



级配对颗粒材料力学特性影响的卷积神经网络分析

巨凯萱¹, 赵婷婷^{1,2*}, 刘嘉英³, 冯云田⁴, 王志华¹

1. 太原理工大学机械与运载工程学院, 太原 030024

2. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081

3. 城市基础设施智能化浙江省工程研究中心, 杭州 310015

4. Zienkiewicz Centre for Computational Engineering, Swansea University, Swansea SA18EN, UK

* E-mail: zhaotingting@tyut.edu.cn

收稿日期: 2024-07-29; 接受日期: 2024-11-08; 网络版发表日期: 2025-01-07

国家自然科学基金(批准号: 12102294)、山西省基础研究计划(编号: 20210302124158)、山西省回国留学人员科研资助(编号: 2022-067)、城市基础设施智能化浙江省工程研究中心开放基金(编号: IUI2023-YB-04)和先进材料与结构的冲击安全山西省科技创新领军人才团队(编号: 202204051002006)资助项目

摘要 级配作为颗粒材料的基本物理指标之一, 对其力学性能具有重要影响. 为快速获取不同连续级配分布颗粒集合的力学强度指标并探究级配对力学性能的影响机理, 根据连续级配方程, 建立了100组可以反映三种典型连续级配分布的级配曲线; 采用离散元方法生成与级配曲线相对应的数值试样并进行双轴压缩试验, 构建了用于深度神经网络训练的数据集; 利用贝叶斯优化方法寻找最佳的网络超参数组合, 以增强预测模型性能; 将压缩后的数值试样图像及相应的力学强度指标作为训练数据, 使用GoogLeNet卷积神经网络对不同级配分布颗粒集合的抗剪强度指标进行了预测; 通过调整输入图像信息, 研究了实体颗粒及孔隙分布、颗粒粒径尺寸、高应力颗粒及力链颗粒信息对模型预测能力的影响. 结果表明: 卷积神经网络能够有效预测颗粒材料级配特性与力学性能之间的关系, 高应力及力链颗粒信息是影响颗粒材料力学性能及神经网络模型预测能力的关键因素.

关键词 颗粒材料, 级配, 力链, 卷积神经网络, 离散元

1 引言

颗粒材料广泛存在于各类自然环境和工程领域中, 与人们的日常生活密切相关. 目前, 在地质灾害^[1]、岩土工程^[2]、化学工程^[3]、环境科学^[4]以及交通运输^[5]等诸多领域, 仍存在大量与颗粒材料相关的问题亟待解决. 作为颗粒材料最基本、最重要的物理指

标之一, 颗粒级配在很大程度上影响着颗粒材料的物理力学性质. 即使是成分相同的颗粒材料, 如果级配不同, 其强度、变形及渗透特性将会表现出较大差异^[6~8].

针对颗粒级配如何影响颗粒材料物理力学性质这一问题, 国内外学者以砂土、碎石等颗粒材料为研究对象开展了一系列研究. 在实验研究方面, 通常以颗

引用格式: 巨凯萱, 赵婷婷, 刘嘉英, 等. 级配对颗粒材料力学特性影响的卷积神经网络分析. 中国科学: 技术科学, 2025, 55: 115–132

Ju K X, Zhao T T, Liu J Y, et al. Convolution neural network analysis of the effect of gradation on the mechanical properties of granular materials (in Chinese). Sci Sin Tech, 2025, 55: 115–132, doi: [10.1360/SST-2024-0187](https://doi.org/10.1360/SST-2024-0187)

粒级配曲线的粗粒含量、细粒含量、中值粒径、不均匀系数 C_u 以及曲率系数 C_c 等特征指标作为控制变量分析其对于颗粒材料宏观力学性质的影响。Shen等人^[9]通过一维压缩试验研究了不同颗粒级配钙质砂的压缩特性,发现调整粗粒含量是降低钙质砂压缩性的有效方法; Monkul^[10]通过固结排水直剪实验研究了不同级配粉砂试样的力学响应,指出细粒含量的增加会加剧粉砂试样的体积剪缩现象; Wang等人^[11]通过三轴排水试验研究了级配对堆积土抗剪强度的影响,结果表明内摩擦角会随着中值粒径、砾石含量的增大而增大,随着不均匀系数 C_u 的增大而减小; 李声立^[12]通过室内不排水试验研究了不均匀系数 C_u 和曲率系数 C_c 对砂土静态液化行为的影响,发现当围压较小时,砂土的静态液化趋势随着 C_u 值和 C_c 值的增大而减小。受限于实验测量手段,以传统实验方法为主的研究通常只能获得颗粒材料整体的宏观力学行为,难以从颗粒尺度展开深入分析。为了全面理解颗粒材料级配特性对力学性能影响的内在机理,需要对其颗粒尺度的细观力学行为进行更加细致的研究。数值模拟技术的出现,为获取颗粒材料细观层次上的信息提供了便利,研究者通过分析颗粒之间接触关系的数量、大小及方向解释了级配特性对颗粒材料力学性能的影响机理。杨忠平等^[13]通过二维离散元数值模拟直剪试验研究发现在相同的法向应力下,级配良好的试样颗粒之间的接触更多,咬合更充分,抗剪强度更大; Cheng和Minh^[14]研究发现含有较多粗颗粒的试样接触力链分布的各向异性更强,表现出较高的抗剪强度与剪胀性; Voivret等人^[15]发现随着粒径跨度范围的增大,试样的堆积密度表现出先减小后增加的趋势,并从几何填充特性和接触力传递方式变化的角度针对这一现象给出了解释; Estrada和Oquendo^[16]通过分析接触网络的连通性研究了粒径跨度和级配曲线形状对无摩擦圆盘颗粒材料细观结构的影响。数值模拟方法相较于实验方法的突出优势在于能够方便地获取颗粒材料细观结构演化过程,但通常只能对单个变量进行统计分析,难以同时评估多个变量的综合影响。这不仅限制了对颗粒集合内部变量交互作用的全面理解,也无法定性判断各因素的相对影响权重。因此,如何处理数值模拟得到的大量数据,综合分析和评价级配变化引起的颗粒集合内部各变量的变化,并挖掘其中的关键影响因素,是揭示颗粒级配对材料力学性能影响机理的关键问题。

近年来,随着计算机算力的不断增长,大数据科学的迅速发展为力学研究提供了全新的范式,从探求因果关系变成了挖掘相关关系。神经网络技术为研究颗粒级配与材料力学响应之间复杂的非线性关系提供了新的思路。唐晓松等人^[17]建立了可对不同颗粒级配下粗颗粒土渗透系数进行预估的反向传播(BP)神经网络模型; 郑尔发^[18]采用BP神经网络、支持向量机模型(SVM)及遗传算法优化BP(GA-BP)神经网络,对不同级配下砂土的应力-应变曲线进行了预测; Wei等人^[19]则利用BP神经网络分析了施工过程中级配变异(VG)对路面力学性能的影响,建立了与路面永久变形和疲劳寿命之间的关联模型。随着研究的深入,越来越多先进的神经网络模型被运用到颗粒级配与力学性能的研究中。关少恒^[20]基于深度学习算法,提出了一种重现不同级配和初始状态颗粒材料在不同加载路径下宏观力学响应的预测模型; Sebaaly等人^[21]、Rivera-Pérez和Al-Qadi^[22]则分别通过人工神经网络(ANN)和自编码器深度神经网络(ADNN),探讨了颗粒级配与沥青混合料力学性能之间的关系,并优化了沥青混合料设计方法。可以发现,在目前的研究中,多为直接建立级配特性指标与力学特性指标之间的映射关系,未对其影响机理展开研究。颗粒集合的数值图像信息包含了颗粒级配特性对细观结构特性的综合影响,将神经网络技术与数值模拟相结合,通过引入卷积神经网络(CNN)处理和分析颗粒材料的图像数据,可以为深入理解和有效预测颗粒材料的力学行为提供新的方法。

本文基于选定的级配方程,采用离散元方法建立了不同连续级配分布条件下的颗粒材料试样; 通过双轴压缩数值模拟试验对试样的力学性能进行测试,获得不同围压加载下数值试样的应力-应变曲线及颗粒粒径和位置信息,同时计算得到颗粒试样的强度指标,根据数值试样图像信息及对应的强度指标建立数据集; 利用贝叶斯优化方法寻找最优网络超参数组合,增强模型的预测性能; 基于GoogleNet卷积神经网络对不同级配特征数值试样图像与试样内摩擦角之间的映射关系进行捕捉,建立可以预测不同连续级配分布条件下颗粒材料力学性能的神经网络模型; 通过输入不同颗粒图像信息,分别研究实体颗粒及孔隙分布、颗粒粒径尺寸、高应力颗粒及力链颗粒信息对模型预测能力的影响,以期揭示颗粒材料级配特征与力学性能的内在关联提供参考依据。

2 级配方程

颗粒材料由大小不同的颗粒组成, 颗粒的大小及组成称为颗粒级配. 颗粒材料种类繁多, 不同成分的颗粒集合在级配分布上存在一定差异. 本文依据连续级配土体的级配分布设置颗粒级配. 典型连续级配土体的级配曲线通常表现为双曲线、S曲线、近似直线3种形状^[23]. 研究者通过建立级配方程, 用数学语言定量表示级配的分布特性, 如Talbot和Richart^[24]提出的分形级配方程:

$$P = (d/d_{\max})^{3-D} \times 100\%, \quad (1)$$

其中, P 为小于某粒径的颗粒含量, d 为粒径, $d_{\max}$ 为最大粒径, D 为分形维数.

方程(1)形式简单、使用方便, 已被广泛应用于研究颗粒级配对力学性能的影响^[25,26]. 然而, 分形级配方程描述的级配曲线形态较为单一, 仅能表示双曲线形级配曲线. 在此基础上, 吴二鲁等人^[27]为定量描述级配参数与物理力学性质之间的对应关系, 提出了仅有一个参数的级配方程:

$$P = \frac{1}{(1-\beta) \times (d_{\max}/d)^{\beta} + \beta} \times 100\%, \quad (2)$$

其中 β 为级配参数. 相较于方程(1), 方程(2)可同时表示双曲线形和S曲线形两种形状的级配曲线, 但却无法对近似直线的级配曲线进行表征.

为解决这一问题, 朱俊高等人^[23]提出了双参数级配方程:

$$P = \frac{d^m}{(1-b)d_{\max}^m + bd^m} \times 100\%, \quad (3)$$

其中 b 和 m 为级配参数. 该方程对于各种连续级配土体都具有广泛的适用性.

