

基于离散元方法的氚增殖包层球床堆积结构的研究

巩保平, 冯勇进, 廖洪彬, 王晓宇, 冯开明

(核工业西南物理研究院, 四川 成都 610041)

摘要:在固态氚增殖包层中, 氚增殖剂和中子倍增剂均以球形颗粒的形式堆积在腔体中。分析包层中球床的堆积结构有助于研究包层中球床的热机械性能, 有助于分析球床中提氚气体的流动特性。本文基于离散元方法 (DEM) 进行了球床堆积的数值模拟, 分析了球床的堆积因子和配位数分布, 并应用离散元法研究了 HCCB TBM 中 U 形氚增殖剂球床的堆积结构。结果表明: 球床容器尺寸与颗粒大小对球床的堆积密度影响较大, 提高球床-颗粒直径比可显著提高球床的堆积因子。球床中配位数频率最高的为 6 和 7, 提高球床-颗粒直径比平均配位数会有所增加。在靠近容器壁面区域, 球床堆积因子呈现出振幅逐渐减小的振荡特性, 并在球床内部区域趋于稳定。在靠近侧壁面时振荡限制在约 3 个粒径范围内, 在靠近底面时振荡限制在约 5 个粒径范围内。球床堆积从靠近壁面处的规则有序堆积逐渐过渡到内部区域的随机均匀堆积, 表现出明显的壁面效应。壁面对球床与壁面间的换热性能和近壁区域提氚气体的流动特性有影响, 将在进一步工作中进行研究。

关键词:球床堆积; 堆积结构; 氚增殖包层; 离散元方法

球形颗粒床在化工、能源、医药、建筑等领域具有广泛的应用。如化工中的接触式催化反应床, 干燥器, 颗粒床过滤器, 高温气冷堆中的堆芯部件, 球床水冷反应堆等均采用球形颗粒堆积床的形式。在核聚变反应堆的固态氚增殖包层中的氚增殖剂 (Li_4SiO_4 , Li_2TiO_3 , Li_2O 等锂基陶瓷) 和中子倍增剂 (Be 或 Be_{12}Ti) 亦采用球形颗粒的形式填充在氚增殖区和中子倍增区^[1]。其中中子倍增剂与氚增殖剂球床的堆积因子和氚增殖剂中 ^6Li 的富集度影响着包层的氚增殖率, 而球床的热机械性能、颗粒间传热和颗粒-壁面传热、扫氚氦气的流动特性等与球床的堆积结构有着密切的关系^[2], 因此球床的堆积结构影响着氚增殖包层的设计。

目前多位学者已通过实验和模拟对球床堆积结构进行了研究。Reimann^[3] 和 Abou-Sena^[4] 等通过堆积实验研究了填充工艺、颗粒形状、颗粒材料等对球床堆积因子的影响。通过将 X 射线断层扫描技术应用到球床堆积的研究, Reimann^[5] 等研究了球床的配位数、接触角、颗粒分布、堆积因子等微观结构信息, F. Scaffidi-Argentina^[6] 等研究了二元铍球床的堆积状态。Yixiang Gan^[7] 和 Lei Chen^[8] 等通过数值模拟研究了一元和二元球床的堆积结构。以上研究中大多以方形和圆柱形等简单球床为研究对象, 而对较复杂形状球床的研究较少。在氦冷固态陶瓷氚增殖剂实验包层模块 (HCCB-TBM) 的概念设计中氚增殖区为 U 形结构, 因此开展 U 形球床堆积结构的研究具有重要的实际意义。

针对 U 型球床的堆积结构, 曾在文献[9-10]中对其局部弯曲区域做了初步研究, 在此基础上又做了进一步研究。首先研究了圆柱形球床的堆积结构, 分析了不同球床-颗粒直径比对球床堆积因子和配位数的影响, 并通过与实验结果进行比较验证模拟的有效性。然后分析了球床中的接触力的分布。最后详细分析了 U 形硅酸锂球床的堆积结构。

1 离散元法基本原理

离散元方法是一种研究散体颗粒材料静态堆积形态和动态演变规律的高校数值工具^[11]。离散元方法的基本单元为单个的颗粒, 假设颗粒为材质均匀的刚性球体, 颗粒之间只有微量重叠, 可以认

