



若手研究者・技術者の取り組みと将来の夢

世界一の粒子シミュレーションに向かって

Toward the Best Simulation for Analyzing Particle Behavior

三尾 浩
Hiroshi Mio

新日鐵住金(株) 技術開発本部
プロセス研究所 製鉄研究開発部
主幹研究員

1 はじめに

筆者は現在所属している製鉄部門において、粒子シミュレーションを用いた高炉装入物分布推定モデルの開発を行っている。本稿では、その概要と課題、および、粒子シミュレーションに対する筆者の思いについて簡単に紹介したい。

2 粒子シミュレーション

高炉は鉄鉱石を還元し、銑鉄を取り出す向流型反応装置であり、炉頂部に鉱石とコークスを層状に装入し、羽口から高温のガスを吹き込むことが基本的な仕組みである。高炉操業において、炉内ガスの通気性は非常に重要なファクターであり、安定したガス流れを保つことが、高炉の安定操業や高効率操業には必要不可欠である。そのため、炉内に装入される鉱石やコークスの流動挙動を把握し、これら装入物の装入位置、中心方向への流れ込み、流動時の粒度偏析、さらには鉱石装入時のコークス崩れ等を的確に予測し、炉内半径方向に適切なO/C分布(鉱石/コークス)を形成させる必要がある。一方、半径方向には適切なO/C分布を造り込むが、円周方向には偏差は生じさせないようにすることが重要である。しかしながら、高炉で使用している鉱石やコークスをはじめとした粒状体は、流動時に粒子径差、密度差、表面性状や形状の違いにより偏析が生じる。そのため、炉内装入時だけでなく、原料ホッパーからベルトコンベア搬送、サージホッパーや炉頂バンカーなど、炉内へ搬送するまでの幾つかの貯槽においても、特定の粒子径、あるいは、特定の密度の粒子が極端に偏析した状態となることがある。従って、炉内への装入時間によって、粒子径や各種粒子の混合量が変化することとなり、このことが円周方向の偏差を引き起こす原因にもなる。そのため、これらを的確に予測し、制御するためツールが必要である。これまでは数学モデルを用いた2次元的な予測

ツールが開発されてきているが、筆者は、DEM¹⁾(Discrete Element Method、離散要素法)を用いたコンピュータシミュレーションにより、高炉装入系統における粒子挙動の3次元解析を進めている。

DEMはCundallらにより提案されたシミュレーション法であり、粒子群の挙動を各粒子に作用する全ての力(例えば、接触力、クーロン力、付着力、磁気力、流体抵抗力等)をモデル化し、個々の粒子に対する運動方程式を解くことにより、全体の挙動を解析する手法である。DEMは粒子を離散体として扱うため、連続体近似では再現できない個々の粒子挙動を精度良く解析することができ、鉄鋼分野に限らず、世界中で多くの研究(混合、輸送、粉碎、流動層、血流等)が進められている。しかし、全ての粒子を離散体として扱い、全作用力を逐次計算するという特徴がゆえ、計算対象となる粒子数の増加が計算負荷の増加となる。よって計算可能粒子数には限界があり、微粒子を扱うプロセスや、広い粒子径分布を持つ粒子、あるいは、大規模なプロセスを扱うことは非常に困難とされている。高炉プロセスにおいては、これらの問題は非常に深刻である。プロセス全体の規模が大きいこと、粒子径の分布が広いこと、扱う量が大量であることから、解析対象となる粒子数は莫大(数億~兆)となるためである。また、現象を解析する時間スケールも長く、“min”以上のオーダーが必要であることも大きな障害となる。5mm程度の粒子を計算する場合、通常 Δt は“ μsec ”のオーダーとなる。この Δt で“数min”の現象をシミュレートするとなると、総ステップ数は非常に大きくなる。そのため、 Δt を大きくし、計算総ステップ数を減らすという対策が取られることが多い。DEMでは粒子間の反発力を、バネとダッシュポットのVoigtモデルで記述しているが、このバネ定数(通常は粒子のヤング率やポアソン比に依存する)を小さく見積もることにより、 Δt を大きく設定できるようになる。これは計算精度を犠牲にし、高速化するという手段である。すなわち、バネを小さく

設定するという事は、粒子間の反発力の“効き”を弱くしているということであり、ある程度オーバーラップを許可していることとなる。言い換えれば、粒子を軟らかくしているということになる。このような処理をしても、実現象と定量的に比較、検証を行えば、十分に実現象を再現できることもある。しかしながら、これは既知の現象に対しては“合わせ込む”ことができるというだけであり、未知なるものの予測に対して、不変的なパラメータで的確な答えを導き出すことができるかは疑問が残る。従って、このように材料定数を変えて Δt を大きく設定して計算を速くすることは、根本的なDEMの課題解決策ではない。計算精度を保ったまま、DEMの高速化を行うことが必要不可欠なのである。そうしなければ、DEMというシミュレーションは、ビジュアル的な結果は示せて、なんとなく雰囲気は再現できているが、定量的には物足りない結果となり、結局、粒子シミュレーションは使えないという評価に陥ってしまう。

