

DOI: 10.7511/jslx20220814001

# 核级石墨 PFC<sup>2D</sup>模型的宏细观参数分析

陆忠晓<sup>1,2</sup>, 陈红鸟<sup>\*1,2</sup>, 沈杰<sup>1,2</sup>, 许应杰<sup>1,2</sup>, 刘灯凯<sup>1,2</sup>

(1. 贵州大学空间结构研究中心, 贵阳 550025; 2. 贵州省结构工程重点实验室, 贵阳 550025)

**摘要:** 颗粒流软件 PFC 能够很好地处理非连续介质力学的问题, 模拟核级石墨的损伤和断裂过程具有独特的优势。在采用 PFC<sup>2D</sup> 模拟核级石墨时, 为了增加模拟的便捷性, 实现了 PFC<sup>2D</sup> 细观参数的快速标定。本文首先设计了四因素四水平的正交试验, 分析了核级石墨的宏观参数与 PFC<sup>2D</sup> 的细观参数关系; 然后基于建立的核级石墨宏细观参数的关系, 采用 PFC<sup>2D</sup> 模拟石墨 IG11 的三点弯曲试验, 并从位移场变形、荷载-位移曲线和断裂参数三个方面验证其宏细观参数关系的正确性。结果表明, 弹性模量  $E$  随平节理模量  $E_c$  的增加线性增加; 抗拉强度  $\sigma_t$  随平节理抗拉强度  $\sigma_b$  的增加线性增加; 泊松比  $\nu$  随平节理刚度比  $k_n/k_s$  的增加先增大后减小; 数值模拟的位移场变化和荷载-裂缝口张开位移 P-CMOD 曲线与试验结果较吻合, 此外, 断裂参数的最大误差不超过 3.57%。

**关键词:** 核级石墨; PFC<sup>2D</sup>; 正交试验设计; 宏细观参数关系

**中图分类号:** TL341; TQ127.11

**文献标志码:** A

**文章编号:** 1007-4708(2024)02-0290-09

## 1 引言

石墨材料是一种由碳元素组成的天然矿物, 其形状呈六边形或三方晶系的鳞片状晶体<sup>[1]</sup>。在与石油焦和煤焦油沥青粘合剂组成的填充材料充分融合下, 经过石墨化的过程后, 形成核级石墨<sup>[2]</sup>。因其具有耐高温、耐辐射和中子慢化性能好等优点, 常在高温冷气堆 HTGR 中作为堆芯的主要构件材料<sup>[3]</sup>。在工作中, 核级石墨构件会受到辐射应力、机械荷载和地震荷载等复杂作用力的影响<sup>[4]</sup>, 这会使石墨构件发生损伤或破坏, 进而威胁 HTGR 的安全。因此, 研究核级石墨材料的损伤过程和失效机理具有重要意义。

颗粒流离散元软件 PFC 能克服连续介质有限元模型的局限, 可模拟大量颗粒之间的物理相互作用及其损伤过程和破坏模式<sup>[5]</sup>, 且用户可以定义特殊材料的模型、性质和加载方式。PFC 凭借其独特优势已经广泛应用于岩石、土体、沥青等研究中<sup>[6-10]</sup>, 但目前还未发现将该软件运用在核级石墨的研究中。PFC 具有表示颗粒接触力链、离散裂隙网格和能量输出等内置功能, 这可能会为核级石墨的损伤和断裂过程的表征提供一种新的数值分析方法。为了推广离散元方法在核级石墨中的应

用, 有必要对核级石墨的离散元模型进行全面分析。

在使用 PFC<sup>2D</sup> 建立数值模型时, 输入的材料参数(细观参数)并不是石墨的基本力学参数(宏观参数), 为使建立的数值模型能较好地反映试验的情况, 保证模型材料参数的合理性及正确性, 需要选用合适的模型。因为核级石墨为胶结性材料<sup>[2]</sup>, 所以在模拟中要选用黏结模型。其中, 平节理模型 FJM 能用多边形代替圆形颗粒, 不仅可以传递力, 还可以传递力矩, 同时能够抑制颗粒黏结破坏后的旋转<sup>[5]</sup>。此外, 核级石墨是多相材料, 在平面序列上, 彼此之间会出现平移和旋转<sup>[11]</sup>, 所以理论上可以使用具有能够抑制颗粒黏结破坏作用的 FJM 作为核级石墨的模型。

为验证核级石墨宏细观参数关系的可靠性和 PFC 用于核级石墨研究的可行性, 本文将基于 PFC<sup>2D</sup>, 设计正交试验, 建立宏细观参数之间的关系。最后对 IG11 石墨单边切口梁进行三点弯曲试验, 并将试验结果与数值模拟结果进行比较分析。

## 2 PFC<sup>2D</sup>理论和简化细观参数

### 2.1 平节理模型 FJM 基本理论

FJM 由多边形晶粒和晶粒间的平节理接触构成。图 1 为平节理接触, 平节理接触界面平均离散为独立单元, 单元上承受的力和力矩遵守力-位移定律, 每个单元处于粘结或未粘结状态。

对于粘结状态, 接触行为是线弹性, 超过粘结状态的强度极限时, 单元粘结破坏后处于非粘结状

收稿日期: 2022-08-14; 修改稿收到日期: 2022-09-28.

基金项目: 国家自然科学基金(52278251); 贵州省科技计划重点项目(黔科合基础-ZK[2022]重点 007)资助.

作者简介: 陈红鸟<sup>\*</sup>(1982-), 女, 博士, 教授, 博士生导师  
(E-mail: hqchen@gzu.edu.cn).

态,当单元所受的法向拉应力  $\sigma^{(e)} > \sigma_b$  时,单元发生拉伸破坏,形成张拉裂纹;当单元剪切应力  $\tau^{(e)} > \tau_b^{(e)}$  时,单元发生剪切破坏,形成剪切裂纹,  $\tau_b^{(e)}$  计算式为式(1)。对于非粘结状态,接触行为是线弹性,不能承受拉力,当  $\tau^{(e)} > \tau_b^{(e)}$  时,沿着接触面滑动破坏,形成剪切裂纹,  $\tau_b^{(e)}$  计算式为式(2)。

$$\tau_b^{(e)} = c_b - \sigma^{(e)} \tan \varphi_b \quad (1)$$

$$\tau_b^{(e)} = -\tau^{(e)} \mu_b \quad (2)$$

式中  $c_b$  为平节理内聚力,  $\varphi_b$  为平节理内摩擦角,  $\mu_b$  为平节理摩擦系数。

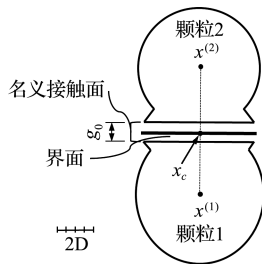


图1 平节理接触<sup>[12]</sup>  
Fig.1 Flat joint contact<sup>[12]</sup>

### 2.2 简化微观参数

FJM 主要的微观参数列入表 1。由于微观参数较多,刘相等<sup>[13]</sup>认为  $\sigma_b$  和  $c_b$  主要影响强度特性,  $E_c$  和  $k_n/k_s$  主要影响变形特性。为提高标定效率,在微观参数标定时,只需要标定对强度和变形有显著影响的参数。由于核石墨采用等静压的成型工艺,得到的核石墨材料具有各向同性、机械性能良好和密度分布均匀等优点<sup>[14]</sup>,且孔隙率为 0.2<sup>[15]</sup>,认为初始损伤较小,所以不考虑  $\phi_b$  的影响,设  $\phi_b = 1$ 。基于核级石墨的物理特性,以及参考文献<sup>[16,17]</sup>的研究,假设如下