方程(3)中, 参数 b 决定级配曲线的形态, 参数 m 则决定曲线的倾斜程度. 通过在合理取值范围($0 < m < 12$, $-4 < b < 1$)^[28]内对 m 和 b 的取值进行组合, 共获得100组连续级配曲线数据(对应100种连续级配分布条件), 均匀分布于图1阴影部分所占区域, 涵盖了三种不同形状的连续级配曲线.

采用不均匀系数 C_u 和曲率系数 C_c 对连续级配曲线数据对应样本的级配性能进行定性评估, 土工试验规程^[29]规定不均匀系数 C_u 和曲率系数 C_c 的计算公式为

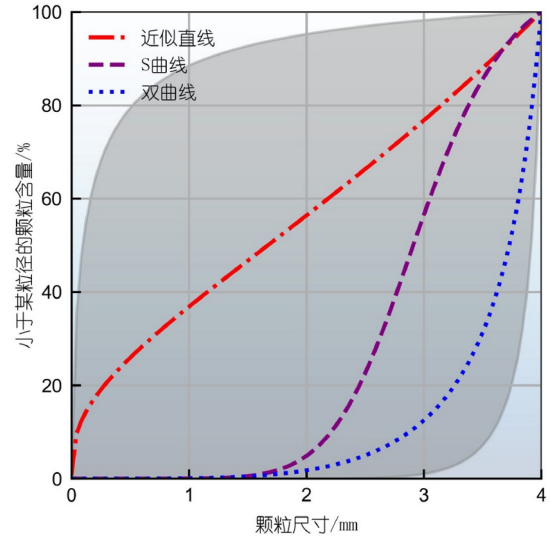


图1 (网络版彩图)级配曲线分布

Figure 1 (Color online) Gradation curve distribution.

$$C_u = \frac{D_{60}}{D_{10}}, \quad (4)$$

$$C_c = \frac{(D_{30})^2}{D_{10} \cdot D_{60}}, \quad (5)$$

其中 D_{60} 、 D_{30} 和 D_{10} 分别表示小于某粒径的颗粒含量为60%、30%和10%处所对应的颗粒粒径.

根据式(4)和(5), 可得 C_u 和 C_c 用参数 b 和 m 表示为^[6]

$$C_u = \left[\frac{6(1-0.1b)}{1-0.6b} \right]^{\frac{1}{m}}, \quad (6)$$

$$C_c = \left[\frac{3(1-0.1b)(1-0.6b)}{2(1-0.3b)^2} \right]^{\frac{1}{m}}. \quad (7)$$

通常规定 $C_u > 5$, $C_c = 1 \sim 3$ 的连续级配曲线对应样本的级配特性为良好, 通过观察图2可以发现, 在100组连续级配曲线数据中, 级配良好的数据共有31组, 约占总数据量的三分之一, 说明样本数据全面涵盖了级配良好与级配不良的情况.

3 数据准备与深度学习模型建立

3.1 数据准备

采用PFC2D离散元软件生成不同级配下的颗粒材

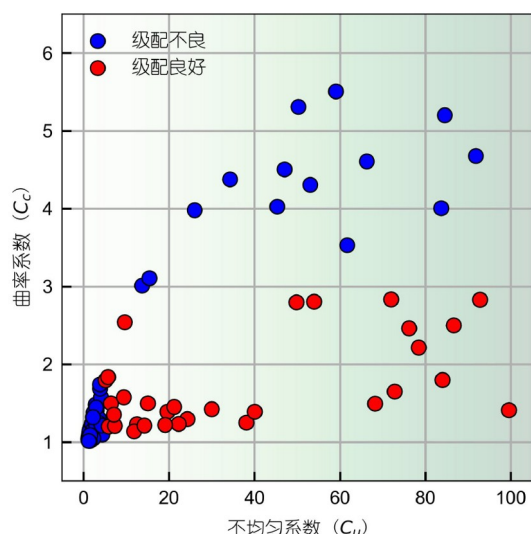


图2 样本级配特性分析

Figure 2 Analysis of sample gradation characteristics.

料数值试样, 通过双轴压缩数值模拟测试其力学性能, 模型如图3所示。

根据双轴压缩试验^[30], 模型初始比例多为1:2, 故设定试样初始尺寸为宽100 mm, 高200 mm, 颗粒形状为圆盘。考虑到模型边界影响, Jamiolkowski等人^[31]建议最大颗粒粒径不宜超过试样宽度的1/5, 本文设定颗粒的最大粒径为4 mm。为控制离散元计算规模, 设定最小粒径截距为0.5 mm, 采用等体积替换法将级配中粒径小于该值的颗粒用粒径为0.5 mm的颗粒替换。

方程(3)对于黏土、粉土、砂土和粗粒土等不同类型的颗粒材料均具有广泛的适用性^[23], 本文选取的粒径范围属于砂土范畴, 成样过程中试样各参数根据现有文献^[32]进行设定, 如表1所示。

设定各向同性固结阶段的围压值 σ_c 分别为600, 800和1000 kPa, 并将双轴压缩阶段的目标设定为轴向应变达到15%, 以此作为结束压缩的标准。通过双轴压缩数值模拟, 获得不同围压条件下数值试样的应力-应变曲线数据以及不同应变状态下的颗粒粒径和位置信息。由于不同级配分布颗粒集合压缩结束时试样尺寸存在差异, 为确保颗粒信息的完整性和图像尺寸的一致性, 将图像数据显示范围设置为240 mm×200 mm, 输出图像尺寸设为256 mm×256 mm, 空余部分采用白色填充, 图像格式转换为RGB格式, 压缩到不同应变时的颗粒集合图像如图4所示。

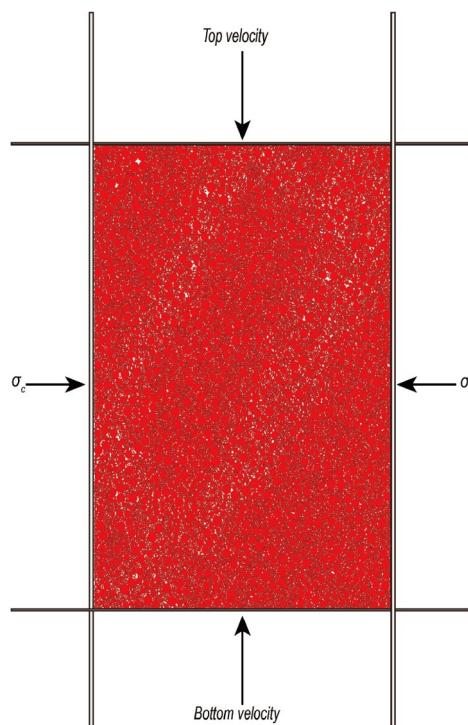


图3 双轴压缩数值模拟

Figure 3 Biaxial compression numerical simulation.

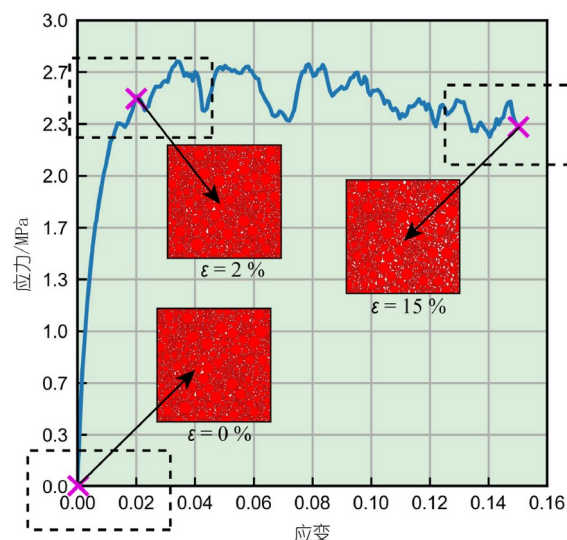


图4 不同应变时的颗粒集合图像

Figure 4 Particle assembly images at different strains.

压缩结束时的图像包含了整个压缩过程的累计应力与应变信息, 能够充分反映颗粒材料在极限状态下

表 1 数值模拟细观参数

Table 1 Microscopic parameters of numerical simulation

对象	参数	数值
模型	初始宽度/(mm)	100
	初始高度/(mm)	200
	初始孔隙率	0.2
颗粒	密度/(kg m ⁻³)	2600
	颗粒间摩擦系数	0.5
	颗粒法向接触刚度/(N m ⁻¹)	1.5×10 ⁸
	颗粒切向接触刚度/(N m ⁻¹)	1.0×10 ⁸
墙体	墙体摩擦系数	0
	墙体法向接触刚度/(N m ⁻¹)	1.5×10 ⁸
	墙体切向接触刚度/(N m ⁻¹)	1.0×10 ⁸

的行为, 故选用压缩结束时的数值试样图像作为输入数据. 考虑到数据集的规模和微小颗粒特征的复杂性, 选择合适的图像分辨率显得尤为重要. 在数据集较小的情况下, 过高的分辨率可能会增加模型的计算成本和训练时间, 并导致不必要的计算负担和过拟合风险; 而过低的分辨率则可能丢失关键细节信息, 使模型无法准确捕捉微小颗粒的特征. 因此, 将输入图像的长宽调整为1024像素, 并将颜色通道数设定为3, 以确保神经网络能够充分捕捉图像细节, 同时在计算效率与图像质量之间取得平衡, 保证训练过程中图像具有足够的清晰度和特征辨识度.

对像素值进行最值归一化处理, 最值归一化的公式如下:

$$x_{\text{scale}} = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}, \quad (8)$$

其中, x_{scale} 为归一化后的图像像素值, x 为归一化前的图像像素值, $x_{\min}$ 与 $x_{\max}$ 选用整个数据集最小像素值与最大像素值. 由于Python语言以像素值范围(0~255)读取数据集的RGB格式图片, 故本文中 $x_{\min}=0$, $x_{\max}=255$.

内摩擦角 ϕ 是表征无黏性颗粒材料抗剪强度的重要参数. 根据莫尔-库仑破坏准则^[33], 利用围压值 σ_{3f} 与峰值应力 σ_{1f} , 以法向应力 σ 为横坐标、剪应力 τ 为纵坐标, 在横坐标轴上以 $(\sigma_{1f} + \sigma_{3f})/2$ 为圆心、 $(\sigma_{1f} - \sigma_{3f})/2$ 为半径绘制不同围压下的应力圆, 计算得到数值试样在不同大小主应力达到极限状态所得应力圆的包络线, 该直线的倾角即为内摩擦角, 如图5所示.

3.2 深度学习模型建立

卷积神经网络是深度学习的代表算法之一^[34], 其基本组成如图6所示.

