡舒,阚丽景,王子健

(河海大学水利水电学院,江苏 南京 210098)

摘要:离散元模拟颗粒材料力学性能时,为保证生成数值试样级配曲线的连续性以及与所需级配曲线的吻合性,基于概率密度函数法,提出一种用于制备颗粒流离散单元法数值试样的新方法。定义了级配的不匹配度参数,用来定量描述生成试样的级配曲线与原型级配曲线的偏差。对比了该方法和现有试样制备法,并讨论生成颗粒数目对生成试样级配曲线的影响。结果表明,该试样生成法能够模拟任意级配曲线的试样,且生成的数值试样级配曲线具有良好的连续性和光滑性。随着生成颗粒数目的增大,该试样生成法生成的试样级配曲线收敛于原型试样级配曲线。

关键词:材料力学性能;颗粒体材料;颗粒级配曲线;颗粒流离散单元法;试样生成法;概率密度函数法

中图分类号:TU502+.6 文献标志码:A 文章编号:1000-1980(2015)02-0167-05

A specimen generation method for discrete element method based on probability density function

SHEN Chaomin, LIU Sihong, ZHANG Liaojun, WANG Yishu, KAN Lijing, WANG Zijian

(College of Water Conservancy and Hydropower Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China)

Abstract: During the simulation of material mechanical properties of granular materials using the discrete element method (DEM), in order to guarantee the continuity of the generated grading curve for the numerical specimen and the conformity of the generated grading curve with the desired grading curve, a new method based on the probability density function (PDF) was proposed to generate a numerical specimen of the particle flow DEM. A parameter to describe the mismatch of grading was defined to quantify the deviation between the generated grading curve and the original grading curve. A comparison of the proposed method and the existing method of specimen generation was conducted and the influence of the particle number on the generated grading curve was investigated. The results show that the proposed method can generate specimens of an arbitrary grading curve and the generated grading curve has a high degree of continuity and smoothness. Moreover, as the number of generated particles increases, the generated grading curve based on the PDF converges to the original grading curve.

Key words: material mechanical property; granular materials; particle grading curve; particle flow discrete element method; specimen generation method; probability density function

自 Cundall 等^[1]将离散单元法 (DEM) 用来模拟岩土材料以来,离散单元法,尤其是将实际颗粒简化为球形颗粒的颗粒流离散单元法,作为一种细观尺度研究颗粒体材料力学性能的工具,已经在岩土力学研究方面获得广泛应用。DEM 通过求解每个颗粒体的动力方程,能够给出颗粒体系统的所有几何和动力信息,从而从细观的角度对颗粒体材料的力学特性进行分析。显然,运用 DEM 进行研究时,数值试样的生成是一个重要环节。许多研究都表明生成试样的级配对颗粒体材料的力学性质有很大影响^[2-7],良好的颗粒级配能够大幅度改观颗粒体内部受力的均匀性,进而改变土体的受力变形特性。因此,在制备 DEM 试样时有必要考虑

收稿日期:2014-06-24

基金项目:国家自然科学基金(51179059);江苏省 2013 年度普通高校研究生科研创新计划(CXZZ13_0255)

作者简介:沈超敏(1989—),男,江苏常州人,硕士研究生,主要从事粒状体力学研究。E-mail:Chaomin.shen@hotmail.fr

通信作者:刘斯宏,教授。E-mail:sihongliu@hhu.edu.cn

颗粒的粒径分布。然而,目前该方面的研究还比较少。Cheng 等^[8]考虑了单一粒径的试样制备;Madadi 等^[9]在研究不同级配的颗粒组构张量的关系时,考虑了2种不同粒径的试样混合和粒径呈均匀分布的试样;Jiang 等^[10]给出计算二维情况下指定级配试样的不同粒径的颗粒数目的公式:

$$N_i = \frac{P_i}{r_i^2 P} N \tag{1}$$

其中

$$P = \sum_{i=1}^n \frac{P_i}{r_i^s}$$

式中: N_i ——第*i*粒径组颗粒数; i ——粒径组数; P_i ——粒径组*i*的质量百分数; r_i ——第*i*粒径组代表粒径; N ——颗粒总数; n ——粒径组数目; s ——参数,二维情况下 $s=2$,三维情况下 $s=3$ 。