- $\varphi_b = 15^\circ, \lambda = 1$ 。
- 材料密度  $\rho_s = 1770 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$ 。
- $E_p = E_c, (k_n/k_s)_p = k_n/k_s, \mu_p = \mu_b = 0.5$ 。

(1) 简化颗粒粒径。颗粒尺寸是 PFC 中最基本的微观参数,颗粒粒径大小和数量直接影响模拟结果的准确性和模型的运行速度。

石崇等<sup>[18]</sup>认为离散元模型的颗粒数目超过 3000 个时,轴向峰值应力基本维持稳定。Potyondy 等<sup>[19]</sup>认为在不考虑颗粒级配下,颗粒流模型颗粒最大粒径和最小粒径比  $R_{\max}/R_{\min} = 1.66$  时,模型内的颗粒分布较为均匀。文献<sup>[20]</sup>认为模型最小尺度上颗粒数  $RES \geq 10$  时,颗粒尺寸和颗粒数量对模型的宏观力学影响较小,Deisman<sup>[21]</sup>定义

RES 为

$$RES = (L/R_{\min}) [1/(1 + R_{\max}/R_{\min})] \quad (3)$$

式中  $L$  为模型最小尺度,  $R_{\max}$  为最大颗粒半径,  $R_{\min}$  为最小颗粒半径。

表 1 FJM 主要微观参数  
Tab.1 Main micro-parameters of FJM

宏观参数		颗粒微观参数	
$\sigma_t$	单轴抗拉强度	$\rho_s$	颗粒密度
$\sigma_f$	单轴抗压强度	$R_{\min}$	最小颗粒粒径
$E$	弹性模量	$R_{\max}/R_{\min}$	颗粒粒径比
$\nu$	泊松比	$E_p$	颗粒接触模量
		$\mu_p$	颗粒摩擦系数
		$(k_n/k_s)_p$	颗粒接触刚度比
平直节理微观参数			
$N$	交界面段数		
$\mu_b$	平节理摩擦系数		
$E_c$	平节理模量		
$\lambda$	平节理两端较小颗粒的半径比		
$k_n/k_s$	平节理刚度比		
$\sigma_b$	平节理抗拉强度		
$c_b$	平节理内聚力		
$\varphi_b$	平节理内摩擦角		
$\phi_b$	平节理黏结比例		

基于石墨材料的物理特性,并结合颗粒数目和颗粒尺寸的分析,取  $R_{\min} = 0.4 \text{ mm}, R_{\max}/R_{\min} = 1.66$ ,得到  $RES = 47 > 10$ ;颗粒数量为 4943 个  $> 3000$  个,均满足 RES 和最小颗粒数量要求。

(2) 简化交界面段数  $N$ 。根据以上假设和颗粒尺寸的选取,为了获得合理的  $N$  值,分别分析了  $N = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$  时其对宏观参数的影响,其他微观参数采用表 2 的数值,得到的宏观参数列入表 3。

表 2 FJM 微观参数  
Tab.2 FJM micro-parameters

$\rho_s/\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$\lambda$	$\mu_b$	$R_{\min}/\text{mm}$	$R_{\max}/R_{\min}$
1770	1	0.5	0.4	1.66
$E_c/\text{GPa}$	$k_n/k_s$	$\sigma_b/\text{MPa}$	$c_b/\text{MPa}$	$\varphi_b$
8	1.4	24	24	15°

表 3 不同  $N$  下,模型的宏观参数  
Tab.3 Macro-parameters of model under different  $N$

序号	$N$	$\sigma_t/\text{MPa}$	$\sigma_f/\text{MPa}$	$E/\text{GPa}$	$\nu$
1	1	65.590	16.762	9.900	0.098
2	2	65.390	16.762	9.903	0.098
3	3	65.596	16.762	9.904	0.098
4	4	65.648	16.762	9.903	0.098
5	5	65.281	16.762	9.904	0.098
6	6	65.512	16.762	9.904	0.098
7	7	65.388	16.762	9.904	0.098
8	8	65.617	16.762	9.904	0.098
9	9	65.466	16.762	9.905	0.098

由表3可知,  $N$  对  $\sigma_t, \sigma_f, E$  和  $\nu$  几乎没有影响, 且可忽略其对模型运行速度的影响。由于石墨材料的碳分子是六边形稳定结构<sup>[1]</sup>, 所以取  $N=6$ 。

### 3 正交试验设计和数值模型

#### 3.1 数值模型

由于石墨与岩石都是准脆性材料, 其具有相似的粒径分布<sup>[22,23]</sup>, 且在岩石研究中, 陈鹏宇等<sup>[24]</sup> 选用尺寸为  $50\text{ mm} \times 100\text{ mm}$  (底边长  $\times$  高) 的模型进行单轴压缩和拉伸数值试验得到了宏细观参数之间的关系, 因此可选择相同尺寸模型来获得核石墨的宏观参数。单轴压缩模型如图2(a)所示, 结合数值模拟获得的应力-应变曲线, 由式(4~6)确定宏观参数  $\sigma_f, E$  和  $\nu$ ; 单轴拉伸模型如图2(b)所示,  $\sigma_t$  为模型破坏时的峰值强度。

$$\sigma_f = F/A, E = \sigma_{50}/\epsilon_{50}, \nu = |\epsilon_{d50}/\epsilon_{50}| \quad (4\sim6)$$

式中  $F$  为竖向荷载,  $A$  为试样横截面面积,  $\sigma_{50}$  为单轴压缩强度 50% 的应力值,  $\epsilon_{50}$  为  $\sigma_{50}$  对应的轴向应变;  $\epsilon_{d50}$  为  $\sigma_{50}$  对应的横向应变。

#### 3.2 正交试验设计

正交试验是一种用于研究多因素多水平的试验方法, 具有均匀分散、齐整可比的特点<sup>[25]</sup>。在简

化细观参数的基础上, 只需要标定  $E_c, k_n/k_s, \sigma_b$  和  $c_b$ 。因此, 本文设计了 4 因子 4 水平的正交试验, 正交试验设计列入表 4, 正交矩阵序列及宏观参数计算结果列入表 5。