与其他神经网络类似, 卷积神经网络也是由具有权重、偏置等参数的人工神经元构成, 其网络结构主要包括输入层、卷积层、池化层、全连接层和输出层等. 图像从输入层进入网络, 由卷积层对输入层接收的图像数据进行特征提取. 池化层又称为下采样层, 位置一般处于卷积层的下一层, 其功能是对卷积层采集到的特征信息进行选择与过滤. 通常情况下, 卷积神经网络通过层层叠加的卷积层和池化层, 逐步提取图像的特征信息, 最终有效地捕捉整个图像表达的特征.

随着算法的不断发展, 研究人员提出了AlexNet^[35], GoogLeNet^[36], VGGNet^[37]和ResNet^[38]等多种卷积神经网络模型框架. 其中GoogLeNet卷积神经网络是谷歌团队为解决小数据集训练中产生的过拟合问题和神经网络变宽变深后的参数规模过大问题而提出的, 通过在主体神经网络中加入子网络的方式来增加网络的深度, 从而更好地捕捉图像中的复杂特征. 与AlexNet, VGGNet和ResNet相比, 其独特的Inception模块设计能够在单一层次中实现多尺度的卷积操作, 并针对不同尺度的特征进行优化. 这种设计不仅显著减

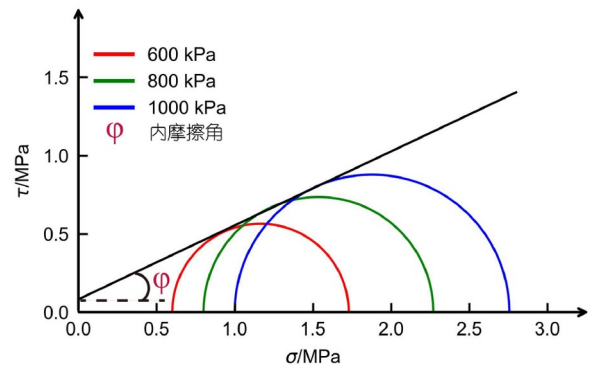


图 5 应力圆及强度包络线图

Figure 5 Mohr's circles and strength envelope.

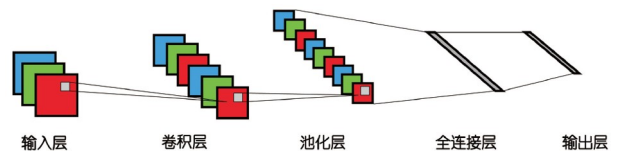


图 6 卷积神经网络结构

Figure 6 Convolutional neural network structure.

少了模型的参数规模, 还保留了高效的特征提取能力, 工作原理如图7所示。

由于GoogLeNet卷积神经网络具有独特的多尺度特征提取能力, 本文采用GoogLeNet卷积神经网络对颗粒材料图像进行特征提取分析。通过其多尺度卷积操作, 模型可以有效捕捉颗粒集合的宏观和细观特征, 并将不同尺度下提取到的信息融合, 最后通过全连接层, 建立起级配特性指标与力学特性指标之间的映射关系。

3.3 贝叶斯优化算法

深度神经网络的性能很大程度上取决于超参数的选择。由于GoogLeNet卷积神经网络具有独特的Inception模块, 导致其包含多个并行的卷积层和池化层, 这些层往往需要通过大量超参数, 如过滤器数量、池化窗口大小、步长、激活函数等进行精细调控, 以获得最优网络性能。为实现高效的网络训练与精确的模型预测, 识别并确定最佳的超参数组合显得尤为重要。贝叶斯优化算法为寻找最佳超参数配置提供了一种高效的策略, 通过构建超参数与模型性能之间的代理函

数, 智能引导超参数搜索过程, 从而有效缩减搜索空间并加速最佳超参数组合的确定。

贝叶斯优化算法通过使用不同的超参数组合训练模型, 并在相同训练轮次下基于验证集的性能指标(如均方误差(MSE)或曲线下面积(AUC))进行评估, 进而构建超参数组合与评估指标之间的函数关系, 形成代理函数。随后, 算法不断更新代理函数, 逐步逼近真实的目标函数(即验证集评估指标在超参数空间中的真实分布), 以此引导超参数搜索过程, 最终确定使目标函数达到最优(最小或最大值)的最佳超参数组合。由于均方误差MSE具备良好的数学属性——连续性和可微性, 在优化过程中, 可以提供一个平滑且连续的误差曲面, 有助于实现更高效和稳定的超参数搜索和优化过程, 因此本文选取MSE作为目标函数, 其计算公式如下:

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}, \quad (9)$$

其中, n 为样本个数, y_i 为第 i 个样本所对应的真实值, $\hat{y}_i$ 为第 i 个样本所对应的预测值。

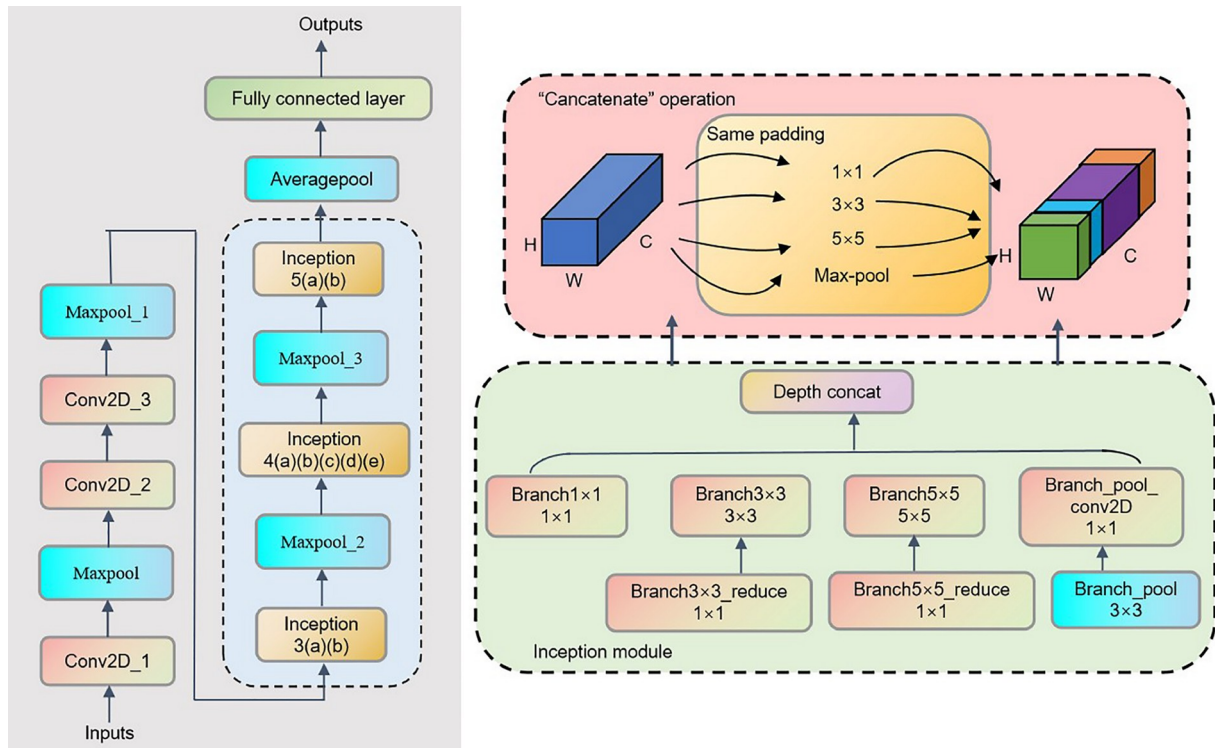


图7 GoogLeNet工作原理示意图

Figure 7 Schematic diagram of GoogLeNet working principle.

在每次迭代时, 贝叶斯优化算法都会利用之前观察到的历史信息(先验知识), 对合理范围内的超参数配置进行评估, 优先在预测结果较好的超参数组合附近寻找最优解, 有效地缩小了潜在的超参数空间, 提高了寻找最佳超参数配置的效率.

贝叶斯优化算法的核心在于代理函数和采集函数的构建. 在使用贝叶斯优化算法寻找最佳超参数配置的过程中, 通常需要寻找目标函数 $c(x)$ 的最小值, 但由于目标函数在超参数空间中的形状与表达式是未知的, 因此往往需要通过构建代理函数来代替目标函数, 如图8(a)所示. 高斯过程不仅能准确预测目标函数值, 还能有效评估预测的不确定性, 在处理复杂数据和进行非线性回归分析方面表现卓越, 因此本文选用高斯过程作为代理函数. 当获取当前代理函数形状后, 如何选择下一个 x , 使代理函数尽可能向目标函数靠近, 便是采集函数 $a(x)$ 的任务. 期望改进(EI)能够在未知区域探索新可能性和已知最佳区域进行优化之间实现有效平衡, 成为理想的采集函数. 优化过程中, EI结合预测均值和预测不确定性, 量化某一点处改进当前最优值的期望, 从而在全局搜索空间中更高效地找到最优解, 如图8(b)所示.

贝叶斯优化的具体步骤包括:

- (1) 初始化代理函数的先验分布;
- (2) 选择数据点 x , 使得采集函数 $a(x)$ 取最大值;
- (3) 评估数据点 x 并获取其结果 y ;
- (4) 使用新数据 (x, y) 更新代理函数, 得到后验分布(作为下一步的先验分布);
- (5) 重复(2)~(4)步, 直到达到最大迭代次数.

选取代理函数取最小值时对应的超参数组合作为最佳超参数组合.

3.4 K折交叉验证

随着级配曲线形状从双曲线形逐渐过渡到S曲线形, 再到直线形, 大粒径颗粒的占比逐渐减小, 而小粒径颗粒的占比相应增加. 在试样尺寸相同的情况下, 颗粒总数量显著增加, 导致数据收集更加困难. 在数据规模有限的情况下, 如何充分利用现有数据并准确评估模型性能变得尤为关键. K折交叉验证(K-fold cross-validation)为这一问题提供了有效的解决方案.

K折交叉验证将原始数据集划分为 K 个互不重叠

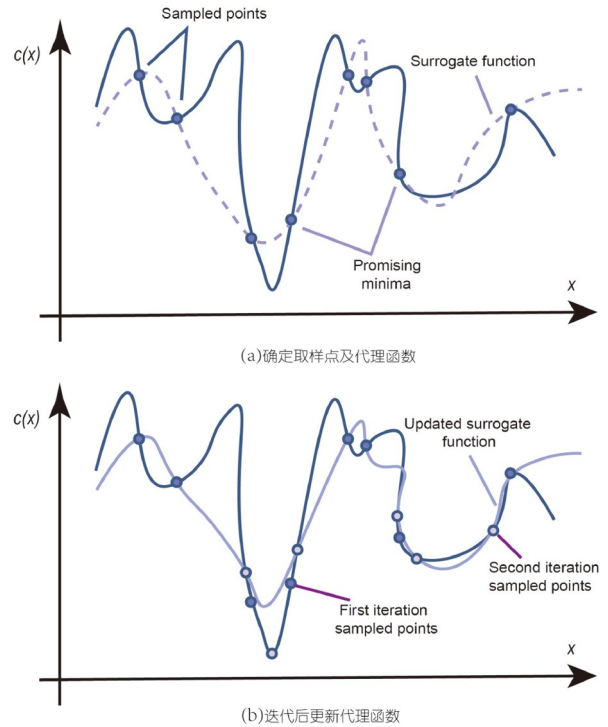


图 8 (网络版彩图) 贝叶斯优化的具体实现
Figure 8 (Color online) Implementation of Bayesian optimization.