式(1)用若干组有代表性粒径的颗粒来代替所有的粒径,能够模拟大多数考虑级配的颗粒流离散单元试验。然而若要用该方法尽可能精确地匹配原型级配,只有通过增加粒径种类来实现,当颗粒粒径分布较宽广时该方法制备较为繁琐,且获得的级配曲线呈明显的阶梯状。迄今为止,在制备数值试样时,对颗粒粒径分布的研究仍未实现级配的连续性和光滑性。

现有的试样制备方法主要可以分为2类:第一类为静态生成法,即生成过程并不考虑颗粒的实际动力状态。其中一种具有代表性的静态生成法由 Cavarretta 等^[11]提出,该方法旨在通过实际试样的物理参数(几何特性、密度等)获取颗粒的位置、大小和形状信息,从而在这些位置放置所需大小和形状的颗粒。该方法在采集实际试样信息的过程中较为繁琐;Evans^[12]给出了另一种静态试样制备法,开发了一种被称为简单顺序抑制模型(SSI)的系统,可以顺序地在某一指定区域随机生成颗粒,如果颗粒之间发生嵌入,则颗粒之间会相互排斥,当该区域内无法再容纳颗粒时,该过程停止。这种方法能够按照指定级配生成松散试样。另外一类与静态生成法相对应,称作动态生成法,其在生成颗粒时就将颗粒的动力特征考虑在内,用颗粒在阻尼作用下动态松弛的解取代静态解。Jiang 等^[10]和 Cheng 等^[8]分别给出了1种具有代表性的动态试样制备法。Jiang 等提出了多层制备法,将试样生成区域分成若干层,逐层随机生成松散试样,再逐层压实,并通过定义均匀性系数来定量对比不同方法制备试样的均匀性,发现该方法能够消除压实过程导致的边界效应,因而有较好的均匀性。Cheng 等在颗粒流离散单元主程序中添加了重力作用,将随机生成的颗粒仅在重力作用下达达到压实效果。总体而言,动态试样生成法的原理和 DEM 主体程序的原理相同,因而程序开发的难度较小,应用也更为广泛。

鉴于目前的离散单元法不能生成连续级配试样的现状,本文基于概率密度函数法提出一种新的离散单元试样生成法。为了评价该试样生成法,定义了能够反映试样级配不匹配程度的参数,从而与传统试样生成法进行了比较。

1 基于概率密度函数的试样生成法

1.1 颗粒粒径概率密度函数

某连续型随机变量的概率密度函数是一个描述该随机变量输出值在某个确定的取值点附近可能性的函数。对于取值区间为 $[x_1, x_2]$ 的连续型随机变量*X*,定义*X*在区间 $[x_1, x]$ 内出现的概率为 $P(x)$,则可知*X*出现在区间 $[x, x+\Delta x]$ 内的概率为 $P(x+\Delta x)-P(x)$ 。定义随机变量*X*的概率密度函数 $p(x)$ 为

$$p(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{P(x + \Delta x) - P(x)}{\Delta x} = \frac{dP}{dx} \tag{2}$$

实际应用中,通常把一定尺寸范围的颗粒划分为一组,各种大小的粒组中颗粒的相对含量质量比为该试样的级配^[13]。对某一给定的原型试样,假设试样颗粒的最小粒径和最大粒径分别为 D_1 和 D_2 ,通常在半对数坐标纸上以横坐标表示粒径,纵坐标表示小于某一粒径*D*的颗粒质量累计百分比来反映颗粒的级配,在本文中,将小于某一粒径*D*的颗粒质量累计百分比用级配函数 $\varphi(D)$ 来表示。图1中实线为某一典型级配曲线,根据上述定义,粒径处于 $[D, D+dD]$ 区间内颗粒质量百分比为 $d\varphi$ 。故对于直径为*D*的颗粒,其数目为

