



特集記事・8

鉄鋼におけるマルチスケール・マルチフィジックス計算材料科学

高炉プロセスの粒子シミュレーション

The Particle Simulation of Blast Furnace Processing

夏井俊悟
Shungo Natsui

北海道大学 大学院工学研究院
材料科学専攻 助教

1 はじめに

製鉄プロセスは、炭素を還元材として鉄鉱石の熔融・還元を行い、銑鉄を得る工程である。現在の製鉄用高炉は、高さ20~30m、内容積3000~5000m³程度の大型円筒容器で、これを満たす原料粒子（鉄鉱石、コークス）の充填層に加熱空気を通気する。Fig.1に高炉内の各物質流れの概念を模式的に示す。炉内では、炉頂から装入された原料から、羽口付近のレースウェイと呼ばれるコークス燃焼帯まで500~2800K程度の非常に幅広い温度分布が生じている。したがって、各化学種の反応速度変化に伴う組成不均一性、コークスのガス化や融着帯での鉱石溶解の相変化、粉体の発生も生じるため、プロセス中は固・気・液相が混在する複雑系となる。

最近では地球温暖化問題に対する要求の高まりから、CO₂排出量削減を目標に製鉄プロセス全体の見直しが図られている¹⁻³⁾。低コークス比操業、還元材の水素置換、高反応性原

料の使用など現在提案されている低炭素化手法は、熱力学的には大幅なCO₂削減が達成可能であるものの、炉内反応や通気性など物理的な操業因子に大きな影響を与えることが予想される。通称“棚吊り”、“フラディング”などといった炉内の停滞があってはそもそもの操業が成り立たない。CO₂排出量削減のためには炉内変化に対応する技術開発が同時に求められるといえる。

適切な操業設計指針を得るためには、炉内現象の正しい理解と非経験的な予測手法の確立が重要であるが、高炉内は高温の還元雰囲気であるため内部の直接観察には困難が多く伴う。そこで、数値解析を用いた非経験的な移動現象モデルが炉内の理解に重要な役割を担っている。特に、最近の粒子を用いたシミュレーションの応用研究によって、離散的な固体運動や自由表面流れという従来困難であった現象を取り扱うことができるようになってきた⁴⁾。固体粒子運動の計算方法であるDiscrete Element Method (DEM)⁵⁾、そしてそれと数値流体力学との連成手法 (DEM-CFD)⁶⁾、また分散相としての流体を解析できるメッシュフリー粒子法⁷⁾のひとつであるMoving Particle Semi-implicit (MPS)⁸⁾法などを用いることで、今までブラックボックスとされてきた流れ場のモデリングや、直接的な数値実験が可能となりつつある。今後、高炉の単位操作と物理量との新たな関係性を見いだすことが期待される。本報では、これらの解析方法の特徴と高炉内現象解析への応用について紹介する。

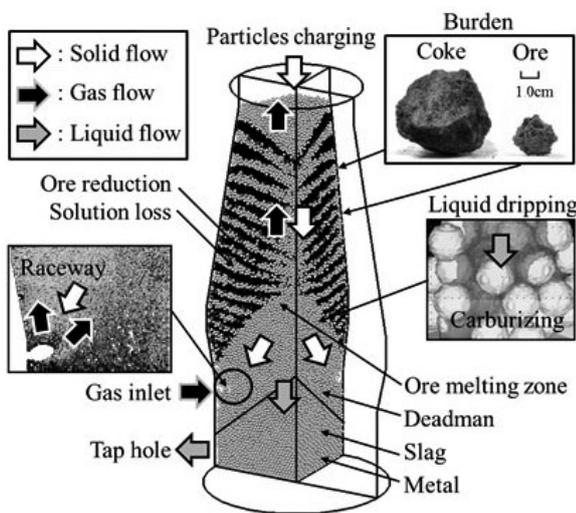


Fig.1 Schematic diagram of multiphase flow in ironmaking blast furnace process.