的子集, 每次选取 $K-1$ 个子集进行模型训练, 剩下的一个子集用于验证模型. 通过多次重复这一过程, 交替使用不同的子集作为验证集, K折交叉验证能够充分利用每一个数据点, 确保所有数据都参与训练和验证, 从而最大化数据的利用率, 有效提高模型评估结果的可靠性和准确性, 如图9所示.

将计算得到的围压值 σ_c 为600 kPa时的100组数据进行随机划分, 其中90%(90组数据)被选定为训练集与验证集, 用于模型的训练与参数优化, 测试集则占有数据的10%(10组数据), 用于对模型的预测能力进行评估. 通常情况下, K折交叉验证常用的折数为5折或10折. 为在模型训练时提供足够的数据量进行学习, 同时确保验证过程能获得稳定且可靠的评估结果, 本研究选择采用10折交叉验证, 通过对不同子集的评估指标求均值, 来综合评估模型的整体性能.

3.5 模型训练

为综合评估模型的性能, 采用平均绝对误差(MAE)作为评价指标, 将“GoogLeNet”的损失函数改

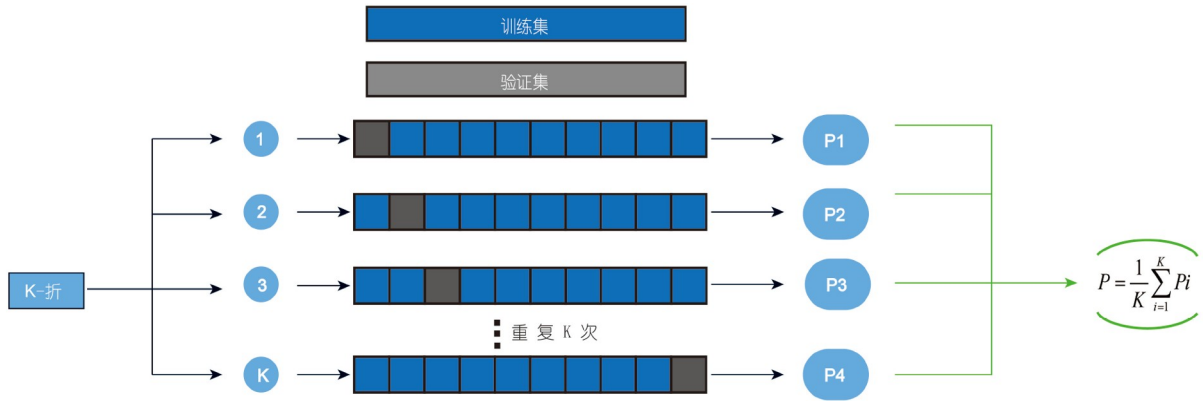


图 9 K折交叉验证示意图

Figure 9 Schematic diagram of K-fold cross-validation.

为自定义的均方根误差损失函数(RMSE). 相较于 MSE, RMSE直接提供与目标变量同量纲的误差评估, 使得模型的性能评价更加直接和易于理解, 有利于提高模型在训练过程中的稳定性和最终预测时的可靠性, 具体表达式如下:

$$MAE = \frac{\left| \sum_{i=1}^n y_i - \hat{y}_i \right|}{n}, \quad (10)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}}. \quad (11)$$

训练模型时, 将不同级配分布下的试样图像作为输入数据, 通过计算并最小化内摩擦角预测值与真实值之间的“距离”对神经网络的权重和偏置等参数进行迭代优化. 为了优化训练效率, 在神经网络中引入学习率衰减机制, 并将模型的初始学习率设定为 1×10^{-4} . 总训练轮次(epoch)设为100轮, 如果连续三个训练轮次观察到准确率没有提升, 学习率将自动调整为其原始值的一半, 以此促进模型更有效率地收敛.

GoogLeNet本身参数量巨大, 这使得它在处理小规模数据集时存在过拟合风险. 为降低这一风险, 模型采用了L2正则化与Dropout正则化两种正则化方法. L2正则化通过对权重的平方进行惩罚, 有效限制了模型复杂度; Dropout正则化则通过在训练过程中随机丢弃部分神经元, 增强了模型的泛化能力. 这些策略在不牺牲模型性能的前提下, 提升了GoogLeNet对小数据集的适应性.

当验证集损失值降到最小时, 载入对应的权重参

数到神经网络, 可以快速预测得到测试集样本对应的内摩擦角.

4 预测结果与影响机理分析

4.1 颗粒集合实体颗粒及孔隙分布的影响

颗粒级配对模型试样最直接的影响在于改变了实体颗粒及孔隙的分布. 传统离散元方法通过对颗粒及孔隙位置、孔隙大小和孔隙形状进行统计分析, 研究颗粒级配如何通过影响材料的细观结构, 进而影响其宏观力学行为. 这些独立的分析步骤通常复杂且耗时. 颗粒集合数值图像的应用能够同时考虑这些因素, 从而简化分析过程. 为研究实体颗粒及孔隙的分布特征对试样力学性质的影响, 采用相同颜色的圆盘来表示实体颗粒, 并使用黑色轮廓线对颗粒边界进行标识, 同时将背景色设置为白色, 以便神经网络可以清晰识别到实体颗粒和颗粒孔隙的相关信息, 经过处理的试样图像如图10所示.

通过贝叶斯优化确定了GoogLeNet卷积神经网络的最佳超参数配置, 并在此基础上训练神经网络模型. 采用决定系数(R^2)作为衡量模型预测精度的指标, 其计算公式如式(12)所示:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2}, \quad (12)$$

其中, n 为数据集的样本数, y_i 为数据集样本内摩擦角真实值, $\hat{y}$ 为样本内摩擦角预测值, $\bar{y}$ 为样本内摩擦角

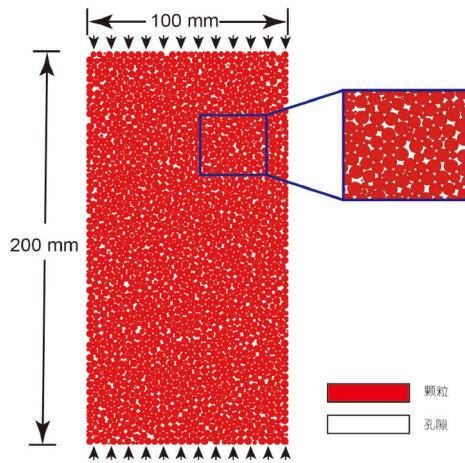


图 10 实体颗粒及孔隙分布
Figure 10 Solid particles and pore distribution.

真实值的平均值。

训练过程中的K折验证结果如图11所示。

为更精确地量化预测的准确性, 利用测试集数据对模型的预测能力进行评估, 以内摩擦角真实值为横坐标、预测值为纵坐标绘制散点图, 结果如图12所示。经计算得到决定系数值为0.4082(R^2 值越接近1, 表示模型的预测能力越强)。图11和12的结果表明, 当使用仅反映实体颗粒与孔隙分布的图像数据作为输入, 并且数据规模为100组时, 无法构建一个精确的力学性能预测模型。尽管GoogLeNet在训练过程中尝试捕捉颗粒级配与力学性能之间的映射关系, 但由于试样中颗粒粒径变化范围较小且分布密集, GoogLeNet难以识别颗粒在粒径上的细微差异, 仅能捕捉到不同形状级配曲线对应试样之间的宏观差异, 无法有效识别具有相似形状级配曲线试样粒径分布的细微改变, 这使得深度神经网络能够获取的信息非常有限。在训练过程中, GoogLeNet尝试通过颜色对比捕捉孔隙与实体颗粒整体的分布特征, 同时利用轮廓线明确各颗粒的位置变化, 从而建立起颗粒级配与力学性能之间的联系。虽然这些特征提供了一定的空间结构信息, 但不足以揭示颗粒级配的整体特征, 导致模型预测精度较差。这一结果证明孔隙与实体颗粒的分布特征变化不是决定颗粒级配对力学性能影响的关键因素。

4.2 颗粒集合粒径尺寸的影响

为使GoogLeNet能够精确捕获颗粒的粒径变化信

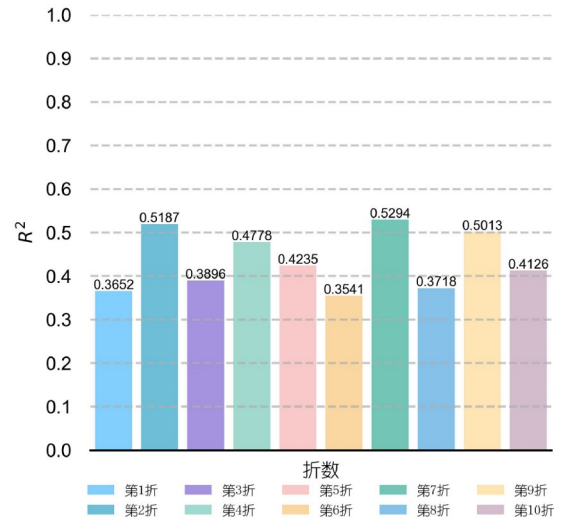


图 11 “实体颗粒及孔隙分布”K折交叉验证结果
Figure 11 K-fold cross-validation results for “solid particles and pore distribution”.

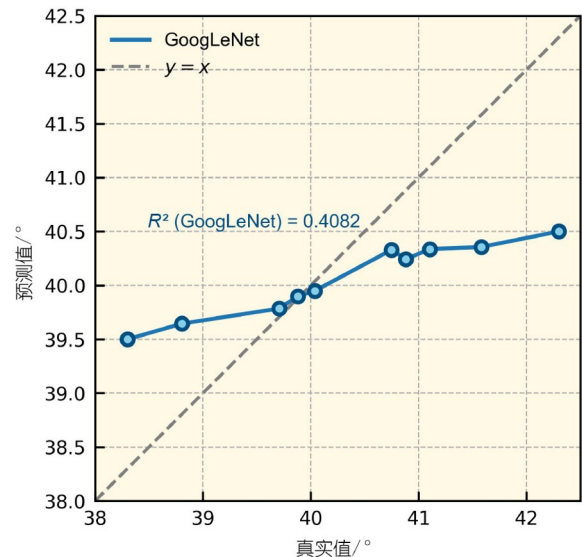


图 12 “实体颗粒及孔隙分布信息”回归分析
Figure 12 Regression analysis of “solid particles and pore distribution information”.