$$dN(D) = \frac{d\varphi}{\rho dV} M \tag{3}$$

式中: ρ ——颗粒的密度; V ——粒径为*D*的单个颗粒体积,在二维情况下 $V=\pi D^2/4$; M ——试样颗粒的总质量。

粒径为 D 颗粒出现的概率为

$$dP = \frac{dN(D)}{N} \tag{4}$$

由(3)式可知:

$$N = \int_{D_1}^{D_2} \frac{d\varphi}{\rho V} M = \int_{D_1}^{D_2} \frac{d\varphi}{dD} \frac{1}{\rho V} M dD \tag{5}$$

因此,根据式(2)关于概率密度函数的定义,粒径为 D 的颗粒对应的概率密度函数为

$$p(D) = \frac{1}{N} \frac{dN(D)}{dD} = \frac{\frac{d\varphi}{dD}}{V \int_{D_1}^{D_2} \frac{1}{V} \frac{d\varphi}{dD} dD} \tag{6}$$

式(6)建立了级配函数和颗粒粒径概率密度函数的关系。可见,概率密度函数随着颗粒粒径 D 的增大而减小,且小粒径颗粒的概率密度函数要比大粒径颗粒的概率密度函数大得多。

以上算法是针对二维圆形颗粒,该试样生成法可以进行拓展。对于三维的球形颗粒只需将式(3)中的体积改为 $V=\pi D^3/6$ 。同样,对于其他形状的颗粒,在知道其体积计算公式的情况下也只需类似地对式(3)中的体积进行修改。

1.2 基于概率密度函数 $p(x)$ 的颗粒粒径计算方法

为了在算法上实现 X 符合概率密度函数为 $p(x)$ 的分布,一种可行的方法是采用 Neumann 提出的舍选法^[14],其算法步骤可以归结为:(a) 取 X 的最小值 x_1 和最大值 x_2 。(b) 选择某一 λ 值,使对任意 $x \in [x_1, x_2]$,满足 $\lambda p(x) \leq 1$ 。(c) 生成服从 $[0,1]$ 分布的随机数 r_1 和 r_2 ,令 $y=x_1+(x_2-x_1)r_1$ 。(d) 比较 r_2 和 $\lambda p(y)$ 的大小,如果 $r_2 \leq \lambda p(y)$ 则令 $x=y$,输出 x ;否则剔除 r_1 和 r_2 ,重新返回步骤(c)。如此循环,产生随机数列 $x_1, x_2, x_3, \cdots, x_n$ 。

1.3 试样生成流程

本文对本课题组自行研发的离散单元法计算程序 DEAC 进行了二次开发,该程序开发原理详见文献[15]。图 2 为基于概率密度函数试样制备法(包括粒径生成和试样压实)的流程。据此在 DEM 计算程序中增加了相应的模块。

第 1 步:读入原型级配曲线数据,由用户指定需要生成的颗粒总数 N ,并给定粒径的取值范围 $[D_1, D_2]$;指定试样生成区域及初始密度。

第 2 步:根据式(6)计算需生成试样的粒径概率密度函数。进入颗粒生成循环,每循环一次,生成 1 个颗粒,直至生成 N 个颗粒,程序跳出循环。

第 3 步:试样压实。待颗粒在重力和摩擦阻尼作用下逐渐静止后,在试样顶部放置一块水平加载板,并逐渐施加竖向荷载,直至试样趋于设定的密实度。

需要说明的是对采用 SSI 模型(如 PFC 软件)获得预期密度试样的读者,本文的试样生成法依然可行,只需将步骤 3 替换为 SSI 模型以提高计算效率。笔者在步骤 3 中采用加载板压实试样的方法只是为读者提供一种 SSI 模型的替代选择,目的是降低颗粒流离散单元软件开发的难度。