作者简介: 巩保平 (1990—), 男, 甘肃天水人, 硕士, 实习研究员, 现主要从事聚变堆功能材料和固态包层球床性能的研究

基金项目: 国家磁约束核聚变能发展研究专项 (2013GB108001, 2014GB111001)

为是点接触。模拟过程中通过颗粒所受到的接触力和力边界条件确定颗粒所受到的合力,然后根据颗粒运动方程计算颗粒的位移、速度等信息,再根据位移和位移边界条件判定颗粒间的接触状态,由接触力-位移关系理论计算颗粒间的接触力。通过循环迭代不断更新颗粒位置、速度、受力情况等信息,使得颗粒系统达到稳定平衡状态,离散元方法中的计算循环如图 1 所示。在计算过程中可以输出颗粒信息,经过数据处理就可以得到球床的堆积状态和动态演化过程。

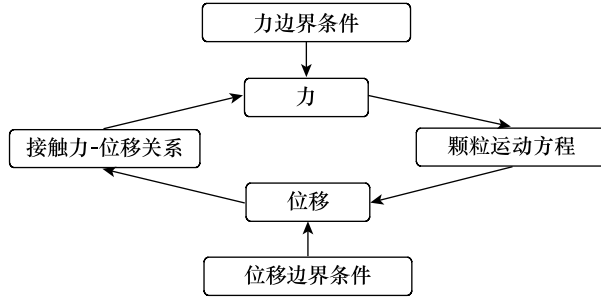


图 1 离散元方法中的计算循环

颗粒的运动遵循牛顿第二定律,由此可得球床中每个颗粒的运动方程为:

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_{j=1}^n F_{cji} + m_i g$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{j=1}^n r_{ij} \times F_{cji}$$

式中, m_i 和 I_i 分别为颗粒 i 的质量和转动惯量; v_i 和 ω_i 分别为颗粒 i 的平移速度和转动速度; F_{cji} 为颗粒 i 与颗粒 j 的接触力; r_{ij} 为颗粒 i 指向颗粒 j 球心的向量; j 为与颗粒 i 接触的所有颗粒; g 为重力加速度。

颗粒之间的接触力 F_c 可以分为法向接触力 F_{cn} 和切向接触力 F_{ct} , 如图 2 所示。当法向接触力和切向接触力满足 $|F_{ct}| > \mu |F_{cn}|$ 时, 颗粒会发生滑动, μ 为摩擦系数。法向接触力和切向接触力可根据 Hertz-Mindlin 接触理论计算^[9-11], 其中 F_{cn} 和 F_{ct} 可分别表示为:

$$F_{cn} = k_n \delta_{nij} - \eta_n v_{nij}$$

$$F_{ct} = k_t \delta_{tij} - \eta_t v_{tij}$$

其中, k_n 为法向弹性系数(又称法向刚度); k_t 为切向弹性系数(又称切向刚度); δ_{nij} 和 δ_{tij} 分别为两接触颗粒的法向重叠量和切向位移矢量; η_n 为法向接触阻尼系数, η_t 为切向接触阻尼系数, v_{nij} 和 v_{tij} 分别为两接触颗粒相对速度的法相分量和切向分量, 具体计算公式可以参考文献[9-10]。

