

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

離散元素法運動機制簡化與適用性之探討研究

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2211-E-002-097-

執行期間：91年08月01日至92年07月31日

執行單位：國立臺灣大學土木工程學系暨研究所

計畫主持人：謝尚賢

計畫參與人員：楊承道、林立欣

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 11 月 1 日

摘要

本研究主要的目的在於探討離散元素法運動機制簡化的可行性與適用性，以期能夠節省電腦的運算時間而提高運算效率。為符合研究的需求，本研究開發出一套可抽換運動機制的離散元素模擬系統 Knight-Anne，並以自充填混凝土 V 漏斗試驗模擬的初始堆積(Initial Packing)為範例，利用本研究所開發之軟體比較分析不同的運動機制所帶來的效應。

關鍵字:離散元素法，元素運動機制，初始堆積

Abstract

The major objective of the research is to investigate simplified element motion models for the Discrete Element Method so that the computer operation time can be effectively reduced. In addition, a discrete element analysis program has been developed in this work and used to verify feasibility and effectiveness of simplified motion mechanisms in the example of initial packing for the simulation of v-funnel tests of self-compacting concrete.

Keyword: discrete element method, element motion mechanism, initial packing

一、研究內容

1.1 前言

離散元素法模擬，經常須要耗費相當大的運算時間，才能得到令人覺得合理與滿意的結果。而離散元素法之所以須要耗費如此龐大的運算時間，可從兩方面來探討：(1) 為了確保所有的元素在每一回合的移動中做出正確的運動反應且避免元素發生重疊的狀況，模擬系統須要在每一回合的模擬中對任兩個元素進行碰撞檢測。若令 N 為模擬系統中的元素個數，則每一個運算回合，需要檢查的組合就有 C_2^N 個，運算的時間隨著元素的個數成次方成長。若要減少碰撞檢測的運算量，有兩種作法。第一種是採用簡單且有效的策略過慮掉沒有碰撞可能的組合而免去較花費時間的檢測，例如文獻 [1][2]，另一種方式採用平行與分散式計算環境藉由發展平行運算策略與多個 CPU 同時運算來加快運算時間，例如文獻 [3] 所採用的方法。(2) 再者離散元素複雜的形狀與複雜運動機制，也需要花費相當的運算資源，要有效率的處理複雜的形狀與複雜的運動機制，必須發展較有效率的演算法。

然而面對複雜的運動機制，除了發展有效率的演算法之外，也可以考慮將複雜的運動機制加以簡化以降低運算量。例如，將複雜的運動機制伴隨而來的非線性運動方程式，簡化成線性方程式來求解；或者如 [4][5] 利用機率函數或者最佳化技術控制所有離散元素的移動。必須強調的是，雖然簡化可能帶來更高的運算效率，但是也可能帶來的是模擬結果失真。所以本研究以自充填混凝土 [6][7] 的 V 漏斗試驗模擬的起始設置為範例，嘗試簡化離散元素運動機制，並探討其適用性。

1.2 研究目的

本研究的目的，在於透過追縱與分析離散元素在模擬過程中的行為，來比較不同的運動機制所產生的模擬結果。藉此探討離散元素運動機制簡化的可行性與適用性，以節省運算時間進而提昇離散元素法的運算效率。

1.3 文獻探討

1.3.1 離散元素法

離散元素法是一種模擬求解離散物質行為的數值模擬技術，主要的原理是將模擬的物質視為不連續的離散體組成，藉著在電腦中模擬微觀的離散體行為，來了解物質微觀與巨觀的行為。隨著研究內容與模擬材料的不同，發展出來的離散元素法皆會有些差異，但是整體而言離散元素模擬系統至少包含三個元件：

1. 幾何模型的建立(Object Modeling):也就是以數值化的方式將離散物質於電腦中表達出來。
2. 碰撞檢測(Contact Detection):目的在確保所有的離散元素在模擬的過程中，不會有重疊或穿透的狀況發生。
3. 運動機制(Motion Mechanism):此元件控制著所有離散元素的運動行為，例如，若元素間發生碰撞，元素間的運動需考慮兩元素的物理性質，例如元素的質量，彈性係數、或者個別的速度等因素。