2 DEMを用いた充填構造の特性評価

高炉を特徴付ける充填層構造は計数億個ともいわれる原料粒子群から形成され、これらの制御が炉内の多相流れを決定づけると言っても過言ではない。そこでまず、充填層を気相が通過する現象を対象にしたモデリングについて述べる。

高炉内の流れの安定性を考えるさい、最も重要な物理量の

一つが充填層内の圧力損失である。圧損が増大することは充填層が目詰まりし、炉内の流れが停滞していることを示す明確な指標となるからである。Ergunは、充填層を通過する気相の圧力損失を記述するために、充填層を連続体に近似して、その特性を粒子径 d と空隙率 ϵ の2変数で整理した⁹⁾。Ergunの式は均一粒径から成る充填層において高い予測精度があり、現在でも多くの高炉シミュレータに応用されている¹⁰⁾。しかし、実際の高炉を考えると、局所的な粒子形状 k_1 と充填構造 k_2 の分布が生じるのは明らかであり、圧損の数値解析を行う際にはこの影響を考えなくては正確な見積もりができない²⁾。しかし、 k_1 と k_2 は固体粒子の移動と共に変化する非定常の独立変数であり、実測値に基づいて推算されるが非経験的に求めるのは難しく、この問題は長年の課題とされてきた。

充填構造を詳細に検討するために、粒子挙動を積算するという微視的観点から考えてみる。粒状体としての特性が顕在化したとき、その挙動を物理機構の面から理解するには、まず粒子同士の干渉を記述する必要がある。ここで真価を発揮するのがDEMである。DEMの基本原理は、個々の粒子それぞれにNewtonの運動方程式を与え、固体粒子運動すべてを追跡しようという力業である。単位時間あたりの粒子に働く力を求め、粒子速度・座標を更新していくというプロセスを

反復する。炉内のすべての粒子運動を追跡することができれば、個々の粒子に起因する現象を正確に予測することができる。高炉形状を境界条件に数億もの粒子を追跡するのは不可能なように思われるかもしれないが、すでにYuuらは地球シミュレータを用いて1600万個の粒子で実高炉スケールの充填層を解析している¹¹⁾。長年DEMの研究を行ってきた方々からは隔世の感があると言われそうだが、10年後には数億個の粒子をも十分計算できると考えられる。さて、大型計算機を用いずともリーズナブルにPCで円筒型充填層構造を計算した例をFig.2に示す。試験高炉程度のスケールで使用した粒子は200万個程度ではあるが、連続体では表現できないコークス・鉱石の自然な充填特性が再現できていることがわかる。例えば、コークス層間に鉱石粒子が密に入り込み、空隙を低下させる。DEMを使用するとコークス層と鉱石層という単純な分布ではなく、混合層が自然に生成されることがわかる。Fig.3に各コークス粒子付近に存在する鉱石およびコークス粒子の存在比を示す。本図は同じ粒子数比での層状配置と完全混合配置とを比較している。同じ粒子数でも異粒径を混合することで各粒子の周囲環境が大きく変化することがわかる。特に、コークス周りに存在する鉱石数の自由度は高く、近年着目されている近接配置の効果は少なくないと予測される。詳細は次節で述べるが、粒子の反応速度は近接の粒子から最も影響を受けやすく、低炭素高炉ではこれらをどのように制御するかが論点になる。