1.4 算例

图 3 中的实线为某粗粒料试样的原型级配曲线,用多项式拟合得到其级配函数为 $\varphi = 0.0008D^3 - 0.1012D^2 + 4.8222D + 9.4244$ 。设定在 $0.3\text{ m} \times 0.45\text{ m}$ 的长方形区域内生成 1500 个二维圆形颗粒,粒径取值范围为 $[2.5\text{ mm}, 60\text{ mm}]$ 。由式(6)计算得到对应于该级配函数的颗粒粒径概率密度函数为

$$p(D) = 0.0018 - \frac{0.1507}{D} + \frac{3.5899}{D^2} \tag{7}$$

按前述方法随机生成粒径符合该概率密度函数的颗粒。试样压密过程中采用的 DEM 计算参数为:颗粒间法向接触刚度 $k_n=35\text{ MPa}$,切向接触刚度 $k_t=12\text{ MPa}$,颗粒间摩擦系数 $\mu=0.5$,颗粒密度 $\rho=1900\text{ kg/m}^3$,阻

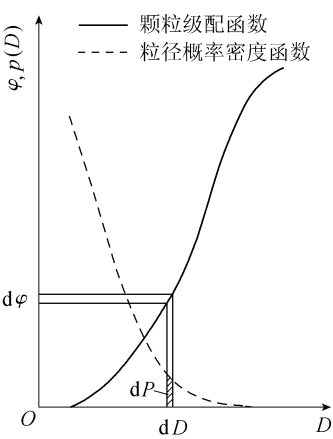


图 1 试样级配函数及相应的粒径概率密度函数曲线
Fig. 1 Specimen grading function and corresponding probability density function of grain diameter

尼系数 α, β, γ 皆设置为8.0。其中颗粒和边界的摩擦系数在压密之前置为零,以减少试样的边界效应。新生成的颗粒被置于制备框的顶部从左到右逐层排列,颗粒在其自重作用下自由下落至制备框底部,新生成的颗粒和先期下落到底部的颗粒发生碰撞,来回弹起几次并落下后与其他颗粒充分接触混合。最后,颗粒在阻尼作用下逐步趋于静止。松散试样生成后,重新设定颗粒和边界的摩擦系数为0.45,同时为使试样内部应力均匀,将颗粒的重力加速度置为零。在生成区域顶部添加一块水平加载板,对松散试样进行侧限压缩。为保证试样的均匀性,在侧限压缩过程中反复数次位移控制的加荷—卸荷—再加荷的循环。

2 结果分析

2.1 不同试样生成法对比

式(1)采用的方法理论上也可以生成任意级配的试样,且可以通过增大代表粒径组数 n 来提高生成试样和原型试样级配曲线的匹配度。然而,在实际计算过程中式(1)计算获得的第 i 粒径组颗粒数 N_i 经常会出现如下2种情况:(a) N_i 为大于1的非整数;(b) N_i 为小于1的非整数,四舍五入后可能为零。情况(a)可采取四舍五入后的结果,然而当 N_i 的值较小时,结果的相对误差较大;情况(b)只有通过减少代表粒径组数 n 加以避免,无法提高生成试样和原型试样级配曲线的匹配度。对于本文算例中的原型级配曲线,为了避免情况(b)的出现,试算结果表明 n 不宜大于20。

图3对比了不同数值试样制备法的级配曲线和原型试样级配曲线,其中点线为按式(1)生成的试样级配曲线,代表粒径组数 n 取为20,相当于相邻代表粒径组的粒径差值为3 mm;虚线为采用本文的概率密度函数法生成的试样级配曲线。不难发现后者与原型级配曲线的匹配程度更好,且级配曲线比较连续、光滑。图4对比了粒径区间为[11.5 mm, 14.5 mm]的颗粒粒径数目分布情况。可以看出,采用概率密度函数法生成试样的颗粒粒径分散在整个区间,使生成试样的级配曲线较为连续;而采用式(1)法生成的试样粒径集中在粒径为13 mm处,其他区域无粒径生成。