息, 对试样图像进行“颜色编码”处理。采用最值归一化方法对粒径值进行归一化, 将颗粒的相对尺寸以0到1之间的数值进行准确映射; 根据归一化后的粒径值, 通过自定义的颜色映射, 为每个颗粒赋予不同的颜色。相较于使用相同颜色显示的颗粒图像, “颜色编码”图像在保留原有空间结构信息的基础上, 通过颜色变化直观地表现出粒径变化信息, 从而提高神经网络对粒

径细微差异的识别效率。图13展示了经过“颜色编码”处理的试样图像。

利用“颜色编码”处理试样图像对GoogLeNet卷积神经网络进行超参数优化并训练, K折验证的具体结果如图14所示。

为进一步验证GoogLeNet作为基准模型的有效性, 使用贝叶斯优化算法为AlexNet确定最佳超参数组合, 并同样基于“颜色编码”处理试样图像进行训练。在此基础上, 围绕计算效率、预测精度和鲁棒性, 对GoogLeNet与AlexNet进行详细对比分析, 结果如下。

(1) 计算效率对比

参数规模是影响神经网络模型计算效率的重要因素。较大的参数规模通常会显著增加计算资源需求, 延长训练时间, 并对硬件资源提出更高要求。表2对GoogLeNet和AlexNet的参数规模进行了对比, 结果显示, GoogLeNet的参数规模仅为AlexNet的二十分之一。这说明采用GoogLeNet作为基准模型, 可以显著提高计算效率, 减少训练时间, 并降低对硬件资源的需求, 更适合在资源有限或需要高效计算的环境中应用。

(2) 预测精度对比

为了评估GoogLeNet和AlexNet在预测精度方面的差异, 采用相同的测试集数据对两种模型进行了预测性能评估, 结果如图15所示。

观察发现, 采用“颜色编码”处理试样图像训练的GoogLeNet的预测能力有了大幅提高, 经过计算得到决定系数值为0.8019, 与AlexNet相比, GoogLeNet在测试集上的预测更为准确, 在捕捉数据特征并进行预测时具有更高的拟合精度和更强的解释能力, 能够更好地反映输入与输出之间的关系。

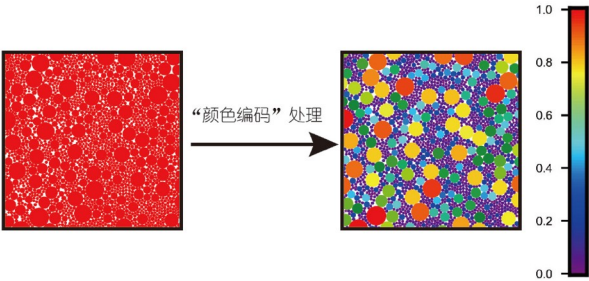


图 13 “颜色编码”处理
Figure 13 Color encoding processing.

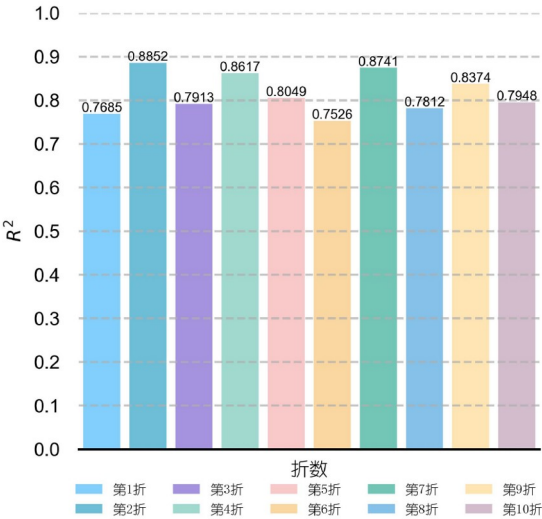


图 14 “颜色编码”处理试样的K折交叉验证结果
Figure 14 K-fold cross-validation results for “color encoding” processed samples.

表 2 参数规模对比分析

Table 2 Comparative analysis of parameter scale		
模型名称	层名称	参数数量
AlexNet	Conv1	23296
	Conv2	307392
	Conv3	663936
	Conv4	884992
	Conv5	590080
	FC1	100781568
	FC2	16781312
	Output layer	4097
总参数数量		120036673
模型名称	层名称	参数数量
GoogLeNet	Conv2D_1	2432
	Conv2D_2	2112
	Conv2D_3	110784
	Inception3a	163728
	Inception3b	388768
	Inception4a	375952
	Inception4b	449608
	Inception4c	510004
	Inception4d	605232
	Inception4e	870208
	Inception5a	1044512
	Inception5b	1445344
	Dense	1025
总参数数量		5969709

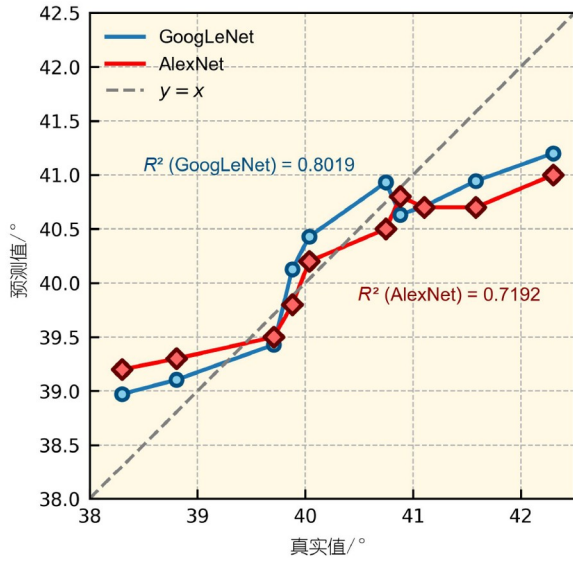


图 15 (网络版彩图) 预测精度对比
Figure 15 (Color online) Comparison of prediction accuracy.

(3) 鲁棒性对比

鲁棒性是指模型在面对输入数据中的噪声、异常或变化时, 仍能保持稳定性能和较高准确性的能力. 为衡量 AlexNet 与 GoogLeNet 在鲁棒性方面的差异, 对测试集进行了数据增强处理, 通过对比两者在干扰条件下的准确率变化, 来评估它们在应对数据扰动时的适应能力.

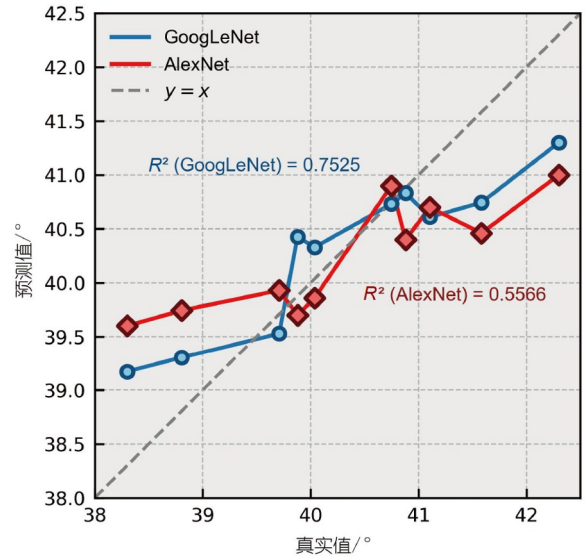
由于颗粒的大小与空间分布对其力学性能具有重要影响, 因此在对测试集图像进行数据增强时, 仅采用旋转和平移等适宜的增强方式, 以保留颗粒图像中的关键物理特征. 通过将测试集图像在 $\pm 15^\circ$ 范围内随机旋转以及在水平和垂直方向上分别进行不超过 50 像素的随机平移, 构建了旋转增强集与平移增强集. 利用训练好的模型, 对增强测试集样本的内摩擦角进行预测, 预测结果如图 16 所示.

通过计算两者的鲁棒性系数进行对比分析, 鲁棒性系数计算公式为

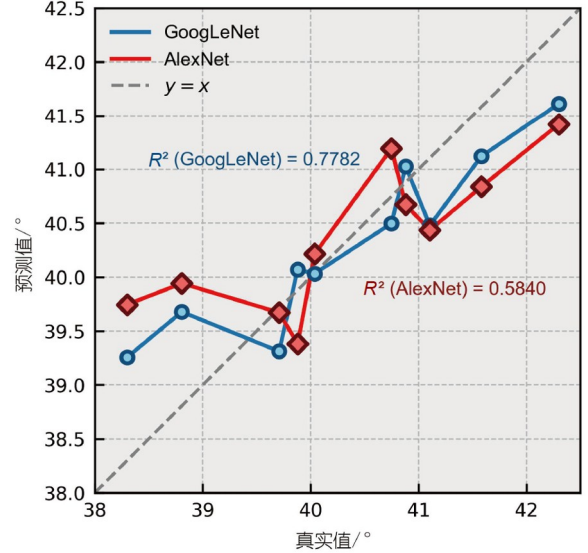
$$\text{鲁棒性系数} = 1 - \frac{|R_{\text{正常}}^2 - R_{\text{扰动}}^2|}{|R_{\text{正常}}^2|}, \quad (13)$$

其中, $R_{\text{正常}}^2$ 表示模型在原始测试集上的 R^2 值, $R_{\text{扰动}}^2$ 表示模型在增强后测试集上的 R^2 值.

计算得出 AlexNet 与 GoogLeNet 的平均鲁棒系数分别为 0.7935 与 0.935, 这表明, 在相同扰动条件下,



(a) 平移增强测试集预测结果



(b) 旋转增强测试集预测结果

图 16 (网络版彩图) 鲁棒性对比
Figure 16 (Color online) Comparison of robustness.

GoogLeNet 的鲁棒性显著高于 AlexNet, GoogLeNet 在应对数据扰动时能够更有效地保持预测性能的稳定性, 展现出更强的适应能力和抗干扰能力, 在实际应用中具有更高的可靠性和稳定性.