ところでDEMでは粒子を真球と仮定しており、前述の粒子形状を表現しようとするれば、その因子はすべて粒子径に集

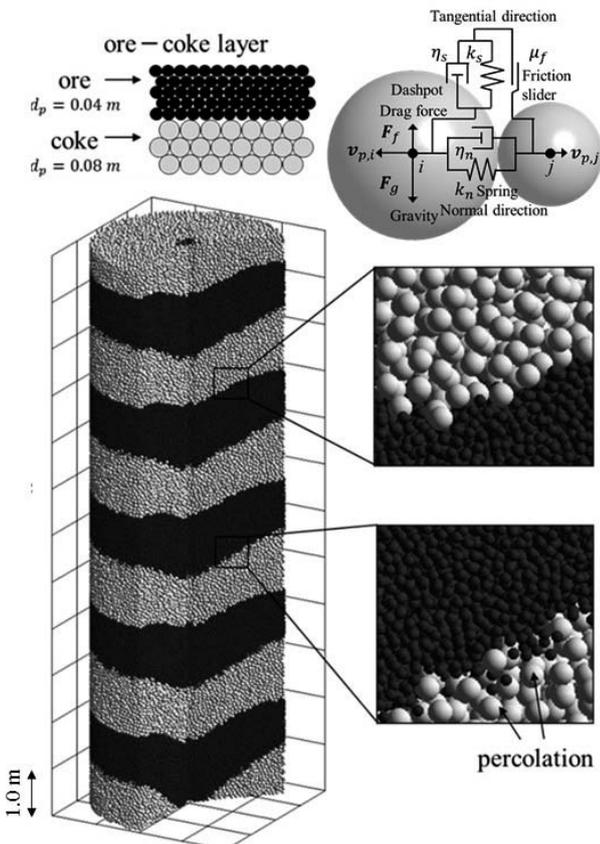


Fig. 2 A packed bed structure derived by DEM simulation.

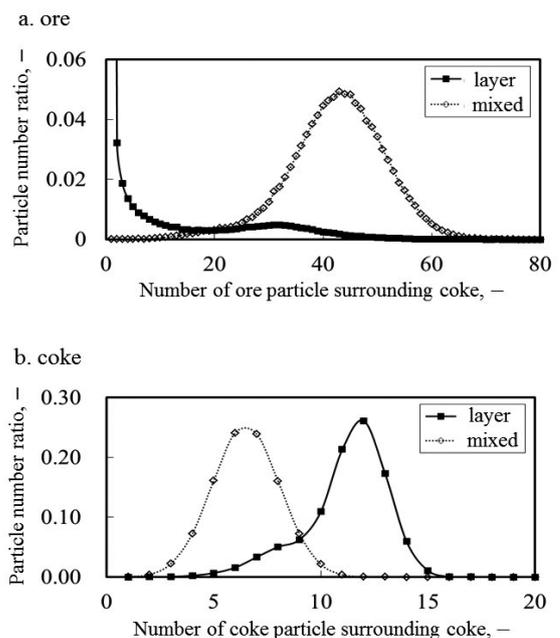


Fig.3 Influence of particle structure on number distribution of the surrounding coke particles.

約されてしまうため、凹凸を含む本質的な粒子形状は表現できない。そこで複数粒子を相対位置が固定された剛体と見なす方法が提案されている^{12,13)}。つまり様々な形状を複数の球形粒子群の塊で表現する。固体の接触状況も変化することが示されている。このような柔軟性から今後もDEMベースの方法が優位性を保つと思われる。

3 DEM-CFDシミュレーションへの展開

充填層内の気相の流れを記述するには、流体力学の教科書にあるように、流れの観察には視点を固定する方法と動く視点による方法がある。流体が流れている領域の1点に着目し、その位置における物理量の時間に対する変化を観察するのはEulerの方法、流体を流れる要素ととらえ、それらの動きを観察するのはLagrangeの方法といわれている。差分法や有限要素法など、空間を変形しない固定メッシュで分割する方法はEuler的、DEMなどの粒子法はLagrange的である。DEMで多くの粒子を扱えることに慣れてしまった現在では違和感を持ってしまふのだが、コンピューターが現在のよう高速ではなかったとき、多数の固体粒子運動を一つ一つ解くことができず、個々の粒子群の運動を計算セル内で連続流体に近似するモデルが最も有用であった。つまりセル内の気相率(空隙率)を ϵ 、固相率を $(1-\epsilon)$ とおけば各々独立した相の流れを共通の計算セルで解く。このアプローチは、Euler-Euler (E-E) 法と呼ばれる。E-E法はひとつのセルに2つの流体が存在するので2流体モデルともよばれ、気相中の固体粒子群をひとつの流体と見なすことで、混相流体が気相と粒子相から成る流体の2つから成り立っていると考える。粒子相であっても流体と見なすのであるから、その基礎方程式は流体と同様の考えで誘導される。そのため、個々の粒子の変動は完全に平均化されてしまう。一方、個々の粒子の周りの流れを精密に求め、流体だけでなく粒子の運動も基礎方程式だけから計算する方法が提案されている。複数の相が存在する流れの記述にEulerとLagrangeの二つの視点を連成するのがEuler-Lagrange (E-L) 法と呼ばれている方法である。DEM-CFDはその一つであり、当初は流動層流れ解析のために開発された手法であった⁶⁾。つまり粒子運動は前述のDEMを用いて解き、流体運動は計算セルを用いたSMAC法などを用いて解く。粒子の周りの詳細な流れを計算するためには粒子よりも小さな計算セルを用いる必要があるが、粒子以下のスケールで流れを直接解くのは大規模演算を行ったとしても計算領域がかなり限定される。一般には、計算負荷低減のため粒子よりも大きい寸法を有する計算セル内で平均化する方法がとられる。この方法によるDEM-CFDは、セル内の粒子運動を平均化するにもかかわらず、個々の粒子運動が