利用離散元素法模擬，模擬開始之前如何產生一個合理的起始狀態是一個相當重要的課題。因為初始狀態的設置關係著模擬求解結果正確與否。而透過比較不同的運動機制，以相關軟體及資訊技術元素法初始設置策略是本研究努力的目標。

本研究中使用到的相關資訊技術主要可分成三個部份來討論：

1. 軟體設計與實作: Design Pattern(設計模式) 包含多個物件導向軟體設計中一再出現的問題的解決方案[10]。只要軟體設計時所遇到的問題與模式符合，就可以一再重複引用其設計。本研究中所開發的軟體即引用多個 Design Pattern 的設計，並以 C++ 程式語言實作。採用 C++ 主要的原因是其語法直接支援物件導向的機制，有利於程式的擴充與維護，而且支援的函式庫相當的多。
2. 檔案的輸出輸入格式：為了方便分析與追蹤離散元素在模擬過程的變化，本研究採用 XML 格式定義輸入與輸出檔格式[9]。利用 XML 格式的好處是模擬結果易於保存，不受軟體版本的限制且易於擴充，而且有利於相關分析工具的開發，例如計算離散元素的密度的程式與視覺模擬的程式可以分別開發，只要兩種程式同時支援相同的檔案格式。
3. 視覺模擬: AutoCAD 是使用很普遍的 3D 繪圖軟體，其圖檔格式有 DWG 及 DXF 檔二種。其中 DXF 的格式較容易取得且易懂，所以本研究所開發的軟體，以 DXF 格式檔案做為視覺模擬的仲介檔。所有模擬的過程與結果均先轉換成 DXF 檔，然後再使用 AutoCAD 軟體的瀏覽功能來觀察。

1.4 研究方法

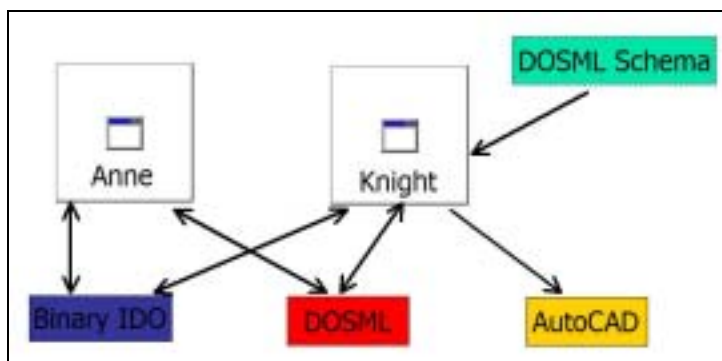
本研究先採用 C++ 語言開發一套三維的離散元素模擬程式。為了能夠深入探討本研究主題，此程式除了具備有一般離散元素模擬程式應有的基本功能之外，還具備了三個特別的功能：(1)離散元素的運動機制可輕易的被置換。(2)具備評估模擬系統狀態的功能。(3)可以追蹤離散元素在模擬過程中的狀態變化。

本研究然後利用所開發的軟體，探討離散元素法運動機制簡化的可行性與其所帶來的影響。我們以自充填混凝土 V-漏斗試驗模擬的初始堆積設置為研究範例。所謂初始狀態的堆積設置是指進行 V-漏斗試驗的模擬前，需要先將用來模擬混凝土的離散元素裝進 V-漏斗模型中。在本研究中，先透過 Knight-Anne 可抽換運動機制的特性，得到不同運動機制所設置完成的初始狀態，再利用分析與追蹤功能，比較不同機運動機制所帶來的影響。

1.5 成果與結論

1.5.1 軟體的開發

本研究依循多形離散體模擬系統架構[8]，開發出一套命名為 Knight-Anne 的軟體。本軟體為一套 3D 的離散元素模擬程式，建構的力學機制包含場力(例如風力、重力)、摩擦力、黏結力、彈簧與阻尼。可以處理離散元素幾何形狀包含球、圓柱、與板，其中圓柱與板元素用來描述邊界，球元素用來模擬離散材料。而球元素的運動行為除了平移以外，更在其受到側向摩差力時會旋轉。而 Knight-Anne 的使用方法可以用圖一來說明。