为了定量描述生成的级配曲线与原型级配曲线的匹配程度,定义2条曲线的不匹配度参数为

$$N_s = \frac{\int_{D_1}^{D_2} |\alpha(D) - \beta(D)| dD}{\int_{D_1}^{D_2} |\beta(D)| dD} \tag{8}$$

式中: $\alpha(D), \beta(D)$ ——生成试样级配曲线与原型级配曲线, $D \in [D_1, D_2]$ 。

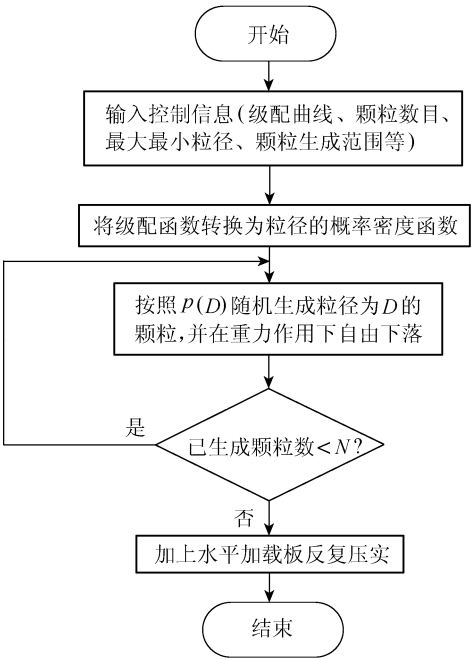


图2 颗粒制备流程

Fig. 2 Flowchart of particle generation procedure

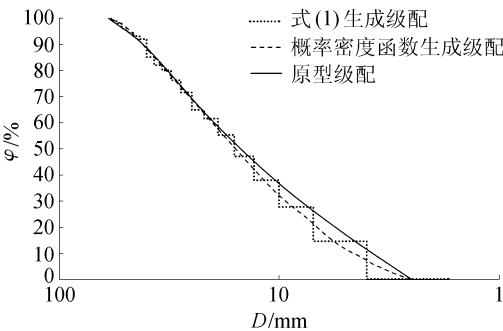


图3 不同制备法的级配曲线和原型级配曲线

Fig. 3 Grading curves of different generation methods and original generation method

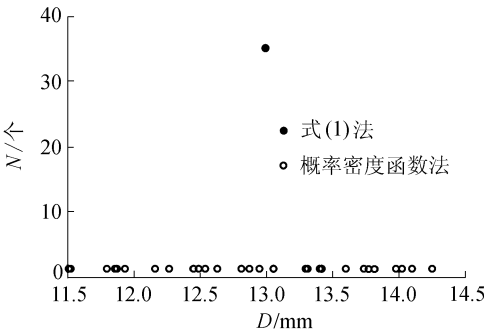


图4 [11.5 mm, 14.5 mm] 区间内颗粒粒径分布

Fig. 4 Distribution of grain diameters in interval of [11.5 mm, 14.5 mm]

显然,如果 2 条曲线完全重合,则有 $N_s=0$, N_s 越大表明 2 条曲线越不匹配。根据如上定义,对于图 3 所示的算例,按照式(1)方法的不匹配度为 0.173,按本文的概率密度函数的不匹配度为 0.068。需要注意的是,采用式(1)方法生成级配的不匹配度主要来自级配曲线的不光滑,而概率密度函数法生成试样的不匹配度主要来自拟合曲线和原型级配曲线的误差,若采用较高的拟合次数或者采用插值法来描述原型级配曲线,就可以进一步减少两者的不匹配度。

2.2 生成颗粒数对级配曲线匹配的影响

由于采用概率密度函数生成粒径具有一定的随机性,为了保证生成试样级配与原型级配尽可能吻合,生成的颗粒数需要足够多。图 5 给出了生成颗粒数与生成级配的不匹配度的关系。可见,在试样的颗粒数较少时,生成试样的级配与原型级配误差较大;随着生成颗粒数的增大,不匹配度减小,生成的级配曲线与原型级配的吻合度提高,不匹配度最终随着颗粒数的增大趋近于零。也就是说,只要颗粒的数目足够多,不匹配度可以任意小。