GoogLeNet 预测精度的提升表明通过图像识别, 神经网络能够有效获取不同级配分布条件下试样中颗粒的粒径信息与空间分布特征, 进而捕捉到颗粒级配与力学特性指标之间的非线性映射关系. 这一结果同时证明, 相比孔隙与实体颗粒的分布特征, 颗粒集合

的粒径尺寸能够更加有效反映出其级配特性的变化情况. 颗粒粒径发生变化时, 相邻颗粒的接触关系会随之改变, 进而影响内部结构, 并最终决定材料的力学性能. 当内摩擦角较大或较小时, 模型预测精度有所下降, 这是由于训练集数据量较小, 尽管模型在训练过程中能够学习到内摩擦角随颗粒级配的变化趋势, 但对于极端值的预测, 仍然表现出一定的局限性.

4.3 颗粒集合高应力颗粒的影响

高应力颗粒往往位于力链网络中的关键位置, 当颗粒集合承受外部载荷作用时, 相较于一般颗粒, 高应力颗粒承担着更大的应力. 通常规定大主应力(压为正, 拉为负)在绝对量值上大于平均值的颗粒为高应力颗粒^[39], 如式(14)所示, 颗粒主应力及主方向的计算公式参考式(15)和(16):

$$\sigma_1^j > \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\sigma_i^j|, \quad (14)$$

$$\sigma_1 = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{33}}{2} + \sqrt{\left(\frac{\sigma_{11} - \sigma_{33}}{2}\right)^2 + (\sigma_{13})^2}, \quad (15)$$

$$\tan(2\theta) = \frac{2\sigma_{13}}{\sigma_{11} - \sigma_{33}}, \quad (16)$$

其中, N 为颗粒集合的颗粒数, σ_{ij} 为颗粒不同方向的应力, θ 为 σ_1 的方向.

为进一步探究颗粒级配变化对力学性能影响的作用机理, 对“颜色编码”处理试样图像中的颗粒进行筛选, 仅保留高应力颗粒, 如图17所示.

改变训练过程中的输入图像, 研究高应力颗粒对模型预测能力的影响. 图18展示了K折验证结果, 进一步证明了该超参数配置下模型的稳定性和出色的泛化能力. 观察图19, 可以发现, 尽管在训练过程中, 模型只能学习到高应力颗粒的级配信息, 但其预测精度却进一步提高. 模型在测试集上的决定系数 R^2 为0.9632, 这表明, 相较于整体颗粒粒径信息, 高应力颗粒的粒径分布能够提供更为关键的级配特征供神经网络进行学习, 这使得神经网络能够更快、更准确地捕捉到颗粒级配与内摩擦角之间的复杂关系. 此外, 通过分析, 发现模型在预测极端值时的精度也有了显著提升. 正如Liu等人^[40]在研究中指出的, 在高维特征空间中, 高度相关的冗余特征可能对机器学习模型的预测性能和可解释性产生负面影响. 尽管训练网络的数据集仅包含

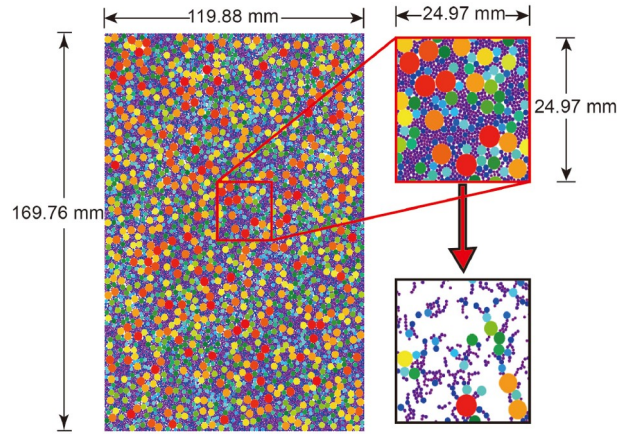


图 17 高应力颗粒筛选

Figure 17 High-stress particle selection.

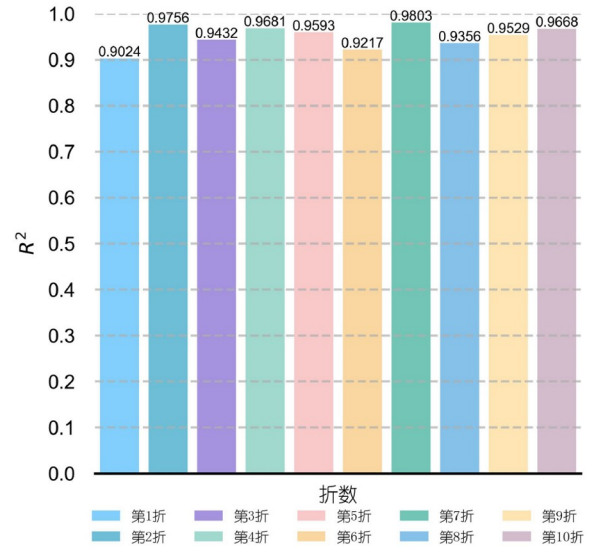


图 18 “高应力颗粒”的K折交叉验证结果

Figure 18 K-fold cross-validation results for “high-stress particles”.

80组数据, 但通过剔除冗余特征并优化特征与样本数量的比例, 实现了有效的数据量管理, 使模型能够更充分地提取和利用图像数据中的关键特征, 从而显著提升了模型的预测性能. 同时也证明, 颗粒级配发生改变时, 主要通过改变高应力颗粒的粒径分布特征进一步影响颗粒集合的力学性能.

4.4 颗粒集合力链颗粒的影响

颗粒材料受到外载作用时, 力经由颗粒间接触从一个颗粒传递至另一个颗粒, 这一传力特征在可视化

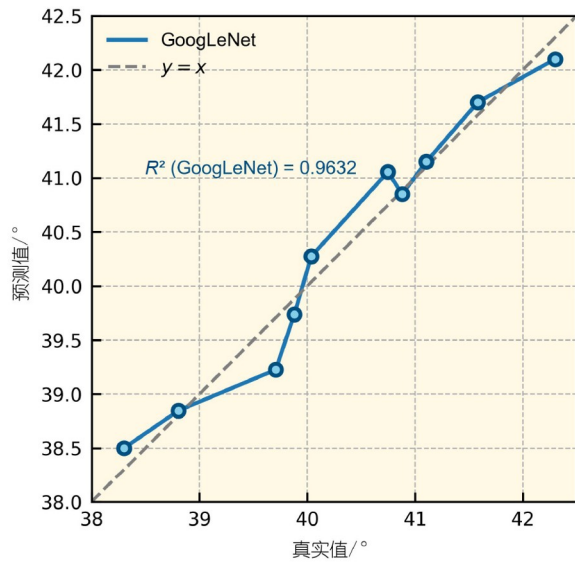


图 19 “高应力颗粒信息”的回归分析

Figure 19 Regression analysis of “high-stress particle information”.

后表现为链状结构, 直观地称为力链. 力链分叉、合并、交叉形成复杂的接触力网, 主导颗粒材料的力学性质^[41]. 文献[39]定义了构成力链所需具备的3个必要条件.

(1) 组成力链的颗粒为高应力颗粒.

(2) 相互接触颗粒的中心连线与大主应力方向之间的夹角小于 α (取 45°), 如式(17)所示:

$$\cos\alpha < \frac{l\sigma_1^{\text{next}}}{|l||\sigma_1^{\text{next}}|} \leq 1, \quad (17)$$

其中, l 为连接颗粒 P_i 与 P_j 的枝向量, σ_1^{next} 为邻接颗粒的大主应力.

判断任意两个颗粒 P_i 和 P_j 是否在同一力链的前提是, 以 P_i 为基准颗粒, P_j 为满足式(17)的有效邻接颗粒; 同时, 以 P_j 为基准颗粒, P_i 亦为满足式(17)的有效邻接颗粒;

(3) 每条力链由3个及3个以上的颗粒组成.

在高应力颗粒图像的基础上, 根据条件(2)和(3)对力链颗粒进行筛选, 即可获得力链图像, 如图20所示. 对筛选前后图像进行对比, 可以发现粒径较大的高应力颗粒往往都是力链颗粒. 这是因为大粒径颗粒与其他颗粒之间的接触更多, 咬合更充分, 它们构成了颗粒材料的基本“骨架”. 当外界载荷作用于颗粒材料时,

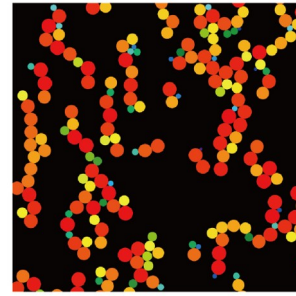


图 20 力链颗粒筛选

Figure 20 Force chain particle selection.

它们承受了更多的应力, 在维持颗粒集合整体稳定性方面起到了关键作用.

采用力链图像寻找最佳超参数配置并对GoogLeNet进行训练, 将供神经网络学习的关键特征进一步细化, 让模型在训练过程中, 通过学习力链颗粒的级配特征, 对颗粒级配与力学性能之间的联系进行捕捉. 图21中K折验证结果展示了模型在不同数据划分下的性能表现. 尽管随着关键特征的进一步提取, GoogLeNet能够获取的颗粒粒径信息总量减少, 但特征总量与样本数量的比例得到进一步优化, 从而实现了有效的数据量管理, 这使得模型在训练过程中能够依据力链颗粒粒径信息, 成功捕捉到颗粒级配与力学特性之间的映射关系. 用训练好的模型对测试集样本内摩擦角进行预测, 结果如图22所示, 模型在测试集上的决定系数 R^2 为0.9612, 预测精度并没有随着颗粒粒径信息量的减少而显著降低. 造成这一结果的原因是当颗粒材料承受外部载荷作用时, 主要由力链负责在颗粒材料内部传递和分散载荷, 力链反映了高应力颗粒之间的相互作用和连接方式. 颗粒级配发生变化时, 相较于一般颗粒, 力链颗粒的变化情况能够更充分地反映颗粒集合的级配特性变化, 对颗粒材料在受力时的反应和行为具有更加显著的主导作用.

图23直观展示了训练过程中训练集MAE和RMSE的10折均值变化趋势. 不同图像信息用于模型训练时, 收敛速度和最终收敛值存在显著差异.