圖一、Knight-Anne 使用說明圖

如圖一，Knight-Anne 支援三種檔案格式：(1)Binary IDO 是一種二進位格式的檔案，該檔的功能在於記錄模擬系統中所有的環境參數與所有離散元素的狀態。(2)DOSML (Discrete Object Simulation Markup Language)是依循 XML 標準所定訂檔案格式 DOSML Schema[9]，可以用來描述模擬系統的所有環境變數與所有離散元素的狀態。基本上 Binary IDO 與 DOSML 的功能幾乎沒有差異，不過因為 DOSML 為標籤語言，所以較 Binary IDO 直覺，最適當的使用時機是用來描述模擬問題的初始條件或用作其他程式的溝通橋樑。而 Binary IDO 為二進位檔，所以較 DOSML 具備更高的讀寫效率，適合用來記錄與追蹤所有離散元素在模擬過程中的變化。(3) AutoCAD 的 DXF

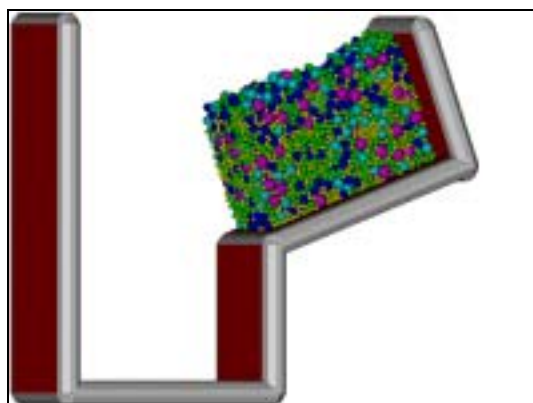
圖檔格式: Knight-Anne 支援 AutoCAD 的 DXF 圖檔格式, 可以將 Binary IDO 或 DOSML 轉換成視覺化的 DXF 圖, 然後透過 AutoCAD 觀察所有離散元素的行為。而 Knight-Anne 主要包含兩個執行檔:(1)Knight 主要用來轉換以上所述的三種檔案格式。(2)Anne 為模擬引擎, 用來分析 DOSML 或 Binary IDO 檔中所描述的離散元素在下一個時間間格狀態 (包含離散元素的位置、速度、角速度等)變化。

1.5.2 模擬範例

以下為兩個模擬範例與其分析結果。這兩個模擬範例中的離散元素都受到重力作用而落進容器中, 並在容器中達到平衡的狀態。而離散元素與離散元素間接觸力的交互作用考慮彈簧力與阻尼。考慮彈簧與阻尼交互作用的運動方程式為二次偏微分方程式, 其正解包含三角函數與指數函數為一相當複雜的方程式。以下兩個範例都分別用兩種方法求解元素與元素間的交互作用, (1)正解: 利用推導二次偏微分方程式所得的複雜方程式求解。(2)近似解: 利用線性近似函數求解。

範例一:

圖二為範例一的起始狀態, 範例一包含 5000 個離散元素, 其中 1865 個模擬混凝土的骨材顆粒, 3135 個大小相同的離散元素模擬膠體粒子。本範例模擬混凝土倒入方形容器內的過程。