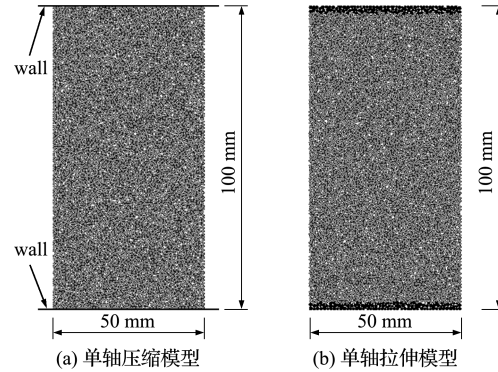


图2 单轴数值模型

Fig. 2 Uniaxial numerical model

表4 正交试验设计

Tab. 4 Orthogonal design tables

细观参数	因子水平			
	1	2	3	4
$E_c/\text{GPa}$	5.0	7.5	10.0	12.5
$k_n/k_s$	0.6	1.0	1.4	1.8
$\sigma_b/\text{MPa}$	7.5	15.0	22.5	30.0
$c_b/\text{MPa}$	22.5	30.0	37.5	45.0

表5 正交矩阵序列及宏观参数计算结果

Tab. 5 Orthogonal matrix sequences and calculation results of macro-parameters

序号	模拟方案				模拟结果			
	$E_c/\text{GPa}$	$k_n/k_s$	$\sigma_b/\text{MPa}$	$c_b/\text{MPa}$	$E/\text{GPa}$	$\nu$	$\sigma_f/\text{MPa}$	$\sigma_t/\text{MPa}$
1	5.0	0.6	7.5	22.5	7.65	0.111	44.76	5.95
2	5.0	1.0	15.0	45.0	6.77	0.017	100.79	11.47
3	5.0	1.4	22.5	30.0	6.26	0.089	77.35	16.80
4	5.0	1.8	30.0	37.5	5.93	0.138	100.42	22.04
5	7.5	0.6	15.0	37.5	11.43	0.115	72.71	11.88
6	7.5	1.0	7.5	30.0	10.17	0.015	65.69	5.75
7	7.5	1.4	30.0	45.0	9.38	0.089	109.08	22.40
8	7.5	1.8	22.5	22.5	8.87	0.139	65.03	16.51
9	10.0	0.6	22.5	45.0	15.23	0.115	86.93	17.81
10	10.0	1.0	30.0	22.5	13.48	0.015	66.33	22.94
11	10.0	1.4	7.5	37.5	12.50	0.092	85.63	5.62
12	10.0	1.8	15.0	30.0	11.82	0.139	78.83	11.01
13	12.5	0.6	30.0	30.0	19.02	0.115	71.16	23.75
14	12.5	1.0	22.5	37.5	16.85	0.015	86.15	17.21
15	12.5	1.4	15.0	22.5	15.60	0.090	58.66	11.22
16	12.5	1.8	7.5	45.0	14.81	0.162	99.17	5.50

### 4 宏细观参数分析

#### 4.1 多因素方差分析

多因素方差分析可同时研究多个自变量因素

对因变量影响的显著性。本文采用统计学软件 SPSS, 通过考虑各自变量因素之间的主效应, 研究了细观参数对宏观参数影响的大小。图 3 显示了各宏观参数的  $F$  统计量和相伴概率 (Sig.), 其中,

F 统计量表示因素的均方与误差均方之比,反映各影响因素对结果的影响程度;Sig. 是 F 统计量对应的 P 值,并且根据 P 值进行显著性检验。本文取检验的显著水平  $\alpha=0.05$ ,当  $\text{Sig.} \leq 0.05$  时,认为细观参数对宏观参数影响显著;当  $\text{Sig.} > 0.05$  时,影响不显著,可忽略不计。分析结果如图 3 所示。

(1) 从图 3(a)可以看出,细观参数对 E 的显著性排序为  $E_c > k_n/k_s > \sigma_b > c_b$ 。其中  $E_c, k_n/k_s$  的  $\text{Sig.} < 0.05$ ,而  $\sigma_b$  和  $c_b$  的  $\text{Sig.} > 0.05$ 。所以  $k_n/k_s$  和  $E_c$  对 E 有显著影响,且  $E_c$  比  $k_n/k_s$  对 E 的影响程度大,而  $\sigma_b$  和  $c_b$  对 E 无显著影响,可忽略不计。

(2) 从图 3(b)可以看出,细观参数对  $\nu$  的显著性排序为  $k_n/k_s > c_b > E_c > \sigma_b$ 。其中  $k_n/k_s$  的  $\text{Sig.} <$

0.05,而  $E_c, \sigma_b$  和  $c_b$  的  $\text{Sig.} > 0.05$ 。所以  $k_n/k_s$  对  $\nu$  有显著影响,而  $E_c, \sigma_b$  和  $c_b$  对  $\nu$  无显著影响,可忽略不计。

(3) 从图 3(c)可以看出,细观参数对  $\sigma_t$  的显著性排序为  $\sigma_b > k_n/k_s > E_c > c_b$ 。其中  $\sigma_b$  和  $k_n/k_s$  的  $\text{Sig.} < 0.05$ ,而  $E_c, c_b$  的  $\text{Sig.} > 0.05$ 。所以  $k_n/k_s$  和  $\sigma_b$  对  $\sigma_t$  有显著影响,且  $\sigma_b$  比  $k_n/k_s$  对  $\sigma_t$  的影响程度大,而  $E_c$  和  $c_b$  对  $\sigma_t$  无显著影响,可忽略不计。

(4) 从图 3(d)可以看出,细观参数对  $\sigma_f$  的显著性排序为  $c_b > k_n/k_s > \sigma_b > E_c$ 。其中  $\sigma_b, k_n/k_s$  和  $c_b$  的  $\text{Sig.} < 0.05$ ,  $E_c$  的  $\text{Sig.} > 0.05$ 。所以影响  $\sigma_f$  的因素较多,  $\sigma_b, k_n/k_s$  和  $c_b$  对  $\sigma_f$  均有显著影响,而  $E_c$  对  $\sigma_f$  无显著影响,可忽略不计。

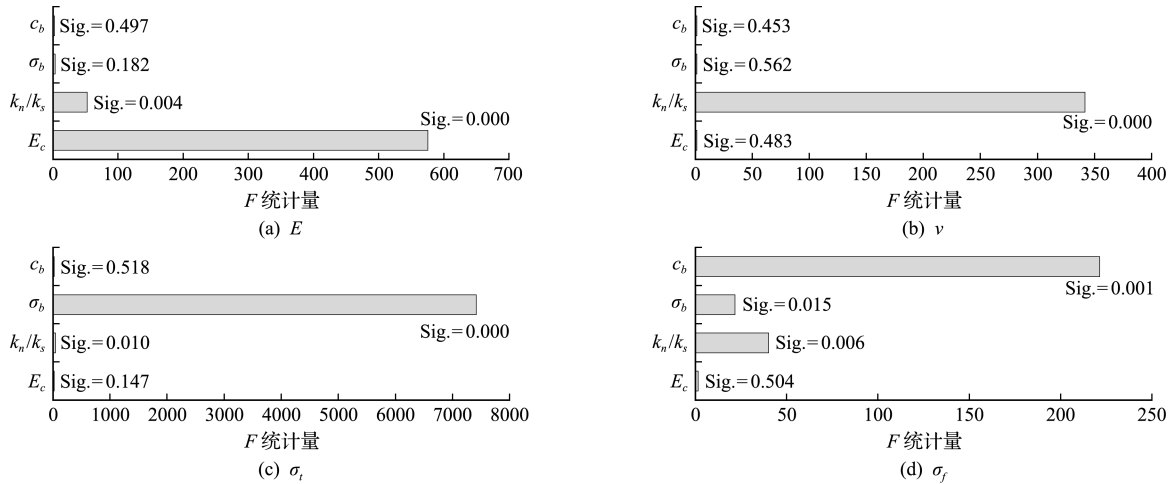


图 3 F 统计量和 Sig.  
Fig. 3 F-statistic and Sig.