筆者の開発しているDEMは、プログラムのアルゴリズムを見直すことで、計算精度を保ったまま、ある程度の高速化を達成している²⁻⁴⁾。高炉プロセスを満足に解析するには、まだまだ不十分な計算速度であるが、一般的なソフトウェアと比較しても十分に速い。本プログラムを用いて、Figs.1-3に示すような高炉の装入物分布推定シミュレーションを開発中である⁵⁻⁷⁾。Fig.1はサージホッパーからの粒子排出挙動の解析例である。粒子径分布を持った焼結鉱をサージホッパーに装入し、その後、炉頂に搬送するために、サージホッパー下部にあるベルトコンベアに排出している様子である。このサージホッパーからの排出時における各粒子径毎の排出量や、平均粒子径の時間変化等を得ることができる⁷⁾。Fig.2にはサージホッパーから排出された粒子が炉頂まで運ばれ、並列ホッパーに装入されていく様子を解析した例を示してい

る。この装入過程においても、ホッパー内斜面流動時に粒度偏析が生じ、ホッパー内に粒度の異なる状態で配置されることになる⁷⁾。Fig.3には並列ホッパーから排出され、旋回シュートを通じて炉内に装入されていく様子を示している。炉内においても、堆積層が中心方向に傾斜していることにより、粒子が流れ込み、その際に偏析を生じる。これら、サージホッパー装入／排出、並列ホッパー装入／排出、炉内装入、それぞれのプロセスにおいて、都度偏析が生じるのであるが、シミュレーションであれば、各粒子に対して、各プロセスでの偏析の履歴を追いかけることが可能である。従って、炉内に所望の装入物分布を造りたい時には、どのように搬送すれば良いかが推定できるということになる。

DEMによる装入物分布推定技術の開発は、シミュレーションだけの議論ではなく、縮尺モデル実験装置を用いて精力的に比較、検証を行っている。例えば、Fig.4に示すように旋回シュートからの粒子の飛び出し挙動を高速カメラで撮影し、画像よりPIV (Particle Image Velocimetry、粒子画



Fig.2 Snapshot of particle behavior charging into parallel hopper

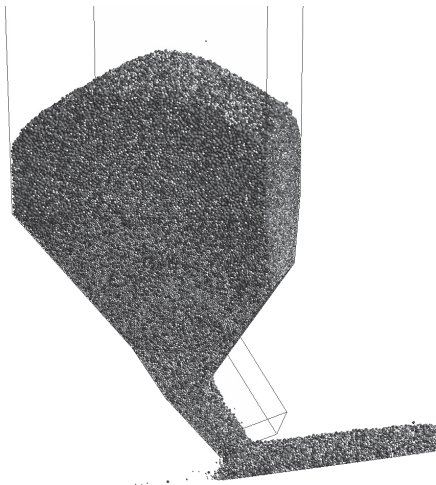


Fig.1 Snapshot of particle behavior discharging from surge hopper

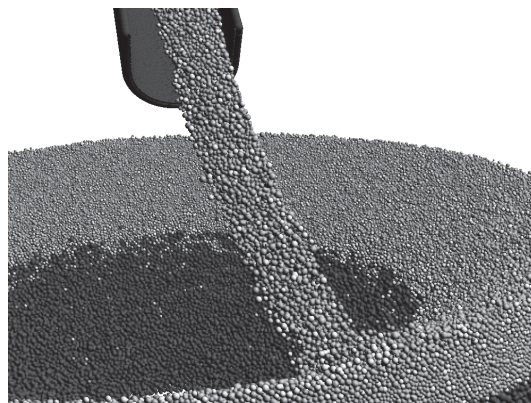


Fig.3 Snapshot of particle behavior charging into blast furnace

像流速測定法)で速度を求め、DEMでの結果との比較を行うことにより、シミュレーションの精度アップを図っている⁸⁾。DEMでは一般的に粒子を球形として計算するが、鉱石やコークス等の高炉原料は球形とはほど遠い形をしている。従って、粒子形状の違いを適切に表現するために、実験との比較を今後も積極的に行っていき、高精度な粒子シミュレーションの構築、さらには、100t以上の高炉原料を高速にシミュレーションできるアルゴリズムの構築を進めていく必要がある。