圖二、方形容器起始狀態

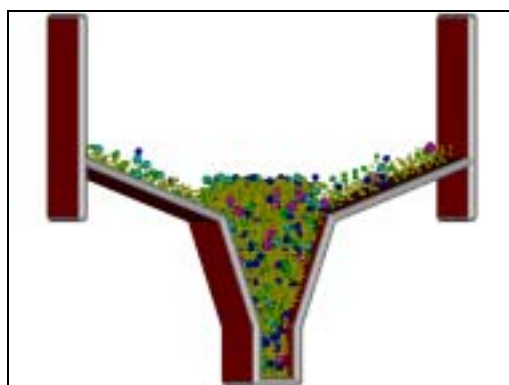
表一為範例一在第 0.2、0.5、0.62、1.2 秒的狀態。

表一、方形容器模擬過程

	0.2 秒	0.5 秒	0.62 秒	1.2 秒
正解				
近似解				

範例二：

圖三為範例二的起始狀態，範例二包含 5000 個離散元素，其中 750 個模擬混凝土含級配的骨材顆粒，4250 個大小相同的離散元素模擬膠體粒子。本起始狀態的建立是以元素不相接觸為原則下，利用亂數產生各個元素的位置，先粗略的排列於容器中，再進行。



圖三、V 漏斗初始狀態



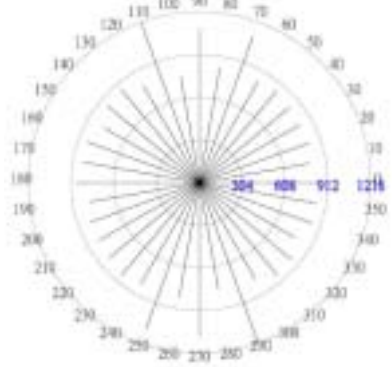
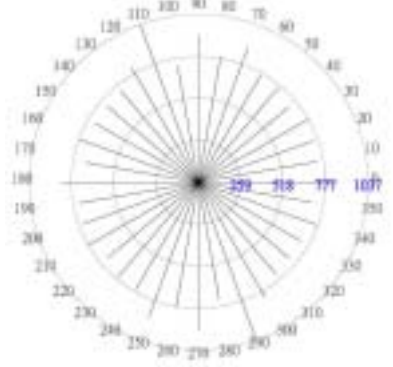
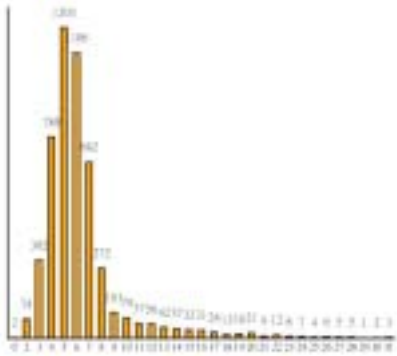
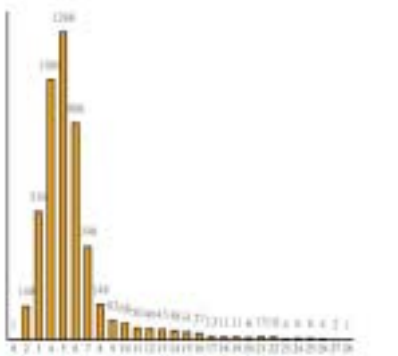
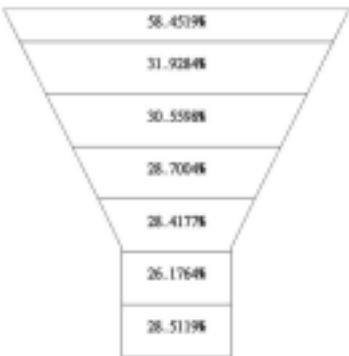
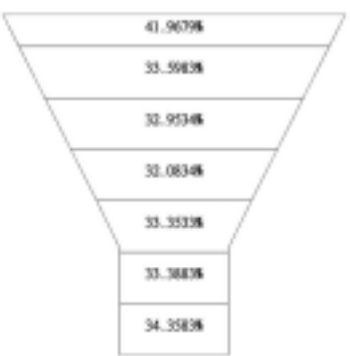
表二是範例二的模擬結果與分析圖表。表中所列三種圖之說明如下。元素接觸力方向分佈圖[11]：穩定狀態下各個相接觸元素的接觸力方向，投影於 xy 平面的統計圖。最外層圓之刻度表示接觸力方向之角度，同心圓的刻度(304,608,912....)表示接觸力方向的出現次數。元素接觸個數圖[11]：橫軸表示元素的配位數，元素的配位數代表與該元素相接觸的元素個數，縱軸表示該配位數的元素有多少個。孔隙率圖：為穩定狀態之分層之孔隙率。