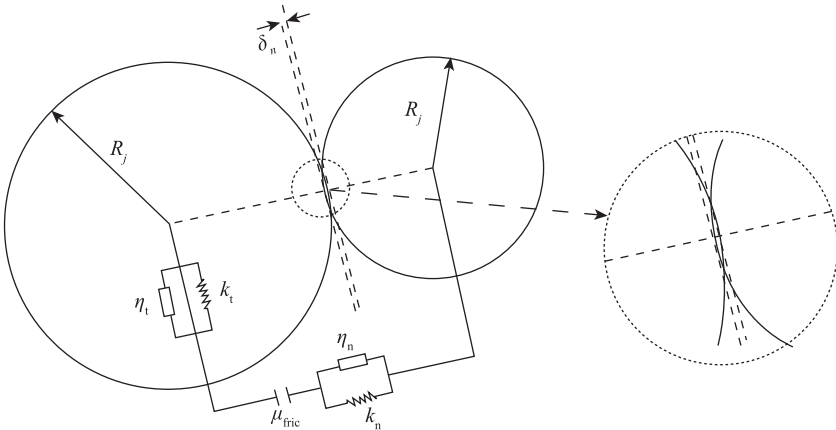


图 2 颗粒间接触模型

在本文中,主要从堆积因子、配位数这两个方面对球床的堆积结构进行详细分析。本文模拟所用的离散元程序为 LIGGGHTS^[13]。

2 球形颗粒堆积

包层中的氚增殖剂微球和中子倍增剂微球随机堆积于腔体中形成球床。因此,在本文中利用 DEM 原理模拟微球在腔体中的随机堆积过程,并分析达到稳定堆积状态时的球床堆积结构。首先在计算域内的容器顶部随机生成一定数量的颗粒,然后给颗粒施加重力并给定初速度使其加速下落,最后稳定堆积在容器底部。在堆积过程中,可以每隔一定时间再次添加一次颗粒,多次添加以提高球床规模。同时在添加过程中监测整个球床的总动能,当整个球床的总动能趋近于 0 时,球床中颗粒的位置基本不再变化,即可认为球床堆积达到稳定状态,即可分析球床的堆积结构。

模拟中采用的材料参数见表 1。其中杨氏模量和泊松比采用文献[13]中的推荐值,由于目前没有氚增殖剂微球的摩擦系数和恢复系数的实验报道,所以摩擦系数暂取 0.1,恢复系数暂取 0.9,颗粒材料的密度为熔融喷雾发制备的 Li_4SiO_4 微球的密度。

表 1 模拟采用的材料参数

杨氏模量/GPa	泊松比	密度/(kg/m ³)	摩擦系数	恢复系数
90	0.24	2 323	0.1	0.9

首先模拟分析了不同球床直径与颗粒直径比的圆柱球床,将模拟结果与文献中的实验结果进行比较,对模拟方法进行校验和验证。然后模拟了 U 形容器中的球床堆积,并分析了球床的堆积因子分布、配位数分布等细观结构特征。

3 球床堆积结构分析

3.1 模拟结果验证

3.1.1 平均堆积因子

堆积因子(Packing Factor, PF; 又名填充率, Packing Fraction)是反应球床堆积密实程度的参数、其定义为球床中颗粒总体积与球床体积之比。其大小受到颗粒形状、颗粒大小、容器形状等多种因素的影响。在本文中模拟了不同球床尺寸与颗粒尺寸下的圆柱形和方形球床的三位随机堆积,其球床的平均堆积因子随球床与颗粒直径比的变化情况如图 3 所示。

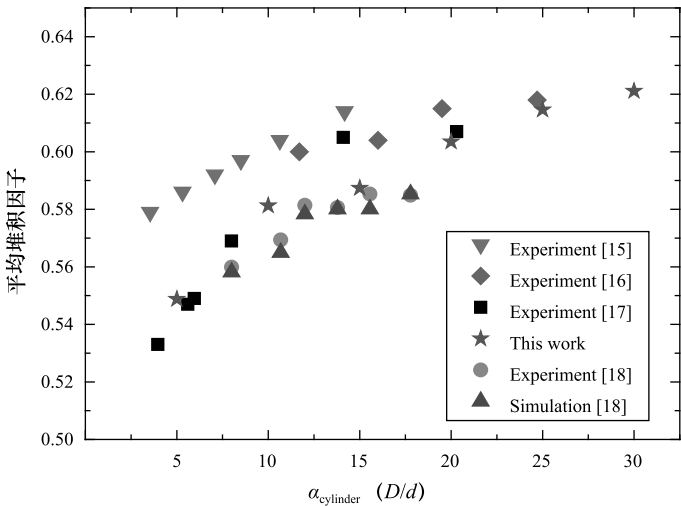


图 3 平均堆积因子随球床-颗粒尺寸比的变化情况

圆柱形球床是在工业中应用很广泛的典型球床,已有较多研究其球床结构的报道。为了验证本文所用离散元方法的可靠性和准确性,特将圆柱形球床中的模拟结果和文献[15-18]中的实验结果进行比较,如图 3 所示。可以看出模拟结果与文献报道的实验结果获得了很好的一致性,圆柱形球床中平均堆积因子随着尺寸比的增加逐渐增加。这主要是因为球床的堆积结构受到了壁面效应的影响,在靠近容器壁面的区域球床堆积较为规则和疏松,堆积因子剧烈变化;在球床内部区域颗粒则随机均匀堆积,堆积因子趋于稳定。壁面效应的影响将在 3.2.2 节详细分析。