### 4.2 宏细观参数定量分析

基于 4.1 节的分析,取影响最大的细观参数为自变量,宏观参数为因变量,作宏细观参数关系图,对宏细观参数进行定量分析,分析如下。

(1) 弹性模量。  $k_n/k_s$  取不同值,  $E_c$  与 E 的关系以及拟合曲线如图 4(a)所示。可以看出, E 随着  $E_c$  的增加而线性增加;随着  $k_n/k_s$  的增加,拟合

曲线的截距  $A_1$  和斜率  $B_1$  均减少,而图中拟合公式的最大截距与 E 相比较小。在分析  $E_c$  与 E 之间的关系时,忽略  $A_1$  的影响,其关系曲线如图 4(b)所示。可以看出,  $R^2=1.0$ ,说明拟合方程能表达  $k_n/k_s$  与  $B_1$  的关系。得到 E 关于  $E_c$  以及  $k_n/k_s$  的拟合公式,即

$$E = [1.094 + 0.459(e^{-\frac{k_n/k_s}{0.696}} + e^{-\frac{k_n/k_s}{0.851}})]E_c \quad (7)$$

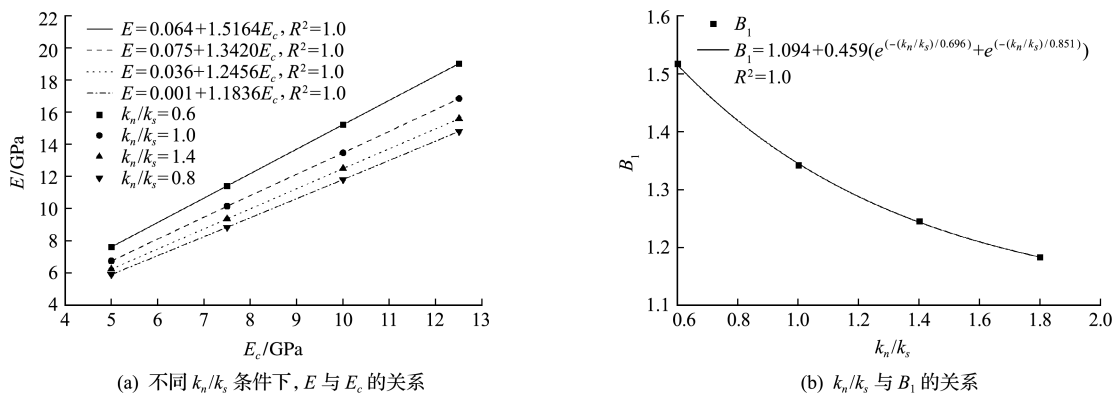
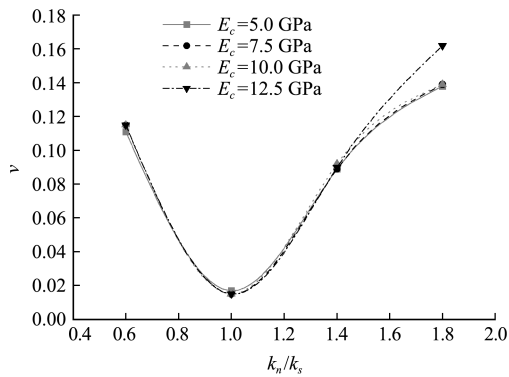


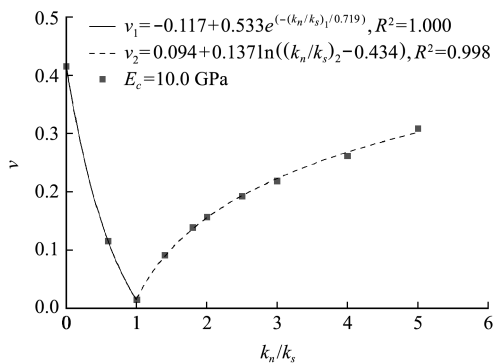
图 4 E 与  $E_c$  之间的关系  
Fig. 4 Relationship between E and  $E_c$

(2) 泊松比。\$E\_c\$ 取不同值时，\$\nu\$ 与 \$k\_n/k\_s\$ 的关系如图 5(a)所示。可以看出，\$\nu\$ 随着 \$k\_n/k\_s\$ 的增加先减小后增大；\$E\_c\$ 分别取 5.0 GPa, 7.5 GPa 和 10.0 GPa 时，\$\nu\$ 和 \$k\_n/k\_s\$ 的关系曲线大致重合，可从重合曲线中寻找 \$\nu\$ 和 \$k\_n/k\_s\$ 的规律。从图 5(a)看出，正交试验得到的曲线下降段以及上升段分别只有两个点以及三个点，不足以表达 \$\nu\$ 和 \$k\_n/k\_s\$ 的关系，所以在保持 \$E\_c, c\_b\$ 以及 \$\sigma\_b\$ 不变的情况下(分别取 10 GPa, 45 MPa 以及 22.5 GPa)，通过改变 \$k\_n/k\_s\$ 的值，研究了 \$\nu\$ 与 \$k\_n/k\_s\$ 的关系，如图 5(b)所示。分别对曲线的下降段和上升段进行拟合，拟合结果分别用 \$\nu\_1\$ 及 \$\nu\_2\$ 表示，令 \$\nu\_1 = \nu\_2\$，得到两段拟合曲线的交点 \$(k\_n/k\_s)\_0 = 0.860\$，\$\nu\$ 和 \$k\_n/k\_s\$ 的拟合公式为

$$\begin{cases} \nu_1 = -0.117 + 0.533 e^{-(k_n/k_s)_1/0.719} & (0 \leq k_n/k_s < (k_n/k_s)_0) \\ \nu_2 = 0.094 + 0.137 \ln((k_n/k_s)_2 - 0.434) & ((k_n/k_s)_0 \leq k_n/k_s < 5) \end{cases} \quad (8)$$



(a) 不同 \$E\_c\$ 条件下，\$\nu\$ 与 \$k\_n/k\_s\$ 的关系



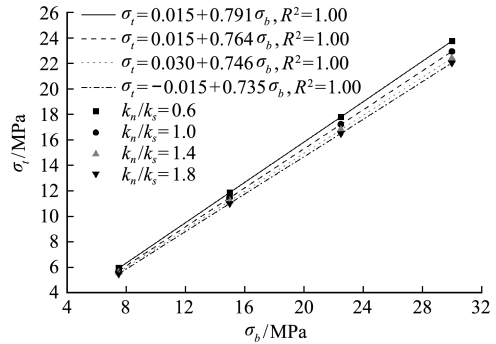
(b) 不同 \$k\_n/k\_s\$ 条件下，\$\nu\$ 与 \$k\_n/k\_s\$ 的关系