1.5.3 討論

從第一個範例可看出，利用正解與近似解的模擬過程與結果，雖然有差異但是相當接近。在第二個範例中，若深入分析 V 漏斗模擬的穩定狀態，可以發現(1)元素與元素間的接觸力的分佈方向相當接近，(2)元素與其它元素接觸個數統計圖表也非常近似，(3)而堆積結果分層的孔隙率雖然較有差異，但是也不超過 7%。

由以上兩個模擬範例可以發現，應用簡化運動機制於初始狀態推積，可以得到與使用複雜運動機制相當接近的結果。而簡化的運動機制的求解明顯較複雜機制簡易且有效率許多(在此兩範例中，求解元素間交互作用的計算約可節省 20-30%的時間)。因此，在離散元素法模擬中，在適當的應用時機裡，利用簡化的運動機制以節省運算資源，應是一個值得參考的做法。

表二、V 漏斗模擬結果分析

	正解	近似解
最後穩定狀態		
元素接觸力方向分佈		
元素接觸個數		
孔隙率		

參考文獻

[1] Kim, D. J., Guibas, L. J., and Shin, S.-Y.(1998), "Fast Collision Detection Among Multiple Moving Spheres," *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 4(3), 230-242.

- [2]陳泰安 (2001), "球形顆粒系統之碰撞分析與演算法", 博士論文, 國立中央大學土木工程學系。
- [3]Chiou, J. D. (1998), "A Distributed Simulation Environment for Multibody Physics," Ph.D. Dissertation, Department of Civil and Environmental Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Boston, U.S.A.
- [4]楊承道 (1999), "三維顆粒堆積模擬", 碩士論文, 國立成功大學土木工程學系。
- [5]Yang, C. T., and Hsieh, S. H. (2001), "A Probability-Based Discrete Element Method for Simulation of Sieve Analyses," *Proceedings of 14th KKNN Seminar on Civil Engineering*, Kyoto, Japan, 141-146.
- [6] Noor, M. A. (2000), "Three Dimensional Discrete Element Simulation of Flowable Concrete," Ph.D. Dissertation, Department of Civil Engineering, University of Tokyo, Tokyo, Japan.
- [7]劉宜曦 (2002), "自充填混凝土質流行為之離散元素法參數研究, 碩士論文, 國立臺灣大學土木工程學研究所。
- [8]楊承道, "多形離散體模擬系統架構(A Pattern-Oriented Framework for Versatile Discrete Objects Simulation)," 博士論文, 國立臺灣大學土木工程學研究所(撰寫中)。
- [9] Duckett, J., Griffin, O., Mohr, S., Norton, F., Stokes-Rees, I., Williams, K., Cagle, K., Ozu, N., Tennison, J. (2001), *Professional XML Schemas*, Published by Wrox Press Ltd, Printed in U.S.A..
- [10] Gamma, E., Helm, R., Johnson, R., Vlissides, J., *Design Patterns*, Addison-Wesley, Printed in U.S.A.
- [11] Oda, M., and Iwashita, K. (1999), *Mechanics of Granular Materials*, Published by Balkema, Printed in Netherlands.

二、計劃成果自評

2.1 軟體的開發

本研究開發出一套可以抽換運動機制的 3D 離散元素模擬軟體 Knight-Anne。這套軟體具備離散元素法完整功能，並可以處理 XML 格式的交流檔，所以本軟體也可用作其它相關研究的模擬引擎。藉由可抽換運動機制的特性，本軟體也可以用來探討不同的離散元素法運動機制的效應，以促進系統效率的提昇或驗證運動機制的適用性。

2.2 運動機制簡化應用於初始設置

離散元素法模擬的初始狀態設置會影響模擬結果的準確性，所以如何有效率的得到合理的初始狀態是一個相當重要的課題。本研究探討自充填混凝土 V 漏斗試驗模擬的初始狀態設置的經驗，可以作為其它應用初始狀態設置的參考。