3.1.2 配位数

配位数(Coordination Number,CN)是球床中与指定颗粒相接触的其他颗粒数,在计算中考虑 $0.02\ d$ 的间隙。它解释了球床中颗粒之间的接触关系,能反应球床中力的传递和强度等特性^[19]。在简单立方规则堆积中颗粒的配位数全部为 6,体心立方中的配位数为 8,而致密堆积面心立方和球床中的配位数达到 12。

图 4 所示为圆柱形随机堆积球床中的配位数分布情况。其中图 4(a)和图 4(b)分别为实验测量的非压缩球床和压缩球床中的配位数分布^[5,20-21]。可以看出,非压缩球床中频率最高的配位数为 6 和 7,压缩球床中的配位数为有所增大,这主要是因为球床受到压缩后颗粒之间的接触力增大,在接触点附近颗粒发生变形,从而导致球床的配位数有所增大。但从图 4(b)可以看出其频率最高的配位数任为 6 和 7。在图 4(a)中将本文中的离散元模拟结果与实验结果进行对比,可以看出离散元模拟与实验结果具有很好的一致性,进一步验证了离散元模拟结果的可靠性和准确性。

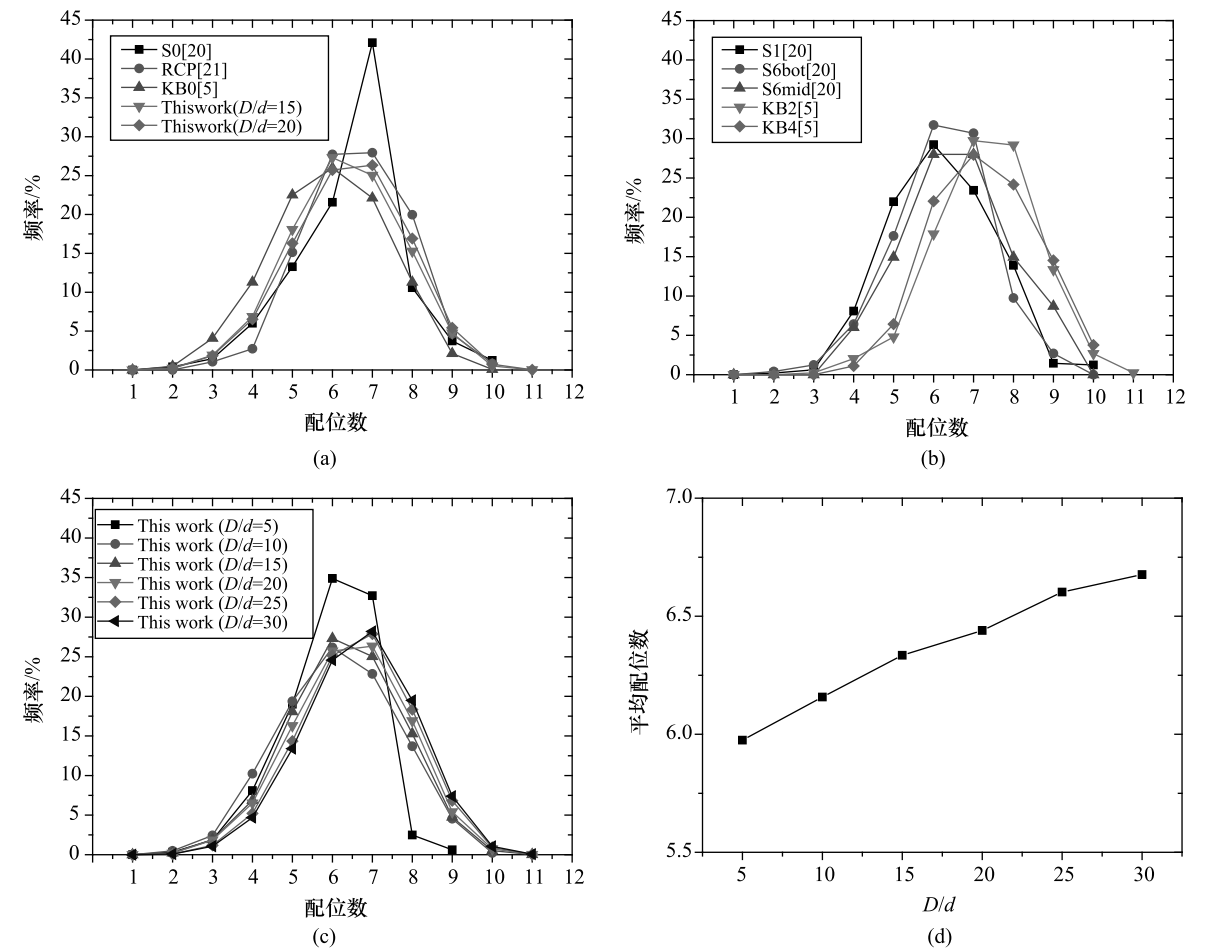


图 4 球床中的配位数分布及其变化