厳密に計算されるため、充填構造特性をかなり反映することができる。

高炉の場合は、粒子群が充填層を構成し、その間隙を気相(連続相)が満たしながら流れ、伝熱と反応が生じる。著者らは、E-L法を用いた高炉の熱・物質移動モデルを提案している¹⁴⁾。Fig.4に高炉充填層に適用した例を示す。模式図に示したように空間に固定した格子の中を粒子が偏在しているため、空間的な不均一性を評価できる。粒子の配置、鉱石還元発熱反応とコークスガス化による吸熱反応、対流場などが複雑に影響し合う温度場が計算結果として現れている。対流伝熱は反応熱に比べて小さいが、上部へ向かう気相の流れに沿った温度分布となっているのが興味深い。充填構造は気相の流れを変化させることによって間接的に反応速度に影響すると考えられる。

汎用で扱いやすいE-E法を用いれば高炉のマクロ的な温度分布などを計算でき、物質収支がとれているならば、わざわざ粒子毎の運動を解いて、格子スケールで局所平均するE-L法で熱物質移動を計算する必要は無いのではないかという疑問が生じるかもしれない。しかし、粒子配置が変われば対流が、対流が変われば粒子反応速度が、反応速度が変われば温度が変化するというように運動量・熱量・物質量は相互に依存し合っている。例えば、著者らは高反応性コークスの炉内配置と温度への影響について解析したところ、低温化による鉱石還元速度が減少するという結果を得ている¹⁵⁾。原料品

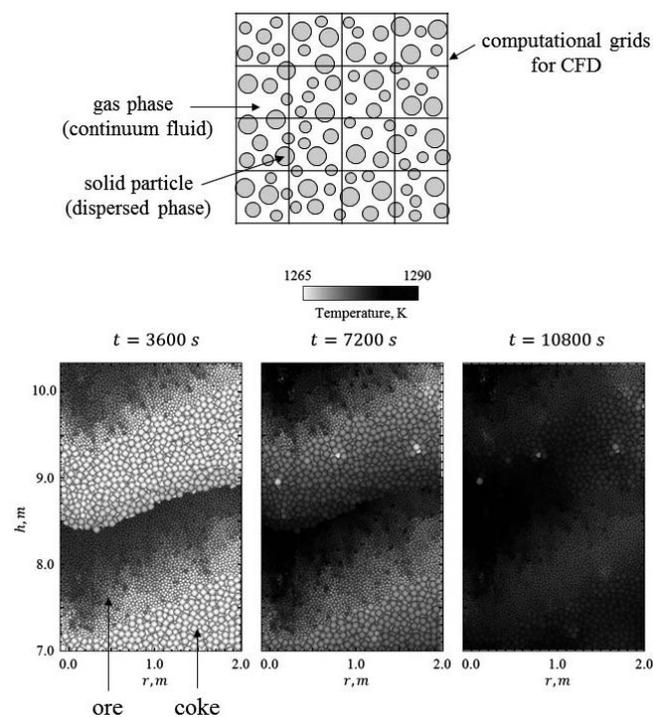


Fig. 4 Time change of calculated solid particle temperature distribution. Large particles express cokes and small particles express ores, respectively.