图 5 \$\nu\$ 与 \$k\_n/k\_s\$ 之间的关系  
Fig. 5 Relationship between \$\nu\$ and \$k\_n/k\_s\$

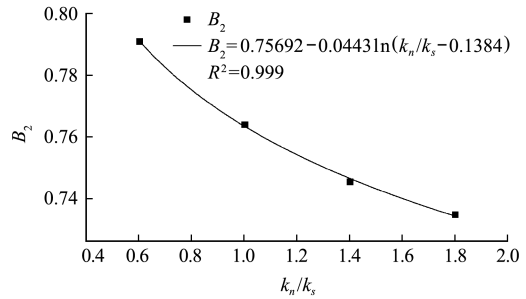
(3) 抗拉强度。\$k\_n/k\_s\$ 取不同的值时，\$\sigma\_b\$ 与 \$\sigma\_t\$ 关系和拟合曲线如图 6(a)所示。可以看出，\$\sigma\_t\$ 随 \$\sigma\_b\$ 线性变化，斜率 \$B\_2\$ 随 \$k\_n/k\_s\$ 的增加而减少，截距 \$A\_2\$ 的变化很小(最大截距为 0.030 MPa)。在分析 \$k\_n/k\_s\$ 与 \$B\_2\$ 关系时，忽略 \$A\_2\$ 的影响，其关系曲线如图 6(b)所示。可以看出，\$R^2 = 0.999\$，说明拟合方

程能够表达 \$k\_n/k\_s\$ 与 \$B\_2\$ 的关系。得到 \$\sigma\_t\$ 关于 \$\sigma\_b\$ 以及 \$k\_n/k\_s\$ 的拟合公式为

$$\sigma_t = [0.757 - 0.044 \ln(k_n/k_s - 0.138)] \sigma_b \quad (9)$$



(a) 不同 \$k\_n/k\_s\$ 条件下，\$\sigma\_b\$ 与 \$\sigma\_t\$ 的关系

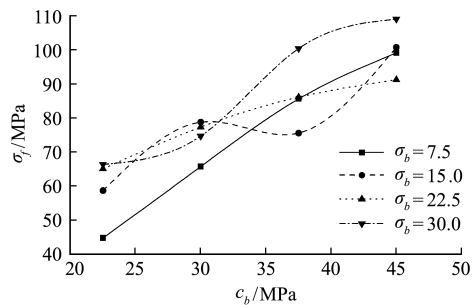


(b) \$k\_n/k\_s\$ 与 \$B\_2\$ 的关系

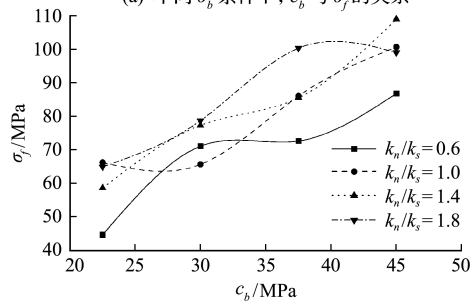
图 6 \$\sigma\_b\$ 与 \$\sigma\_t\$ 之间的关系

Fig. 6 Relationship between \$\sigma\_b\$ and \$\sigma\_t\$

(4) 抗压强度。\$k\_n/k\_s\$ 保持不变，\$\sigma\_b\$ 取不同的值时，\$c\_b\$ 与 \$\sigma\_f\$ 关系曲线如图 7(a)所示。\$\sigma\_b\$ 保持不变，\$k\_n/k\_s\$ 取不同的值时，\$c\_b\$ 与 \$\sigma\_f\$ 关系曲线如图 7(b)所示。可以看出，无论 \$\sigma\_b\$ 以及 \$k\_n/k\_s\$ 取何值，\$\sigma\_f\$ 均随



(a) 不同 \$\sigma\_b\$ 条件下，\$c\_b\$ 与 \$\sigma\_f\$ 的关系



(b) 不同 \$k\_n/k\_s\$ 条件下，\$c\_b\$ 与 \$\sigma\_f\$ 的关系

图 7 \$c\_b\$ 和 \$\sigma\_f\$ 的关系

Fig. 7 Relationship between \$c\_b\$ and \$\sigma\_f\$

着  $c_b$  的增加而增加,但  $c_b$  与  $\sigma_f$  曲线的变化对  $\sigma_b$  的变化基本无规律可言,对  $k_n/k_s$  的变化也是如此,原因可能是  $\sigma_f$  还受其他细观参数的影响,如  $\varphi_b$  和  $\mu_b$  等<sup>[24]</sup>,具体关系需进一步分析。在此选用达到非常显著(即  $\text{Sig.} < 0.01$ )的细观参数进行线性拟合,结果如式(10)所示,  $R^2 = 0.907 > 0.900$ ,说明  $k_n/k_s$  和  $c_b$  基本能反映  $\sigma_f$  的情况。

$$\sigma_f = 8.3 + 8k_n/k_s + 1.9c_b, R^2 = 0.907 \quad (10)$$

### 4.3 宏细观关系方程建立

在建立 PFC<sup>2D</sup>模型时,需要输入的是细观参数,所以在此对 4.2 节得到的拟合公式进行调整,得到了以细观参数为因变量,宏观参数为自变量的拟合公式列入表 6。

表 6 细观参数与宏观参数拟合公式

Tab. 6 Fitting formulas for macro-microparameter relationships

公式	编号
$E_c = E/[1.094 + 0.459(e^{-(k_n/k_s)/0.696}) + e^{-(k_n/k_s)/0.851}]$	(11)
$\begin{cases} \text{下降段: } k_n/k_s = -0.719 \ln^{-(\nu+0.117)/0.533} \\ \text{上升段: } k_n/k_s = e^{-(\nu-0.094)/0.137} + 0.434 \end{cases}$	(12)
$\sigma_b = \sigma_t/[0.757 - 0.044 \ln(k_n/k_s - 0.138)]$	(13)
$c_b = (\sigma_f - 8.300 - 8.000k_n/k_s)/1.900$	(14)

## 5 实例验证

### 5.1 试验概况

为验证数值模拟的可靠性,使用石墨 IG11 单边切口梁进行三点弯曲试验,其主要宏观参数列入表 7<sup>[23]</sup>。

表 7 石墨 IG11 主要宏观参数

Tab. 7 Main macro-parameters of IG11 graphite

宏观参数	数值
弹性模量/GPa	10.2
泊松比	0.14
密度/ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	1.77
拉伸强度/MPa	25
抗压强度/MPa	78

图 8 为三点弯曲梁试验装置。试验如图 8(a)所示,试件尺寸为  $220 \text{ mm} \times 50 \text{ mm} \times 25 \text{ mm}$ (长度  $L \times$  高度  $D \times$  厚度  $t$ ),跨度  $S$  为  $200 \text{ mm}$ 。切口长度  $a_0$  为  $20 \text{ mm}$ ,宽度为  $0.3 \text{ mm}$ 。试验装置如图 8(b)所示,采用 MTS 电液伺服压力机对试件进行加载;加载方式为位移控制,加载速率为  $0.01 \text{ mm/min}$ ;采用夹式位移计测量裂缝口张开位移(CMOD);使用电子散斑干涉技术(ESPI)测量表面变形,其测量原理详情见文献[23]。基于试验,建立了对应的离