图 4(c)所示为不同球床-颗粒直径比下的非压缩球床中的配位数分布。从图中可以看出,逐渐增大球床-颗粒直径比,球床中频率最高的配位数由 6 逐渐增大为 7,同样球床中的平均配位数也逐渐增大[见图 4(d)]。这与图 3 中球床平均堆积因子随球床-颗粒直径比增大而增大相对应,都是由球床壁面效应引起的。在靠近壁面区域颗粒堆积较为疏松,局部平均堆积因子较低。当球床-颗粒直径比较低时,壁面效应影响区在球床中的占比较大。当球床-颗粒直径比逐渐增大时,壁面效应影响区在球床中的占比逐渐减小,所以球床平均堆积因子和平均配位数都逐渐增大。

3.2 U 型氚增殖剂球床堆积结构

3.2.1 球床三维结构

在中国氦冷固态陶瓷增殖剂实验包层中,氚增殖区为 U 形结构^[1],因此本文利用离散元方法模拟研究了 U 形氚增殖剂球床的堆积结构。图 5(a)和图 5(b)所示为 U 形 Li_4SiO_4 球床的三维结构。由于计算资源的限制,为了减小计算规模本次模拟中采用 2 mm 的颗粒;同时为了研究 U 形球床中长臂区域大小的影响,在模拟时不同程度地减小了长臂区域(如 Case01 和 Case02,见图 5)。其中 Case01 种的颗粒为 76 193 个,Case02 中的颗粒数为 105 358 个。球床的高度为 50 个颗粒直径。