位の変化やその配置にも対応し、炉内現象への影響を直接検討するためにもE-L法の果たす役割は少なくないと考えられる。実際は、現在でもなお取り扱える粒子数に限界があるため、工業現場の実装置を対象とする場合はE-E法に依存せざるを得ない面もある。

ところでDEMは、かなり大きな粒径比の接触問題にも対応可能で、粉体運動をある程度直接解析できる¹⁶⁾。炉下部から吹き込む微粉炭は固体ではあるが、数十～数百 μm と炉内原料との粒径のスケール比が大きく、連続体近似する際には固体粒子と分けて特別な取り扱いを必要とされてきた。本稿で紹介するE-L法では、粉体も固体粒子と全く同じ運動方程式を適用する。Fig.5に充填層を通過する粉体の計算結果を示す。 $t = 0.02\text{ s}$ で底部の充填粒子に衝突、その後は流路に沿って上昇する粒子、空隙の狭くなったところにトラップされる粒子に分かれる。このような局所的な粉体の閉塞（ホー

ルドアップ）も炉内全体の流れに影響するといわれている。本シミュレーションでは実験式を極力用いておらず、粒子の物性値（摩擦係数、粒径、質量など）を変化させた数値実験によって新たな知見が収集できる。

4 MPS法による充填層内の融体流れ計算

以上はDEMを基礎とした粒子シミュレーションの固気流れへの応用を概略したが、最近では、固気相に加え液相との相互作用のモデル化が取り組まれている。「低炭素高炉実現を目指した固気液3相の移動現象最適化研究会」(2011-2013)では、融着帯での現象が特にクローズアップされているが、低炭素化をはかる場合、コークス量が減少するため、融着帯閉塞による圧力損失が最も重要な課題であると示唆されて