散元模型如图 8(c)所示。其细观参数标定结果列入表 8。

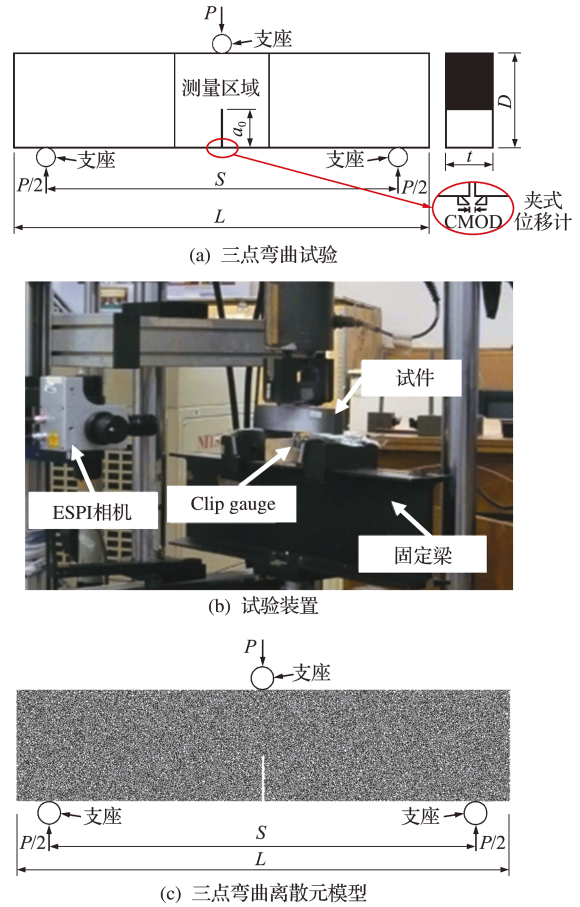


图 8 三点弯曲试验

Fig. 8 Three-point bending test

表 8 细观参数标定结果

Tab. 8 Calibration results of micro-parameters

$\rho_s/\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	$\lambda$	$\mu_b$	$R_{\min}/\text{mm}$	$R_{\max}/R_{\min}$	
1770	1	0.5	0.4	1.66	
$\varphi_b$	$N$	$E_c/\text{GPa}$	$k_n/k_s$	$\sigma_b/\text{MPa}$	$c_b/\text{MPa}$
46.2	6	8.64	1.83	34.07	28.97

### 5.2 数值模拟和试验结果对比

根据数值模拟与试验的结果,分别对比了  $x$  方向( $U_x$ )位移场、荷载-裂缝口张开位移( $P$ -CMOD)曲线和断裂参数的结果。

(1)  $U_x$  位移场。由于此试验的峰值前裂纹扩展不明显<sup>[26]</sup>,因此对比了峰值后  $83\% P_c$  的试验和数值模拟的  $U_x$  位移场,  $P_c$  为峰值荷载,如图 9 所示。可以看出,两者的位移场变化趋势相近,且峰值后  $83\% P_c$  的裂缝长度( $a_{83\%}$ )相差较小,误差仅为  $0.2\%$ 。

由于两者的  $a_{83\%}$  误差较小,所以认为离散元模型中的颗粒接触力链可以反映峰值后  $83\% P_c$  试件的受力情况,其厚度表示接触力的大小<sup>[27]</sup>,如图

10所示。可以看出,颗粒在支座处受到压力较大,在裂缝周围的拉力较大,说明该试件发生受拉破坏,且在支座和裂缝周围发生较大的损伤。

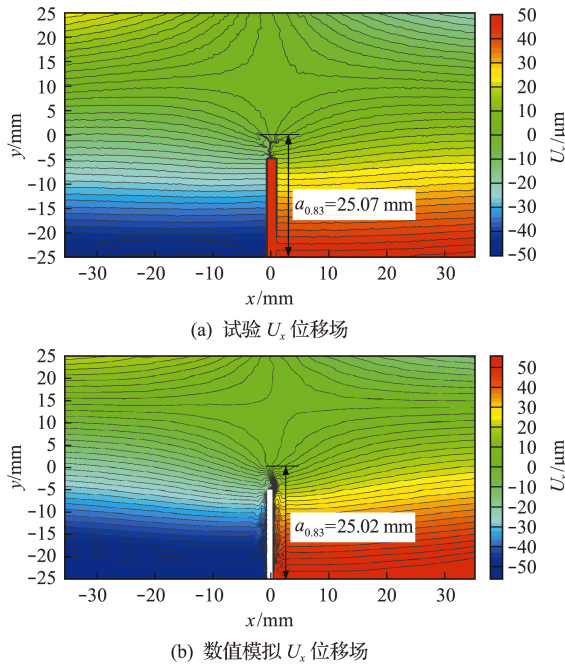


图9 峰值后83%  $P_c$  的  $U_x$  位移场  
Fig. 9  $U_x$  displacement field of 83%  $P_c$  after peak

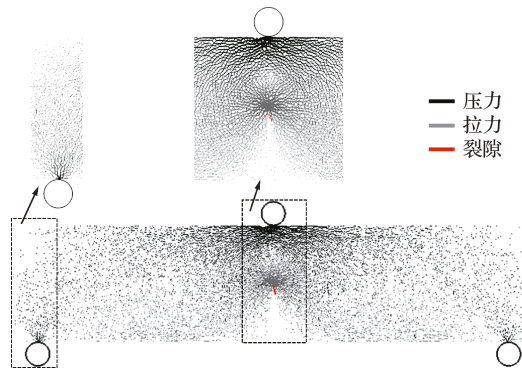


图10 峰值后83%  $P_c$  的颗粒接触力链  
Fig. 10 Contact force chain of 83%  $P_c$  after peak

(2) P-CMOD曲线。图11显示了数值模拟与试验的P-CMOD曲线,可以看出,两者P-CMOD曲线变化趋势相似,结果比较吻合;表9为两者的峰值荷载( $P_c$ )和临界裂缝口张开位移(CMOD<sub>c</sub>)力学参数,两者的最大误差不超过3.57%。

(3) 断裂参数。在研究核级石墨的断裂力学特征中,断裂和韧度临界有效裂缝长度( $a_c$ )是重要的断裂参数, $a_c$ 是 $P_c$ 对应的裂缝长度;断裂韧度( $K_{IC}$ )是裂缝失稳扩展的临界状态对应的应力强度因子,由式(16)确定<sup>[28]</sup>。

$$K_{IC} = \frac{3Y}{2} \frac{P_c S}{D^2 t} \quad (16)$$

$$Y = \sqrt{a_0} \left[ 1.99 - \frac{a_0}{D} \left( 1 - \frac{a_0}{D} \right) \left( 2.15 - 3.93 \frac{a_0}{D} + 2.7 \left( \frac{a_0}{D} \right)^2 \right) \right] / \left[ \left( 1 + 2 \frac{a_0}{D} \right) \left( 1 - \frac{a_0}{D} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (17)$$