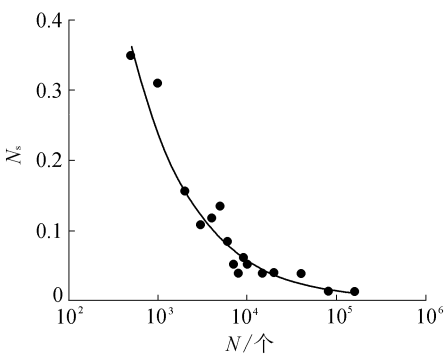


图 5 生成颗粒数对不匹配度 N_s 的影响

Fig. 5 Influence of generated particle number on N_s

3 结 论

- a. 采用概率密度函数法可以生成任意级配的试样,生成的试样级配曲线连续、光滑,且和原型级配曲线匹配程度较好。
- b. 随着生成试样颗粒数的增大,概率密度函数法生成试样的级配曲线收敛于原型级配曲线。

参考文献:

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

[2] VOIVRET C, RADJAI F, DELENNE J Y, et al. Multiscale force networks in highly polydisperse granular media [J]. Physical Review Letters, 2009, 102(17): 1-4.

[3] MEDDAH M S, ZITOUNI S, BELÂABES S. Effect of content and particle size distribution of coarse aggregate on the compressive strength of concrete[J]. Construction and Building Materials, 2010, 24(4): 505-512.

[4] MINH N H, CHENG Y P. A DEM investigation of the effect of particle-size distribution on one-dimensional compression[J]. Geotechnique, 2013, 63(1): 44-53.

[5] WIACEK J, MOLEND A M. Effect of particle size distribution on micro-and macromechanical response of granular packings under compression[J]. International Journal of Solids and Structures, 2014, 51(25/26): 4189-4195.

[6] VALLEJO L E, MAWBY R. Porosity influence on the shear strength of granular material—clay mixtures[J]. Engineering Geology, 2000, 58(2): 125-136.

[7] KENNEY T C, LAU D, OFOEGBU G I. Permeability of compacted granular materials[J]. Canadian Geotechnical Journal, 1984, 21(4): 726-729.

[8] CHENG Y F, GUO S J, LAI H Y. Dynamic simulation of random packing of spherical particles[J]. Powder Technology, 2000, 107(1): 123-130.

[9] MADADI M, TSOUNGUI O, LÄTZEL M, et al. On the fabric tensor of polydisperse granular materials in 2D[J]. International Journal of Solids and Structures, 2004, 41(9): 2563-2580.

[10] JIANG M J, KONRAD J M, LEROUEIL S. An efficient technique for generating homogeneous specimens for DEM studies [J]. Computers and Geotechnics, 2003, 30(7): 579-597.

[11] CAVARRETTA I, COOP M, O'SULLIVAN C. The influence of particle characteristics on the behaviour of coarse grained soils [J]. Geotechnique, 2010, 60(6): 413-423.

[12] EVANS J W. Random and cooperative sequential adsorption [J]. Reviews of Modern Physics, 1993, 65(4): 1281-1304.

[13] 卢延浩,刘斯宏,陈亮,等. 土力学[M]. 北京:高等教育出版社,2009:1-16.

[14] 张杰,杨振海,赵颖. 基于函数凸性的变换区域舍选法在连续分布随机数中的应用[J]. 应用数学,2004(3):472-478. (ZHANG Jie, YANG Zhenhai, ZHAO Ying. Domain transformation method and its application in continuous random number generation[J]. Mathematica Applicata, 2004(3): 472-478. (in Chinese))

[15] FU Zhongzhi, LIU Sihong, LI Zhuo. Discrete element simulations of two wetting effects on granular materials [J]. Chinese Science Bulletin, 2011, 56(35): 3803-3811.