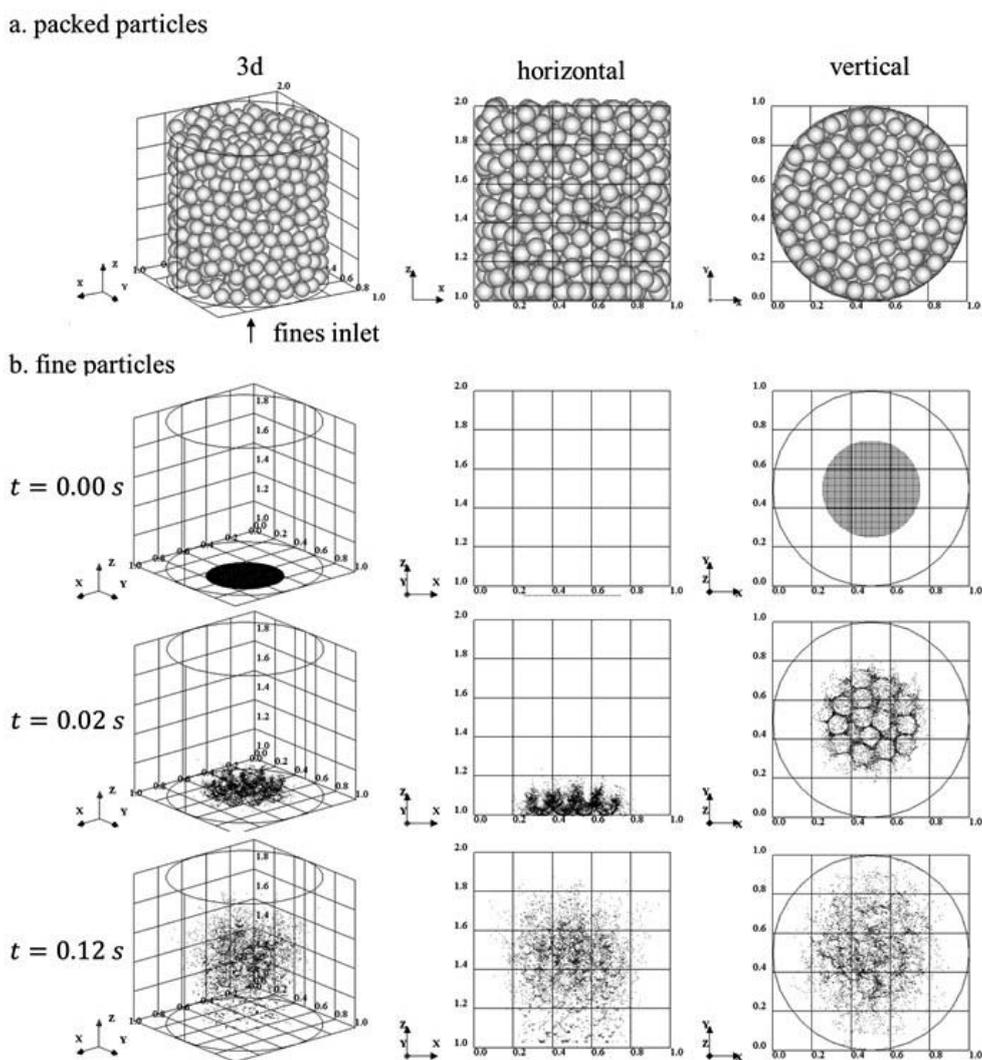


Fig.5 DEM simulation of fines particles which passes through a packed bed. Fines were supplied from a lower part of bed.

いる。鉄鉱石は融点以上で軟化・熔融し、炉下部のコークスベッドを滴下、炉床部で熔融金属・スラグとして分離する。融体運動は、密度・粘度・表面エネルギー・形状による影響を受け、またこれらの物性は組成や温度で変化する。すなわちコークスベッド中を複雑に合体・分離を繰り返しながら滴下していくと考えられ、このような融体界面追跡のシミュレーションにも粒子法が着目されている。

一般的なEuler型界面追跡法で広く用いられるVOF (Volume and Fluid) 法¹⁷⁾と比較して粒子法の位置づけを以下に簡単に述べる。VOF法は、空間を計算セルに分割し、流体のセル体積占有率 (あるいはカラー関数) F を補助変数として導入する。各セルにおいて、 $F=1$: 液相、 $F=0$: 気相、 $0<F<1$: 気液界面と定義し、 F の移流方程式を差分法などで解くことで領域内での界面変化を記述するアプローチである。この方法の問題点は、率直に言えば計算を進めていくうちに界面形状がぼやけてくる (数値拡散) ことであり、界面を保持するために例えばCICSAM (Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes) スキームのような高精度な差分が必要となる¹⁸⁾。格子による差分法が元々境界値問題を解くための方法で、その境界自体が変化する問題は苦手であるともいえる。これに対して、粒子法は、粒子自体の移動によって流体の流れを直接記述するため、液体の分裂・合体を伴う複雑な界面挙動の追跡に真価を発揮する。つまり移流方程式を解かないため、数値拡散なく流体界面形状を正確に捕捉できるといわれている。

計算例として、Fig.6に粒子法で計算された静的な液滴界面を示す。濡れ性の異なる固体表面上での液滴形状を再現できている。これを応用し、六方最密充填された固体充填層中を滴下する液滴のシミュレーション結果をFig.7に示す。液滴は様々な形状に分裂したり合体したりしながら、落下していく。時間変化する位置、速度、圧力など3次元情報が得られ、また多くの独立変数を任意に変化させることができるのは実験では難しくシミュレーションの利点のひとつである。高炉下部における通液性は、前述のように低炭素化のための重要な因子であり、液相物性と充填構造の最適設計を行うさいに本手法が有用であると考えられる。

しかし、粒子法には数値解析としての本質的な課題も残されている。これまでいくつかの粒子法が提案されているが、特に多くの研究がなされているSPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法⁷⁾は、場を粒子の集合体と考え、各粒子は物理量 (速度、密度など) を粒子の中心周りに滑らかに分布させていると仮定している。その分布形状はある関数で規定されるが、元々圧縮性流体を仮定しているため常に体積保存性の問題や人工粘性を必要とする問題がある。一方、近年発展しているMPS法は、非圧縮性流体を解く粒子法として