3 おわりに

最後に、大変恐縮ではあるが筆者の略歴について簡単に書かせて頂きたい。筆者は2009年1月に新日本製鐵(株)に入社した。前職は同志社大学でポスドクとしてJST(科学技術振興機構)による微粒子に関する産官学連携プロジェクトに携わっており、主に、電子写真プロセスにおける粒子挙動の解析を行っていた^{9,10)}。対象としていた粒子はトナーであり、粒子径は数十 μm 以下であった。その筆者が新日鐵に入社し、前記のように高炉における装入物分布推定シミュレーション開発に従事することとなった。対象とする粒子はmmオーダーになり、装置規模も数十m、扱う原料の重量も百t以上という単位となり、これまでとは比較にならない程規模が大きくなり、シミュレーションに求められるスペックも上昇したと思う。本研究は、入社して始めたのではなく、当時所属していた研究室と新日鐵との間で進めていた共同研究として関わっていたので、取っ掛かりは速かった。しかし、大学の研究から、企業の研究へと移動し、実プロセスの規模と、そこで生じている現象を目の当たりにした時、非常に大きなショックを受けたのを記憶している。それは、それまで大学

の実験室において、手作りの小さな装置でDEMの精度検証のために実験を行っていたが、その実験では、DEMとのズレは小さく、単なるエラーバーとして整理し、信頼性は十分にあるものと考えていた。しかしながら、それよりもはるかに大きなスケールとなると、そのエラーバーと考えていたズレは、もはや単なる“エラーバー”レベルではなく、“全く違う”レベルということであった。このショックは、その後の研究にとって非常に大きかった。原点に戻り、現場、現物を直視し、比較、検証を行うことの重要性を改めて認識したのである。幸いにも、今置かれている環境は“現場で使える粒子シミュレーション”を完成させるのに非常に恵まれた環境であると言える。この環境を最大限に利用して、実現象を正確に再現できる世界に秀でた“使える粒子シミュレーション”の構築に今後も邁進していきたい所存である。

参考文献

- 1) Cundall, P.A. and O.D.L.Strack: Geotechnique, 29, (1979), 47.
- 2) H.Mio, A.Shimosaka, Y.Shirakawa and J.Hidaka: J. Chem. Eng. Jpn., 38, (2005), 969.
- 3) H.Mio, A.Shimosaka, Y.Shirakawa and J.Hidaka: J. Chem. Eng. Jpn., 39, (2006), 409.
- 4) H.Mio, A.Shimosaka, Y.Shirakawa and J.Hidaka: Adv. Powder Technol., 18, (2007), 441.
- 5) H.Mio, S.Komatsuki, M.Akashi, A.Shimosaka, Y.Shirakawa, J.Hidaka, M.Kadowaki, S.Matsuzaki and K.Kunitomo: ISIJ Int., 49, (2009), 479.
- 6) H.Mio, S.Komatsuki, M.Akashi, A.Shimosaka, Y.Shirakawa, J.Hidaka, M.Kadowaki, H.Yokoyama, S.Matsuzaki and K.Kunitomo: ISIJ Int., 50, (2010), 1000.
- 7) H.Mio, M.Kadowaki, S.Matsuzaki and K.Kunitomo: Miner. Eng., 33, (2012), 27.
- 8) 三尾浩, 門脇正具, 松崎眞六, 樋口謙一: CAMP-ISIJ, 25, (2012), 294.
- 9) H.Mio, R.Higuchi, W.Ishimaru, A.Shimosaka, Y.Shirakawa and J.Hidaka: Journal of the Imaging Society of Japan, 48, (2009), 9.
- 10) H.Mio, J.Kawamura, R.Higuchi, A.Shimosaka, Y.Shirakawa and J.Hidaka: Journal of Imaging Science & Technology, 53, (2009), 010505.

(2013年6月24日受付)

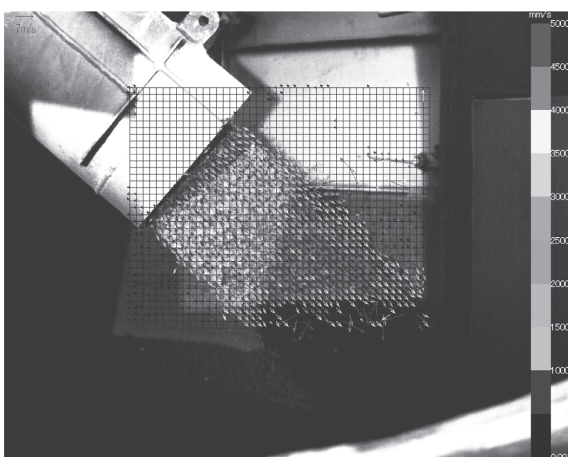


Fig.4 Particle discharging behavior recorded by high-speed video camera with velocity vector analyzed by PIV