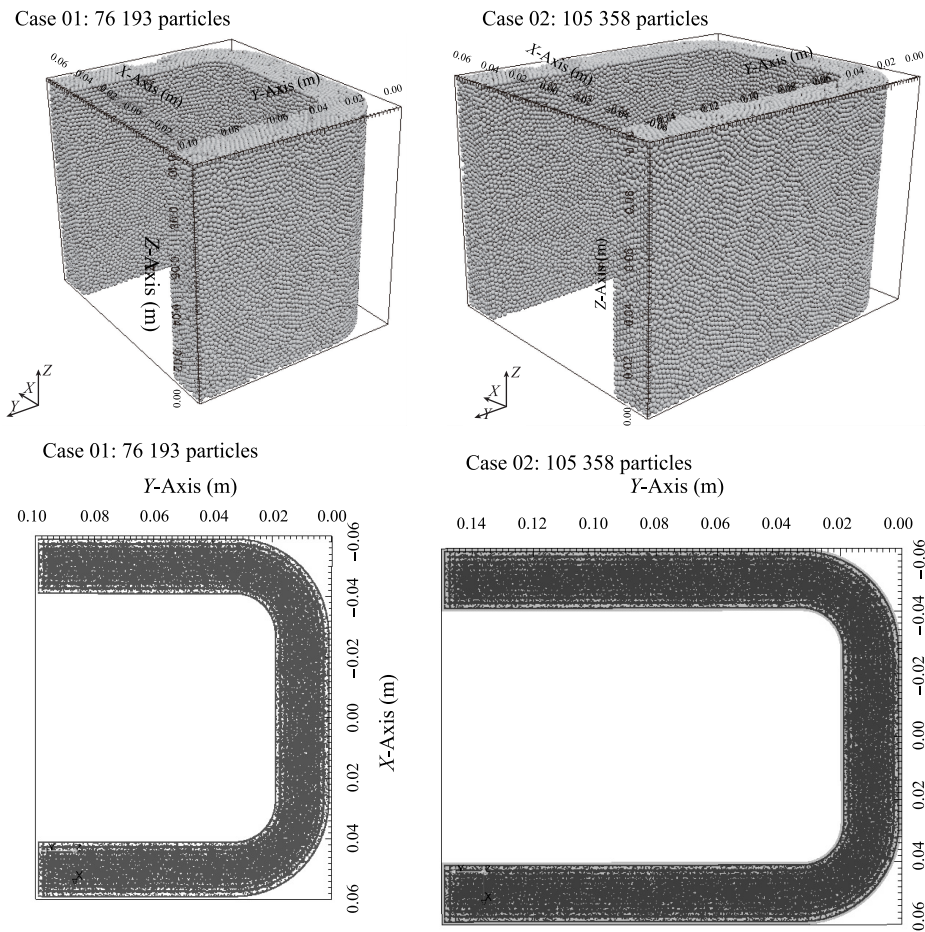


图 5 U 型氚增殖剂球床的堆积结构
三维结构(上),球心分布(下)

将球床中所有颗粒的球心投影到球床底部壁面,可看到球床内部的堆积状态,如图 5(c)和图 5(d)所示。可以看到与侧壁接触的颗粒球心组成了一条线,其到壁面的距离等于颗粒半径,而这部分颗粒的堆积较为规则,颗粒球心表现出明显的分层现象。随着到壁面距离的增加,颗粒堆积从靠近壁

面处的规则堆积逐渐过渡到了内部区域的随机均匀堆积。当把球心投影到侧壁面时可以观察到类似的规律。这也是三维随机堆积中壁面效应的宏观表现。

3.2.2 堆积因子分布

图 6 所示为球床中的堆积因子分布,其中图 6(a)和图 6(b)分别是局部堆积因子随着到内侧壁面距离和到底部壁面距离的变化情况。图中的距离做了无量纲化处理,其单位为颗粒直径 d 。球床的平均堆积因子为 0.630 3。从图 6 中可以看出,堆积因子在靠近壁面的区域剧烈震荡,在内部区域逐渐稳定并趋向平均堆积因子。从图 6(a)可以看出,堆积因子在靠近侧壁面时均出现振荡,其振荡约在靠近侧壁面 3 个颗粒直径的范围内,离壁面越远振荡幅度越小,逐渐在内部区域趋于稳定。从图 6(b)可以看出,在靠近底部壁面和顶部壁面时堆积因子同样出现幅度逐渐减小的振荡现象,由于重力的影响其振荡约限制在靠近底/顶部壁面 5 个颗粒直径范围内,其振荡范围有所扩大。Case01 和 Case02 的结果基本一致,这说明 U 形球床中直臂区域的大小对球床堆积结构的影响不大。另与文献 [9]中结果相比,在靠近顶部区域堆积因子没有迅速减小而是出现振荡现象,主要是因为在本次模拟中改变了填充策略,在顶部区域球床堆积更为密集,所以出现和底部壁面附近相似的规律。在靠近容器壁面处颗粒球心的分布和堆积因子的振荡现象是球床堆积中壁面效应最直观的表现。