広く用いられているが、計算点周囲の物理量分布を考慮しないのでSPH法よりも空間解像度低下が懸念され、また微分演算子の差分近似モデルの数学的検証も十分ではない。また、どちらの手法も密度不連続面においては圧力が不安定になりやすい。この問題は単一相でなく気液界面などの異相界面で顕著となる。よく用いられる近似として液相運動に対する影響が小さいことから気相運動を無視する方法があるが、これでは気液の流れを解くさいにはモデル化の意味がなくなってしまう。気液相を区別せず直接粒子で離散化する場合には、格子法と同様に数値的な安定化手法を導入することになるため、粒子法による気液モデルに関しては、今後とも界面モデルの物理的意味付けについての検証と妥当性確認 (Validation and Verification) が必要である。最近、著者らは粒子法の界面安定性を改善し、気液界面を有する流れに適用を試みている¹⁹⁾。気相も液相と同様に粒子で直接離散化し、気液界面において滑らかな密度関数の導入などを行ったところ、各相の高い質量・体積保存性を維持しながら、流動過程を解くことができた。ハイスピードカメラを用いて同スケールの水モデル実験結果と比較したところ、本手法を用いると気液界面形状だけでなく分散気泡高さも精度良く予測することがわかった。高炉のような大規模系に応用するさいにも、まずはこのような基礎実験に基づいて着実に知見を積み重ねていくことが重要と思われる。

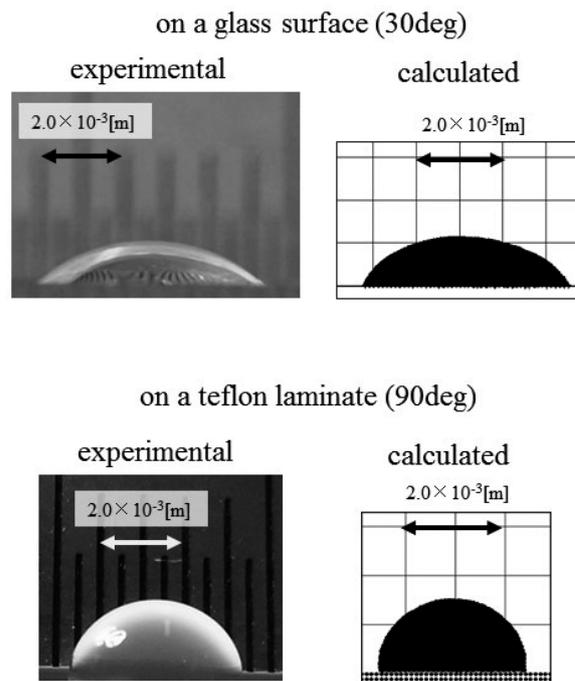


Fig.6 Experimental and calculated photographs of static droplet of water.