先輩研究者・技術者からのエール

九州大学 大学院工学研究院 材料工学部門 教授

国友 和也

大 学でポスドクをしていた三尾さんを産業界に引っ張り込んだ張本人の私が、その数年後に会社を退職し大学に移ってしまったのは何とも不思議なめぐり合わせではあるが、産業界で立派に活躍し信頼を得ている彼にこの欄でエールを送れることを幸せに思う。

彼の専門技術は、コンピュータを活用した粒子シミュレーションである。しかし、彼は単なる計算屋ではない。技術者・研究者としての彼の優秀さは、離散要素法などによる粒子シミュレーションの巧みな扱いのみによるものではなく、実現現象を粘り強く観察しその本質に迫ろうとする探究心にあると私は思う。現象を実験や現場でとことん観察し、その本質を見極めてモデルに反映させる努力を続けているからこそ、彼のモデルは有用であり多くの技術者の信頼を得ているのである。単にテクニックとパラメーターフィッティングにより実現現象をそれらしく再現するだけのモデルは、研究者の腹話術人形でしかない。そのようなモデルは、研究者・技術者の「見てきたこと」や「思い」をモデルに語らせることはできても、新しい発見・発展は期待できない。

モデルは実験・観察により裏付けられるべきであり、実験・観察はモデルにより一般化されるべきである。すぐれた

モデルを開発するためには、相応の実験が不可欠である。彼が入社してから、数十台の専用コンピュータ、それが入る部屋、計算機が出す熱に対応するための空調機まで整えたが、粒子の運動現象を再現し、現象の観察、定量的把握、モデルの検証などを行う実験装置にはさらに〇桁上の金を投入し、グループで実験と技術開発に取り組んできた。世界一の粒子シミュレーションを目指す彼への信頼の証でもある。

シミュレーションモデルには簡略化、単純化が不可欠である。モデルに携わる研究者は、その計算結果に酔いしれるのではなく、その結果を得るための前提である単純化や仮定といったモデル特有のある種の「後ろめたさ」を思い起こさねばならない。モデルを作った人は、現象の定量的な記述が不十分なところも一番熟知している。その「後ろめたさ」の解消を研究の原動力として、より本質に近づくための実験・観察を行い本質に迫る努力を続けてゆく必要がある。まさにその作業に実直に取り組み、着実に成果を上げてきているのが三尾さんなのである。世界一の粒子シミュレーションモデルの構築に向かって努力する彼に、最大限の賛辞を込めたエールを送りたい。

JFEスチール(株)スチール研究所 製鉄研究部長

佐藤 道貴

製 鉄分野の課題は、言うまでもなく、高炉の高効率化(低還元材比や高出鉄比)を果たして、省エネやCO₂削減、コスト削減を図ることです。これを達成するための手段として、装入物分布制御は極めて重要な技術の一つです。しかし、重要性は認識されつつも、現場技術者が日頃から大変な苦労をもって、またトライ＆エラーに頼って、少しずつ最適化を図っているのが現状と思われます。

三尾さんの研究業績を一言で申し上げるならば、DEM法という新しいツールを武器に、この装入物分布に関わる現象(原料のホッパーへの貯蔵から切り出し、コンベアーでの搬送、シュート上の運動と高炉内への堆積までの一連の現象)を精緻に数式モデル化し、ブラックボックス的であった現象を3次元的に「見える化」したことだと思います。今、どういう装入をしていて、粒子の流れ込みや分離・偏析、あるいは装入物の堆積形状はどうなっているのか、経時的かつ視覚的に知ることができますので、装入物分布の指針を設計するに際し極めて有用な情報となります。また、実測では得られない、粒子の充填状態(空隙率分布)、応力分布などを容易に推算できますので、学術的にも価値が高い研究です。

ただし、DEM法に関わる問題は、何と言っても長時間の

計算時間が必要なことです。三尾さんはこの問題に正面から取り組み、「Distinct Cell Model」という新しい概念のアルゴリズムを独自に開発しました。これにより、粒度分布を持つ何億個もの粒子群を扱える大規模化と計算の飛躍的な高速化を成し遂げています。偉業であると思います。

このような工夫を経て得られた結果は、動画として時折、学会等で披露していただけていますが、いつも印象的です。現象に忠実、画像は精密であり、まさにリアルシステムをヴァーチャルシステムで再現することを可能とした先駆者と言えるでしょう。

三尾さんは数年前に学側から企業側に移った方であり、大学で培った英知を企業で十二分に活かしている数少ない人材の一人です。三尾さんとは学会での質疑応答を始め、懇親会の席でも親しくお話をさせて頂いていますが、議論はいつも熱く、燃える若手研究者という印象です。周りの人にお伺いしても、時間を忘れて没頭するタイプ、とお聞きしています。このような、情熱溢れる人がこれからの製鉄の歴史を変えていくのだと思います。

これからも、さらにご活躍されることを心から期待しています。