综合分析图23和24发现, 相比于实体颗粒与孔隙分布的信息, “颜色编码”处理试样图像能够显著降低收敛阈值, 提升预测性能. 借助该种图像信息, 神经网络可以更精准地捕捉颗粒级配与力学特性指标之间的非线性映射关系, 对工程实践具有重要意义. 特别是在

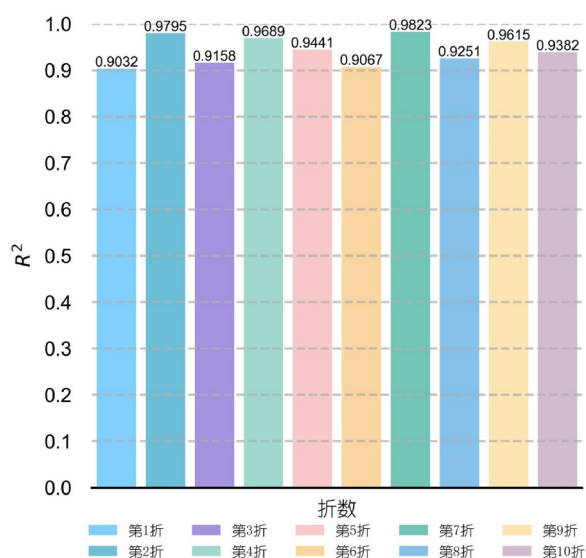


图 21 “力链颗粒”的K折交叉验证结果

Figure 21 K-fold cross-validation results for “force chain particles”.

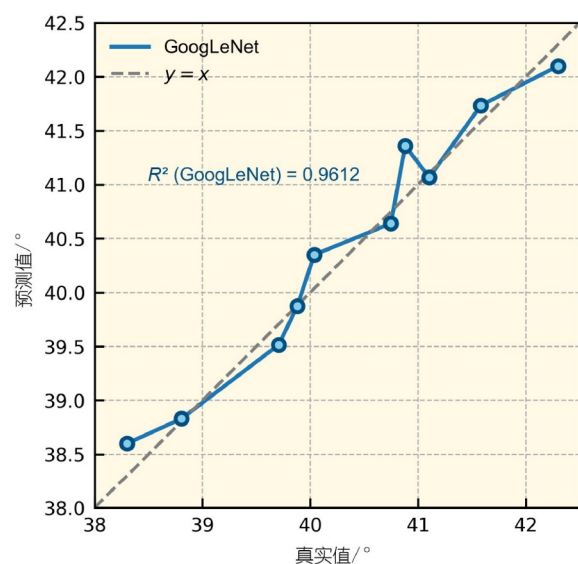
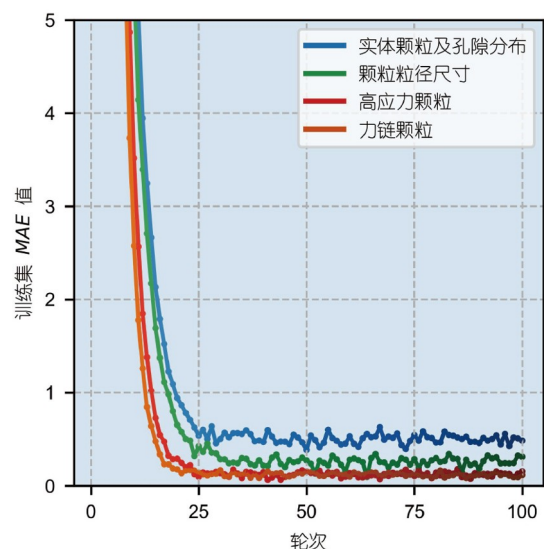


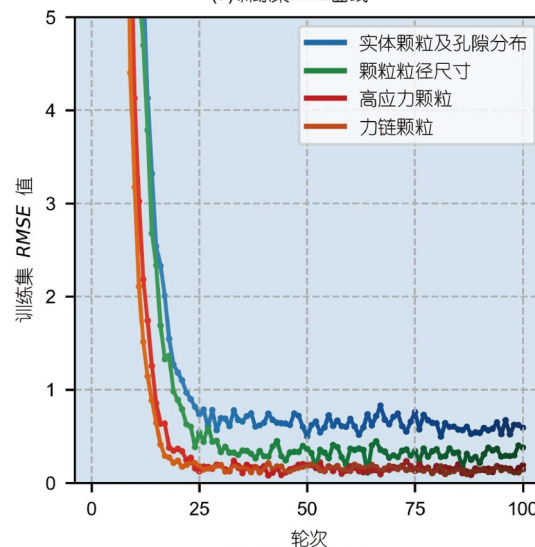
图 22 “力链颗粒信息”的回归分析

Figure 22 Regression analysis of “force chain particle information”.

获取样本成本高或困难的环境下, 它提供了一种经济且高效的解决方案. 通过特征提取, 颗粒数量显著减少, 但GoogLeNet通过分析高应力颗粒和力链颗粒的粒径信息, 高效且准确地建立了颗粒集合的级配特征与其力学性能之间的联系, 这一结果进一步验证了高应力颗粒和力链颗粒的粒径信息能够更精确地描述颗



(a)训练集MAE曲线



(b)训练集RMSE曲线

图 23 训练集MAE曲线及RMSE曲线对比

Figure 23 Comparison of MAE and RMSE curves for the training set.

粒集合的级配特征变化信息.

5 结论与展望

本文以具有复杂离散特性的颗粒材料为研究对象, 基于细观模型图像信息, 采用GoogLeNet卷积神经网络对不同连续级配分布下的颗粒材料模型试样进行了抗剪强度指标预测分析. 通过输入不同的图像信息, 分别研究了实体颗粒及孔隙分布、颗粒粒径尺寸、高应力颗粒及力链颗粒信息对神经网络预测能力的影

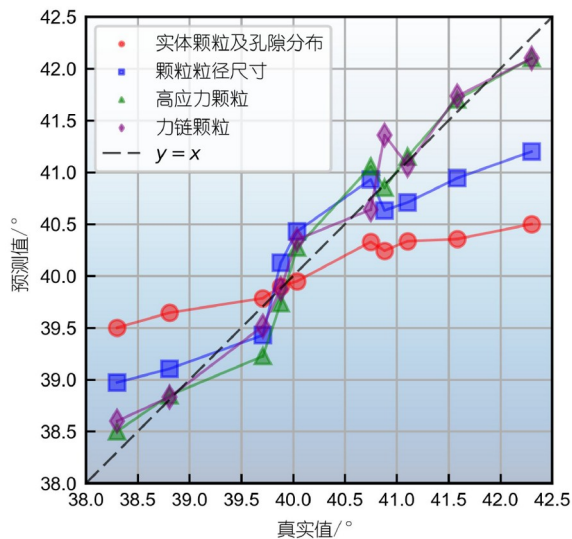


图 24 不同信息预测效果对比

Figure 24 Comparison of prediction performance with different information.

响. 在此基础上探究了级配特性对颗粒材料力学性能的影响机理, 研究结果表明:

(1) 实体颗粒及孔隙分布信息不能完全反映颗粒级配分布对其力学性能的影响, 在小规模数据训练模型的情况下, 无法得到准确的预测模型.

(2) 经过“颜色编码”模型图像训练后的神经网络模型预测效率有了大幅度的提高, 说明卷积神经网络可以通过捕捉颗粒粒径和空间分布变化得到颗粒级配与力学性能之间的内在联系, 其中粒径信息是决定颗

粒级配对力学性能影响的关键因素.

(3) 通过对输入颗粒图像信息进一步处理, 发现在数据规模一定的前提下, 高应力颗粒和力链颗粒信息可以更加高效地反映颗粒集合级配特征与力学性能之间的关系, 颗粒集合中的力链颗粒信息是影响模型预测能力的最主要因素.

(4) 基于GoogLeNet的卷积神经网络能够有效提取颗粒材料细观模型中的关键特征信息, 建立颗粒材料细观模型几何特征与力学性能之间的复杂非线性映射关系.

人工智能技术, 尤其是神经网络的迅速发展, 为颗粒材料力学特性研究提供了全新的工具和方法. 以ChatGPT等大型生成式人工智能模型为代表的最新技术进展, 进一步丰富了研究者的研究手段. 这些模型通过结合Prompt范式和人类反馈强化学习(RLHF)^[42], 能够有效融合专业领域知识, 生成新的材料数据, 从而在数据匮乏的情况下提供创新性解决方案. 此外, 它们还能够快速生成计算代码, 并与离散元数值模拟软件结合, 显著降低计算时间和成本, 进而提高材料特性模拟和分析的效率. 同时, 生成式模型具备强大的知识整理和提取能力, 能够为研究人员提供有关材料特性、优化策略和实验设计的即时建议, 从而进一步提升研究效率. 相信随着人工智能技术的持续进步, 研究人员将能够更深入地探索颗粒材料的结构特性与复杂力学行为之间的关系, 进一步推动颗粒材料力学性能研究领域的创新与进步.

参考文献

- 1 Cui W, Wei J, Wang C, et al. Discrete element simulation of particle column collapse characteristics considering particle gradation and morphology (in Chinese). *Chin J Geotech Eng*, 2021, 43: 2230–2239 [崔激, 魏杰, 王超, 等. 考虑颗粒级配和形态的颗粒柱坍塌特性离散元模拟. *岩土工程学报*, 2021, 43: 2230–2239]
- 2 Chen Q, Zhang J, Wang Z, et al. A review of the interfacial transition zones in concrete: Identification, physical characteristics, and mechanical properties. *Eng Fract Mech*, 2024, 300: 109979
- 3 Han Z L, Zhao J, Yu Y, et al. Preparation and study on the structure and properties of ZrO₂ foam ceramics (in Chinese). *J Shenyang Inst Technol*, 2022, 41: 66–73, 79 [韩子麟, 赵菁, 于跃, 等. ZrO₂泡沫陶瓷制备及组织与性能的研究. *沈阳理工大学学报*, 2022, 41: 66–73, 79]
- 4 Zhou W, Ma G, Liu J Y, et al. Review of macro- and mesoscopic analysis on rockfill materials in high dams (in Chinese). *Sci Sin Tech*, 2018, 48: 1068–1080 [周伟, 马刚, 刘嘉英, 等. 高堆石坝筑坝材料宏观观变形分析研究进展. *中国科学: 技术科学*, 2018, 48: 1068–1080]
- 5 Fu L L, Ye W T, Zhou S H, et al. Study on the microscopic mechanism of shear strength degradation in granular materials under high-frequency, low-amplitude vibration (in Chinese). *Sci Sin Tech*, 2023, 53: 1687–1698 [付龙龙, 叶伟涛, 周顺华, 等. 高频低幅振动下颗粒材料抗剪强度衰减细观机理研究. *中国科学: 技术科学*, 2023, 53: 1687–1698]
- 6 Guo W L, Zhu J G, Yu T. et al. The application of the continuous grade formulation process of soil in coarse grain (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2018, 39: 3661–3667 [郭万里, 朱俊高, 余挺, 等. 土的连续级配方程在粗粒料中的应用. *岩土力学*, 2018, 39: 3661–3667]