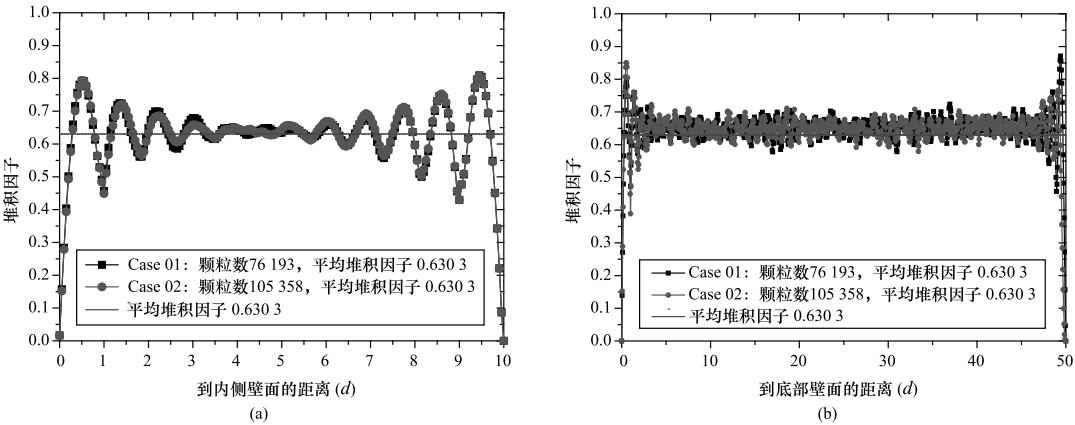


图 6 U 形气增殖剂球床的堆积因子分布

3.2.3 配位数分布

配位数是描述球床细观结构的一个重要指标。图 7 所示为 U 形球床中的配位数分布。其中

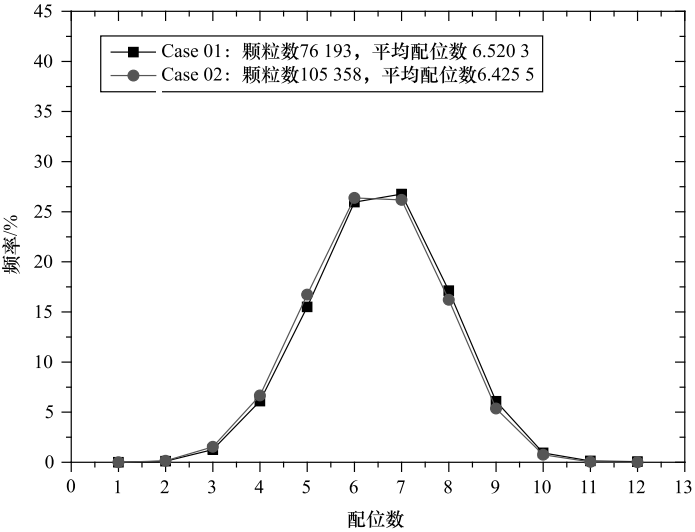


图 7 U 形气增殖剂球床的配位数分布

Case01 中的平均配位数为 6.520 3, Case02 中的平均配位数为 6.425 5, 两者的配位数分布基本一致。在 Case01 中频率最高的配位数为 7, 其频率为 26.76%, 其次为 6, 其频率为 25.96%。在 Case02 中频率最高的配位数为 6 和 7, 它们的频率非常接近, 分别为 26.38% 和 26.18%。

4 结论

本文通过离散元方法对氦增殖包层中的球床堆积进行了模拟, 并分析了球床的堆积结构。得到以下结论:

- 1) 通过将模拟结果与实验结果进行比较, 验证了本文模拟方法的可靠性和准确性。
- 2) 在圆柱形球床中, 平均堆积因子随着球床-颗粒直径比的增大而升高, 其频率最高的配位数为 6 和 7, 对球床进行压缩会增大球床的配位数。
- 3) U 形球床的堆积结构表现出明显的壁面效应: 在靠近壁面处, 颗粒堆积结构较为规则和疏松, 颗粒球心分布呈现出明显的分层现象, 球床堆积因子呈现出幅度逐渐减小的振荡趋势。
- 4) 两例 U 形球床的堆积因子和配位数分布获得了基本相同的结果, 说明直臂区域的大小对球床堆积结构的影响较小。

参考文献:

- [1] Kaiming Feng, Xiaoyu Wang, Yongjin Feng, et al. Current progress of Chinese HCCB TBM program [J]. Fusion Engineering and Design, 2016, s109-111:729-735.
- [2] Ying A, Reimann J, Boccaccin L, et al. Status of ceramic breeder pebble bed thermo-mechanics R&D and impact on breeder material mechanical strength [J]. Fusion Engineering and Design, 2012, 87: 1130-1137.
- [3] J. Reimann, Ali Abou-Sena, Nippen Rainer, et al. Pebble bed packing in prismatic containers [J]. Fusion Engineering and Design, 88(2013): 2343-2347.
- [4] Abou-Sena Ali, Neuberger Heiko, Ihli Thomas. Experimental investigation on the possible techniques of pebbles packing for the HCPB Test Blanket Module [J]. Fusion Engineering and Design, 2009, 84: 355-358.
- [5] Reimann J, Pieritz R A, Ferrero C, et al. X-ray tomography investigations on pebble bed structures[J]. Fusion Engineering and Design, 2008, 83:1326-1330.
- [6] Scaffidi-Argentina F, Piazza G, Goraieb A, et al. Non destructive three dimensional analysis of the packing of a binary beryllium pebble bed[J]. Fusion Engineering and Design, 2001, 58-59:707-712.
- [7] Gan Yixiang, Kamlah Marc, Reimann J. Computer simulation of packing structure in pebble beds [J]. Fusion Engineering and Design, 2010, 85: 1782-1787.
- [8] Lei Chen, Youhua Chen, Kai Huang, et al. Investigation of the packing structure of pebble beds by DEM for CFETR WCCB[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 2016,53(6):803-808.
- [9] 巩保平, 冯勇进, 刘洋, 等. HCCB-TBM 包层 Li4SiO4 球床堆积结构的数值模拟[J]. 核聚变与等离子体物理, 2017,37(2):173-180.
- [10] Baoping Gong, Yongjin Feng, Hongbin Liao, et al. Discrete element modeling of pebble bed packing structures for HCCB TBM, Fusion Engineering and Design, 2017, 121: 256-264.
- [11] 孙其诚, 王广谦. 颗粒物质力学导论 [M]. 北京: 科学出版社, 2009: 59-72.
- [12] Heikki Suikkanen, Jouni Ritvanen, et al. Discrete element modeling of pebble packing in pebble bed reactors [J]. Nuclear Engineering and Design, 2014, 273: 24-32.
- [13] Kloss C, Goniva C, Hager A, et al. Models, algorithms and validation for open source DEM and CFD-DEM [J]. Progress in Computational Fluid Dynamics, 2012, 12(2/3):140-152.
- [14] Gan Yixiang, Kamlah Marc. Discrete element modelling of pebble beds: With application to uniaxial compression tests of ceramic breeder pebble beds [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2010, 58: 129-144.
- [15] Khalil A, Kassem M A, Salama M. Experimental evaluation of packed bed heat transfer relations[J]. Journal of Engineering and Computer Sciences, Qassim University, 2008,1(1):43-55.
- [16] Damjan Nemec, Janez Levec. Flow through packed bed reactors;1. Single-phase flow[J]. Chemical Engineering

Science, 2005, 60: 6947-6957.

- [17] Gary E. Mueller, Numerical simulation of packed beds with monosized spheres in cylindrical containers[J]. Powder Technology, 1997, 92:179-183,38.
- [18] Langston P, Kennedy A R. Discrete element modelling of the packing of spheres and its application to the structure of porous metals made by infiltration of packed beds of NaCl beads[J]. Powder Technology, 2014, 268:210-218.
- [19] 黄晚清, 陆阳. 散粒体重力堆积的三维离散元模拟[J]. 岩土工程学报, 2006, 28(12):2139-2143.
- [20] Reimann J, Pieritz R A, Rolli R. Topology of compressed pebble beds [J]. Fusion Engineering and Design, 2006, 81: 653-658.
- [21] Bernal J, Mason J. Co-ordination of randomly packed spheres [J]. Nature, 1960, 188(10): 910-911.

Numerical investigation of packing structures of packed pebble bed for tritium breeder blanket based on DEM

GONG Bao-ping, FENG Yong-jin, LIAO Hong-bin,
WANG Xiao-yu, FENG Kai-ming

(Southwestern Institute of Physics, Chengdu 610041, China)

Abstract: The packing structures of pebble beds in tritium breeder blanket are important to estimate the thermal mechanical properties of pebble beds and the flow characteristics of purge gas. The discrete element method (DEM), in this work, was applied to simulate the pebble packing structures of pebble bed. The influence factors and the packing structures of pebble bed were simulated and analyzed. And the packing structures of U-shaped tritium breeder pebble beds for HCCB TBM were simulated and analyzed by DEM. The current results obtained in this study obviously show that the container size and pebble size have great influences on the packing structure of pebble bed. With the increase of diameter ratios of cylinder container to pebble diameter the average packing factors can be significantly increased. Close to the container walls, the oscillating and damping characteristics of packing factors was observed. And the packing factor reached stable in the inner bulk region. The ordered packing in the near wall region of pebble bed gradually converted into the random packing in the inner bulk region. The obvious wall effects of packing structures were observed in U-shaped pebble bed. The wall effects, which affect the heat transfer properties between pebble beds and walls and the flow characteristics of purge gas in the near wall regions, will be investigated in the further works.

Key words: pebble bed packing; packing structure; tritium breeder blanket; Discrete Element Method