式中  $Y$  为几何因子,其余含义与4.1节相同。

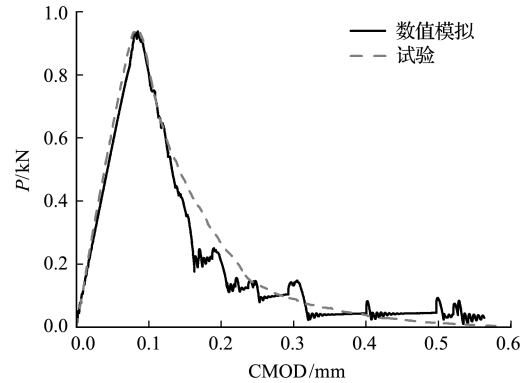


图11 P-CMOD曲线  
Fig. 11 P-CMOD curve

对于  $a_c$  的确定,试验中,可由COD曲率确定  $a_c$ <sup>[29]</sup>,数值模拟中,记录裂缝位置后,得到  $a_c$ ;对于  $K_{IC}$  的确定,分别将试验和模拟得到的  $P_c$  和  $a_0$  代入式(16,17)得到  $K_{IC}$ ,各结果列入表9。由表9可知,两者的  $a_c$  和  $K_{IC}$  误差不超过1.57%。

表9 IG11石墨各参数对比  
Tab. 9 Comparison of IG11 graphite parameters

参数	$P_c$ /kN	CMOD <sub>c</sub> /mm	$a_c$ /mm	$K_{IC}$ /MPa·m <sup>1/2</sup>
试验值	0.935	0.078	21.100	1.323
模拟值	0.933	0.081	21.433	1.325
误差/%	0.21	3.57	-1.57	-0.15

总的来说,离散元模型的位移场云图、荷载-位移曲线和断裂参数均与试验结果较吻合,这表明宏细观参数关系的拟合方程是可靠的。因此可以将PFC运用于核级石墨的研究中,并可能为后续应用PFC研究核级石墨的损伤、破坏过程和断裂机理等展开作铺垫。

## 6 结论

在PFC<sup>2D</sup>中使用平节理模型(FJM)作为颗粒接触的本构模型,对细观参数设计正交试验,分析宏细观参数之间的关系,并进行核级石墨IG11单边切口梁的三点弯曲试验来验证关系的正确性。主要结论如下。

(1) 平节理模量( $E_c$ )对弹性模量( $E$ )具有绝对影响优势;平节理刚度比( $k_n/k_s$ )对泊松比( $\nu$ )具有绝对影响优势;平节理抗拉强度( $\sigma_b$ )对抗拉强度( $\sigma_t$ )具有绝对影响优势;平节理内聚力( $c_b$ )对抗压强度( $\sigma_f$ )具有绝对影响优势。

(2)  $E$  随  $E_c, \sigma_i$  随  $\sigma_b$  线性变化, 其  $k_n/k_s$  随斜率分别呈对数和指数函数的关系;  $\nu$  随  $k_n/k_s$  的增加先增大后减小, 分别呈指数和对数函数关系; 影响  $\sigma_f$  因素较多, 可由线性回归方法确定  $\sigma_f$ 。

(3) 离散元模型能与试验较好吻合。  $U_x$  位移场和 P-CMOD 曲线变化趋势相同, 断裂参数误差不超过 3.57%, 这验证了将 PFC<sup>2D</sup> 用于核级石墨研究的可行性。同时为核级石墨参数标定提供一定依据, 对研究核级石墨的损伤、破坏过程和断裂特征等提供了新的数值模拟方法。

## 参考文献 (References):

- [1] 张苏江, 王楠, 崔立伟, 等. 国内外石墨资源供需形势分析[J]. 无机盐工业, 2021, **53**(7): 1-11. (ZHANG Su-jiang, WANG Nan, CUI Li-wei, et al. Analysis of supply and demand situation of graphite resources at home and abroad[J]. *Inorganic Chemicals Industry*, 2021, **53**(7): 1-11. (in Chinese))
- [2] Burchell T D. *Nuclear Graphite and Radiation Effects - Science Direct* [M]. Amsterdam: Elsevier, 2001.
- [3] 余子昊, 陈红鸟, 唐宇翔, 等. 基于 XFEM 模拟的核级石墨断裂行为研究[J]. 应用力学学报, 2021, **38**(3): 1036-1043. (YU Zi-hao, CHEN Hong-niao, TANG Yu-xiang, et al. Study on fracture behaviors of nuclear graphite using XFEM simulation[J]. *Chinese Journal of Applied Mechanics*, 2021, **38**(3): 1036-1043. (in Chinese))
- [4] 史力, 王洪涛, 王海涛, 等. 核级石墨材料断裂韧性实验研究[J]. 核动力工程, 2011, **32**(S1): 185-188. (SHI Li, WANG Hong-tao, WANG Hai-tao, et al. Experimental study on fracture toughness of nuclear grade graphite materials [J]. *Nuclear Power Engineering*, 2011, **32**(S1): 185-188. (in Chinese))
- [5] 王涛, 韩彦辉, 朱永生, 等. PFC<sup>2D/3D</sup> 颗粒离散元计算方法及应用 [M]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2020. (WANG Tao, HAN Yan-hui, ZHU Yong-sheng, et al. *Calculation Method and Application of PFC<sup>2D/3D</sup> Particle Discrete Element* [M]. Beijing: China Architecture & Building Press, 2020. (in Chinese))
- [6] 严战友, 王朝辉, 陈恩利, 等. 离散元法的沥青路面车路动力学响应分析[J]. 中国公路学报, 2019, **32**(9): 51-60, 79. (YAN Zhan-you, WANG Zhao-hui, CHEN En-li, et al. Dynamic response analysis of vehicle-load on asphalt pavement based on discrete element method [J]. *China Journal of Highway and Transport*, 2019, **32**(9): 51-60, 79. (in Chinese))
- [7] Bahaaddini M, Sheikhpourkhani A M, Mansouri H. Flat-joint model to reproduce the mechanical behaviour of intact rocks[J]. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 2021, **25**(8): 1427-1448.
- [8] 张宝玉, 张昌锁, 王晨龙, 等. PFC<sup>2D</sup> 平节理模型细观参数标定方法[J]. 计算力学学报, 2021, **38**(5): 665-673. (ZHANG Bao-yu, ZHANG Chang-suo, WANG Chen-long, et al. Calibration method of meso-parameters of PFC<sup>2D</sup> flat-joint model[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2021, **38**(5): 665-673. (in Chinese))
- [9] 郭玮钰, 张昌锁, 王晨龙, 等. 岩石结构面直剪力学特征的颗粒流宏细观分析[J]. 计算力学学报, 2023, **40**(2): 237-248. (GUO Wei-yu, ZHANG Chang-suo, WANG Chen-long, et al. Macroscopic and microscopic analysis of particle flow in direct shear mechanical characteristics of rock structural surface [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2023, **40**(2): 237-248. (in Chinese))
- [10] 杨升, 李晓庆. 基于 PFC<sup>3D</sup> 的砂土直剪模拟及宏细观分析[J]. 计算力学学报, 2019, **36**(6): 777-783. (YANG Sheng, LI Xiao-qing. Shear simulation and macro meso analysis of sand based on PFC<sup>3D</sup> [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2019, **36**(6): 777-783. (in Chinese))
- [11] Di Julio D D, Hawari A I. Examination of reactor grade graphite using neutron powder diffraction[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2009, **392**(2): 225-229.
- [12] Itasca Consulting Group. *Particle Flow Code Version 5 User Manual* [M]. 2016.
- [13] 刘相如, 杨圣奇. 基于正交试验的岩石细观力学参数数值研究[J]. 应用基础与工程科学学报, 2018, **26**(4): 918-928. (LIU Xiang-ru, YANG Sheng-qi. Research on mesomechanical parameters of rock specimens based on orthogonal numerical tests [J]. *Journal of Basic Science and Engineering*, 2018, **26**(4): 918-928. (in Chinese))
- [14] 郭志洋. 核石墨力学性能的尺寸效应[D]. 上海应用技术学院, 2015. (GUO Zhi-yang. The Size Effect of Nuclear Graphite on Mechanical Property [D]. Shanghai Institute of Technology, 2015. (in Chinese))
- [15] Freeman H M, Jones A N, Ward M B, et al. On the nature of cracks and voids in nuclear graphite [J]. *Carbon*, 2016, **103**: 45-55.
- [16] Potyondy D O. A flat-jointed bonded-particle material for hard rock [A]. Proceedings of the 46text-Super Scriptth U. S. Rock Mechanics/Geomechanics Symposium [C]. 2012.
- [17] Poulsen B A, Adhikary D P. A numerical study of the scale effect in coal strength[J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2013, **63**: 62-71.
- [18] 石崇, 徐卫亚. 颗粒流数值模拟技巧与实践 [M]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2015. (SHI Chong, XU Wei-ya. *Numerical Simulation Skills and Practice of Particle Flow* [M]. Beijing: China Architecture & Building Press, 2015. (in Chinese))
- [19] Potyondy D O, Cundall P A. A bonded-particle model