- 7 Wang J, Shi J, Liu F Y, et al. Effect of static and dynamic direct shear characteristics of sand particle grade paired grid-soil interface (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2019, 40: 109–117 [王军, 施静, 刘飞禹, 等. 砂土颗粒级配对格栅-土界面静、动力直剪特性的影响. *岩土力学*, 2019, 40: 109–117]
- 8 Chen L F, Gao Z P, Zhu J G, et al. Fractal characteristics of coarse-grained soil grading and particle breaking (in Chinese). *J Cent South Univ (Sci Technol)*, 2015, 46: 3446–3453 [陈镠芬, 高庄平, 朱俊高, 等. 粗粒土级配及颗粒破碎分形特性. *中南大学学报(自然科学版)*, 2015, 46: 3446–3453]
- 9 Shen Y, Zhu Y, Liu H, et al. Macro-meso effects of gradation and particle morphology on the compressibility characteristics of calcareous sand. *Bull Eng Geol Environ*, 2018, 77: 1047–1055
- 10 Monkul M M. Influence of gradation on shear strength and volume change behavior of silty sands. *Geomech Eng*, 2013, 5: 401–417
- 11 Wang J J, Zhang H P, Tang S C, et al. Effects of particle size distribution on shear strength of accumulation soil. *J Geotech Geoenviron Eng*, 2013, 139: 1994–1997
- 12 Li S L. Influence of particle size distribution on the static liquefaction behavior of sandy soils (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2010 [李声立. 颗粒级配对砂土静态液化行为的影响研究. 硕士学位论文. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2010]
- 13 Yang Z P, Tian X, Lei X D, et al. Numerical study of discrete elements influencing the shear characteristics of soil-rock mixture (in Chinese). *J Eng Geol*, 2020, 28: 39–50 [杨忠平, 田鑫, 雷晓丹, 等. 土石混合料剪切特性影响因素的离散元数值研究. *工程地质学报*, 2020, 28: 39–50]
- 14 Cheng Y P, Minh N H. DEM investigation of particle size distribution effect on direct shear behaviour of granular agglomerates. In: *Proceedings of the 6th International Conference on Micromechanics of Granular Media*. Golden, 2009. 401–404
- 15 Voivret C, Radjaï F, Delenne J Y, et al. Multiscale force networks in highly polydisperse granular media. *Phys Rev Lett*, 2009, 102: 178001
- 16 Estrada N, Oquendo W F. Microstructure as a function of the grain size distribution for packings of frictionless disks: Effects of the size span and the shape of the distribution. *Phys Rev E*, 2017, 96: 042907
- 17 Tang X S, Zheng Y R, Dong C A. A neural network was used to estimate the permeability coefficient of coarse-grained soil (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2007, 28: 133–136, 143 [唐晓松, 郑颖人, 董诚. 应用神经网络预估粗颗粒土的渗透系数. *岩土力学*, 2007, 28: 133–136, 143]
- 18 Zheng E F. Prediction of triaxial test constitutive curves of sandy soils based on machine learning (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Dalian: Dalian University of Technology, 2022 [郑尔发. 基于机器学习的砂土三轴实验本构曲线预测. 硕士学位论文. 大连: 大连理工大学, 2022]
- 19 Wei Z Y, Hou K, Jia Y S, et al. Impact of aggregate gradation and asphalt-aggregate ratio on pavement performance during construction using back propagation neural network. *Autom Construct*, 2024, 165: 105569
- 20 Guan S H. Research on data-driven multiscale computational methods for dam construction granular materials (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Wuhan: Wuhan University, 2023 [关少恒. 基于数据驱动的筑坝颗粒材料多尺度计算方法研究. 博士学位论文. 武汉: 武汉大学, 2023]
- 21 Sebaaly H, Varma S, Maina J W. Optimizing asphalt mix design process using artificial neural network and genetic algorithm. *Construct Build Mater*, 2018, 168: 660–670
- 22 Rivera-Pérez J, Al-Qadi I L. Asphalt concrete mix design optimization using autoencoder deep neural networks. *Transp Res Record-J Transp Res Board*, 2024, 2678: 426–438
- 23 Zhu J G, Guo W L, Wang Y L, et al. Research on the grading process and applicability of continuous graded soil (in Chinese). *Chin J Geotech Eng*, 2015, 37: 1931–1936 [朱俊高, 郭万里, 王元龙, 等. 连续级配土的级配方程及其适用性研究. *岩土工程学报*, 2015, 37: 1931–1936]
- 24 Talbot A N, Richart F E. The strength of concrete, its relation to the cement aggregates and water. *Illinois Univ Eng Exp Sta Bulletin*, 1923
- 25 Zhu S, Deng S D, Ning Z Y, et al. Design method of rockfill gradation based on fractal theory (in Chinese). *Chin J Geotech Eng*, 2017, 39: 1151–1155 [朱晟, 邓石德, 宁志远, 等. 基于分形理论的堆石料级配设计方法. *岩土工程学报*, 2017, 39: 1151–1155]
- 26 Zhao T T, Zhou W, Chang X L, et al. Study on the fractal characteristics and scale effect of rockfill material scale method (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2015, 36: 1093–1101 [赵婷婷, 周伟, 常晓林, 等. 堆石料缩尺方法的分形特性及缩尺效应研究. *岩土力学*, 2015, 36: 1093–1101]
- 27 Wu E L, Zhu J G, Wang L, et al. Single-parameter formulation process and applicability of coarse granulars (in Chinese). *Rock Soil Mech*, 2020, 41: 831–836 [吴二鲁, 朱俊高, 王龙, 等. 粗粒料的单参数级配方程及其适用性研究. *岩土力学*, 2020, 41: 831–836]
- 28 Zhu J G, Guo W L, Wen Y F, et al. New gradation equation and applicability for particle-size distributions of various soils. *Int J Geomech*, 2018, 18: 04017155

- 29 Nanjing Hydraulic Research Institute. Geotechnical Test Procedures (in Chinese). Beijing: China Water and Power Press, 1999 [南京水利科学研究所. 土工试验规程. 北京: 中国水利水电出版社, 1999]
- 30 Zhang W, Zhou J, Yu S W, et al. Study on contact forces and force chain characteristics of granular materials under biaxial compression (in Chinese). *Chin J Appl Mech*, 2018, 35: 530–537, 687 [张伟, 周剑, 于世伟, 等. 双轴压缩下颗粒物质接触力与力链特性研究. *应用力学学报*, 2018, 35: 530–537, 687]
- 31 Jamiolkowski M, Kongsukprasert L, Lopresti D C. Characterization of gravelly geomaterials. In: *Proceedings of the 15th Southeast Asian Geotechnical Conference*. Bangkok: Asian Institute of Technology, 2004. 153–162
- 32 Jiang M J, Li X M. Discrete element simulation analysis of shear band formation in sand during biaxial compression test (in Chinese). *J Shandong Univ Eng Sci*, 2010, 40: 52–58 [蒋明镜, 李秀梅. 双轴压缩试验中砂土剪切带形成的离散元模拟分析. *山东大学学报(工学版)*, 2010, 40: 52–58]
- 33 Ruan B, Zhang X J, Peng Y. Excel programming solves the shear strength index of the triaxial test (in Chinese). *J Railw Sci Eng*, 2009, 6: 57–60 [阮波, 张向京, 彭意. Excel规划求解三轴试验抗剪强度指标. *铁道科学与工程学报*, 2009, 6: 57–60]
- 34 Shi G H, Chen X R, Liu Y R, et al. Design of face key point detection algorithm based on convolutional neural network (in Chinese). *Electron Meas Technol*, 2019, 42: 125–130 [石高辉, 陈晓荣, 刘亚茹, 等. 基于卷积神经网络的人脸关键点检测算法设计. *电子测量技术*, 2019, 42: 125–130]
- 35 Zhang Y, Cui X, Liu Y, et al. Tire defects classification using convolution architecture for fast feature embedding. *Int J Comput Int Sys*, 2018, 11: 1056–1066
- 36 Zhuo L, Jiang L, Zhu Z, et al. Vehicle classification for large-scale traffic surveillance videos using convolutional neural networks. *Mach Vision Appl*, 2017, 28: 793–802
- 37 Rauf H T, Lali M I U, Zahoor S, et al. Visual features based automated identification of fish species using deep convolutional neural networks. *Comput Electron Agr*, 2019, 167: 105075
- 38 Guo Y, Liu Y, Bakker E M, et al. CNN-RNN: A large-scale hierarchical image classification framework. *Multimed Tools Appl*, 2018, 77: 10251–10271
- 39 Peters J F, Muthuswamy M, Wibowo J, et al. Characterization of force chains in granular material. *Phys Rev E*, 2005, 72: 041307
- 40 Liu Y, Yang Z W, Zou X X, et al. Data quantity governance for machine learning in materials science. *Natl Sci Rev*, 2023, 10: nwad125
- 41 Wan R G, Guo P J. Effect of microstructure on undrained behaviour of sands. *Can Geotech J*, 2001, 38: 16–28
- 42 Liu Y, Yang Z W, Yu Z Y, et al. Generative artificial intelligence and its applications in materials science: Current situation and future perspectives. *J Materiomics*, 2023, 9: 798–816

Convolution neural network analysis of the effect of gradation on the mechanical properties of granular materials

JU KaiXuan¹, ZHAO TingTing^{1,2}, LIU JiaYing³, FENG YunTian⁴ & WANG ZhiHua¹

¹ College of Mechanical and Vehicle Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China

² State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

³ Zhejiang Engineering Research Center of Intelligent Urban Infrastructure, Hangzhou 310015, China

⁴ Zienkiewicz Centre for Computational Engineering, Swansea University, Swansea SA18EN, UK

Gradation, a fundamental physical parameter of granular materials, considerably influences their mechanical properties. To rapidly obtain mechanical strength indices for particle assemblies with varying continuous gradation distributions and to analyze the mechanisms through which gradation affects mechanical properties, 100 gradation curves representing 3 typical continuous grading distributions were established based on the grading equation. Numerical samples corresponding to these curves were generated using the discrete element method, followed by biaxial compression testing to construct a dataset for training deep neural networks. Bayesian optimization methods were used to determine the optimal network hyperparameters and enhance the predictive performance of the model. Using compressed numerical sample images and their corresponding mechanical strength as training data, GoogLeNet was used to predict the shear strength of granular samples with varying gradations. By adjusting the input image information, this study examined the effects of particle and pore distribution, particle size, high-stress particles, and force chains on the predictive performance of the model. The results indicated that the convolutional neural network effectively captured the relationship between gradation characteristics and the mechanical properties of granular materials. Notably, information related to high-stress particles and force chains emerged as critical factors influencing the mechanical properties of granular materials and the predictive accuracy of the neural network model.

granular materials, gradation, force chain, convolutional neural network, discrete element method

doi: [10.1360/SST-2024-0187](https://doi.org/10.1360/SST-2024-0187)