- for rock[J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2004, **41**(8): 1329-1364.
- [20] 周 喻, 吴顺川, 焦建津, 等. 基于 BP 神经网络的岩土体细观力学参数研究[J]. *岩土力学*, 2011, **32**(12): 3821-3826. (ZHOU Yu, WU Shun-chuan, JIAO Jian-jin, et al. Research on mesomechanical parameters of rock and soil mass based on BP neural network[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2011, **32**(12): 3821-3826. (in Chinese))
- [21] Nathan D, Diego M L, Pierce M. PFC<sup>2D</sup> smooth joint contact model numerical experiments[J]. 2008.
- [22] Kornev V M, Zinov'ev A A. Quasi-brittle rock failure model[J]. *Journal of Mining Science*, 2013, **49**(4): 576-582.
- [23] Su R K L, Chen H H, Fok S L, et al. Determination of the tension softening curve of nuclear graphites using the incremental displacement collocation method[J]. *Carbon*, 2013, **57**: 65-78.
- [24] 陈鹏宇, 孔 莹, 余宏明. 岩石单轴压缩 PFC<sup>2D</sup> 模型细观参数标定研究[J]. *地下空间与工程学报*, 2018, **14**(5): 1240-1249. (CHEN Peng-yu, KONG Ying, YU Hong-ming. Research on the calibration method of microparameters of a uniaxial compression PFC<sup>2D</sup> model for rock[J]. *Chinese Journal of Underground Space and Engineering*, 2018, **14**(5): 1240-1249. (in Chinese))
- [25] 方开泰. 均匀设计与均匀设计表[M]. 北京: 科学出版社, 1994. (FANG Kai-tai. *Uniform Design and Uniform Design Table*[M]. Beijing: Science Press, 1994. (in Chinese))
- [26] 沈 杰. 基于 DVC 和 DIC 技术的核级石墨断裂特性研究[D]. 贵州大学, 2022. (SHEN Jie. Study on Fracture Characteristics of Nuclear Grade Graphite Based on DVC and DIC technology[D]. Guizhou University, 2022. (in Chinese))
- [27] Xie T W, Han K H. Two-dimensional numerical model for stability analysis of tunnel face based on particle flow code[J]. *Symmetry*, 2021, **13**(1): 94. (in Chinese))
- [28] 徐世烺. 混凝土断裂力学[M]. 北京: 科学出版社, 2011. (XU Shi-lang. *Fracture Mechanics of Concrete* [M]. Beijing: Science Press, 2011. (in Chinese))
- [29] Yi Y N, Liu G Y, Lin G, et al. Evaluating the dynamic fracture toughness of graphite via accurate determination of the dynamic crack propagation length[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2021, **543**: 152502.

## Macro-microparameters of nuclear graphite PFC<sup>2D</sup> model

LU Zhong-xiao<sup>1,2</sup>, CHEN Hong-niao<sup>\*1,2</sup>, SHEN Jie<sup>1,2</sup>, XU Ying-jie<sup>1,2</sup>, LIU Deng-kai<sup>1,2</sup>

(1. Research Center of Space Structures, Guizhou University, Guiyang 550025, China;

2. Key Laboratory of Structural Engineering of Guizhou Province, Guiyang 550025, China)

**Abstract:** Particle Flow Code (PFC) can well deal with the problem of mechanics of non-continuous media, and has unique advantages in simulating the damage and fracture process of nuclear graphite. In order to increase the convenience of using PFC<sup>2D</sup> to simulate nuclear graphite, the rapid calibration of PFC<sup>2D</sup> micro-parameters can be achieved. Firstly, the orthogonal experiment with four factors and four levels is designed to analyze the relationship between the macro-parameters of nuclear graphite and the micro-parameters of PFC<sup>2D</sup>. Then, based on the established relationship between macro-microparameters of nuclear graphite, the three-point bending test of graphite IG11 is simulated by PFC<sup>2D</sup>, and the correctness of the relationship between macro-microparameters is verified from three aspects: displacement field deformation, load-displacement curve and fracture parameters. The results show that Young's modulus ( $E$ ) increases linearly with the increase of the effective modulus ( $E_c$ ), the tensile strength ( $\sigma_t$ ) increases linearly with the increase of the bond tensile strength ( $\sigma_b$ ) of the flat joint, and Poisson's ratio ( $\nu$ ) firstly increases and then decreases with the increase of the stiffness ratio ( $k_n/k_s$ ). The numerical simulation results of displacement field variation and load-crack opening of displacement (P-CMOD) curve agree well with the test results. In addition, the maximum error of fracture parameters is not more than 3.57%.

**Key words:** nuclear graphite; PFC<sup>2D</sup>; orthogonal experimental design; macro-microparameter relationships

引用本文/Cite this paper:

陆忠晓, 陈红鸟, 沈 杰, 等. 核级石墨 PFC<sup>2D</sup>模型的宏观细观参数分析[J]. *计算力学学报*, 2024, **41**(2): 290-298.

LU Zhong-xiao, CHEN Hong-niao, SHEN Jie, et al. Macro-microparameters of nuclear graphite PFC<sup>2D</sup> model[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2024, **41**(2): 290-298.