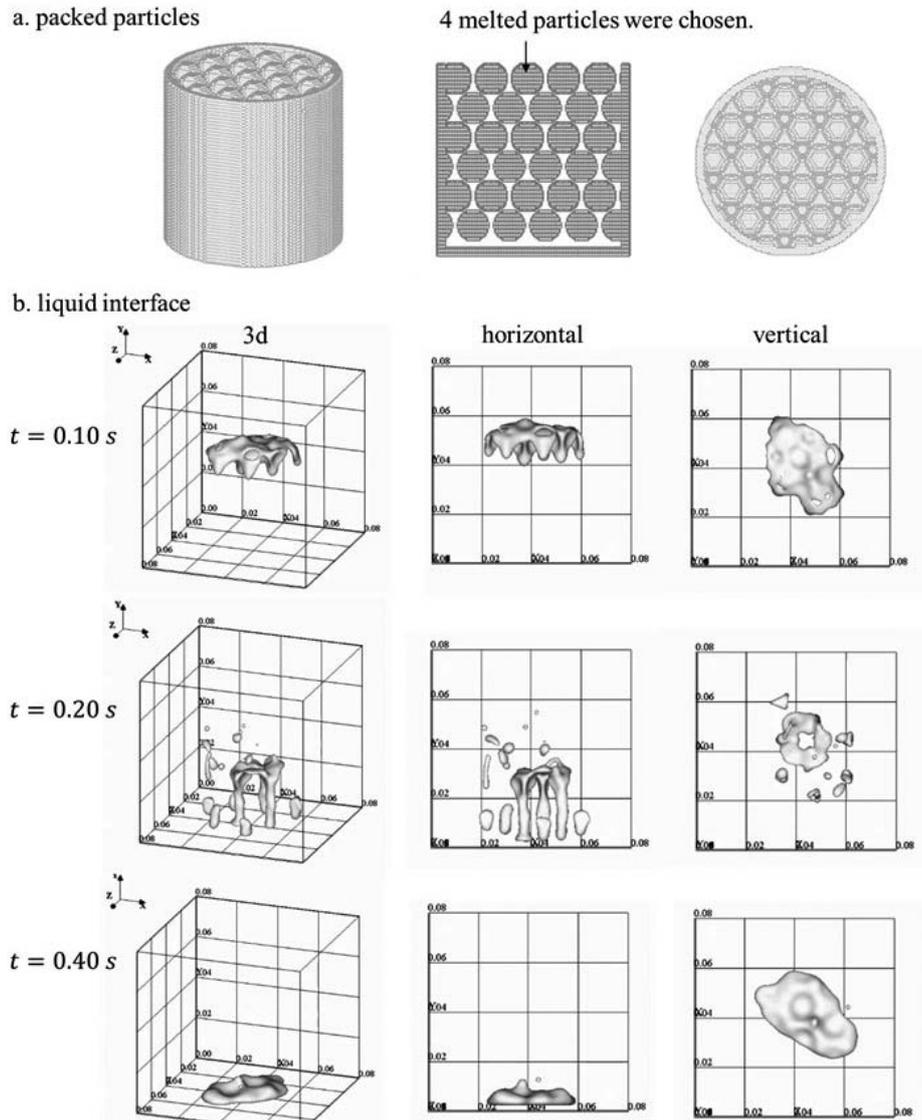


Fig.7 Mesh-free particle simulation of water dripping which passes through a poor wettability packed bed (contact angle=180°).

5 おわりに

現在、高炉プロセスにおいても粒子法シミュレーションが実用的に用いられ、今後の新たな展開が見えてきた段階であることを述べた。最近の研究で、各素過程の物理的意味づけを失うことなく固気液相の移動を同時に解くことができるようになってきており、また、今後も続くと思われるコンピューティング技術の発展は、さらなる大規模演算を可能にしていくと思われる。このような計算機資源の利用は、単なる実験や理論の補完にとどまらず、未知の現象を解析していくさいの思考の基本とすることが可能である。モデル化技術と計算機の発展は相まっており、今後も継続的な研究がなされていく必要がある。

今後の経済事情を鑑みると、鉬石・コークス混合装入や高

反応性原料の積極的利用という今までにない様々な操業条件を視野に入れる必要があると思われる、これまでの経験に頼った勘所を押さえることが困難になるかもしれない。したがって、各現象を区別することなく数値解析できるシミュレーション方法を有し、炉内を非経験的かつ詳細に考察することができれば、粒子法シミュレーションは学術的興味にとどまらず新たな製鉄プロセス設計の強力なツールになることと思われる。

参考文献

- 1) 植田滋, 三木貴博, 村上太一, 埜上洋, 佐藤健: 鉄と鋼, 99 (2013), 1.
- 2) 林幸, 助永壮平, 大野光一郎, 植田滋, 砂原公平, 齋藤敬高: 鉄と鋼, 100 (2014), 211.

- 3) 埜上洋, 植木保昭, 村上太一, 植田滋 : 鉄と鋼, 100 (2014) , 227.
- 4) 有山達郎, 夏井俊悟, 昆竜矢, 植田滋, 埜上洋 : 鉄と鋼, 100 (2014) , 198.
- 5) P.A.Cundall and O.D.L.Strack : Geotechnique, 29 (1979) , 1, 47.
- 6) Y.Tsuji, T.Kawaguchi and T.Tanaka : Powder Technol., 77 (1993) , 79.
- 7) R.A.Gingold and J.J.Monaghan : J.Comput.Phys., 46 (1982) , 429.
- 8) S.Koshizuka and Y.Oka : Nucl.Sci.Eng., 123 (1996) , 421.
- 9) S.Ergun : Chem.Eng.Prog., 48 (1952) , 89.
- 10) 八木順一郎 : 鉄と鋼, 69 (1983) , 1242.
- 11) S.Yuu, T.Umekage, S.Matsuzaki, M.Kadowaki and K.Kunitomo : ISIJ Int., 50 (2010) , 962.
- 12) 石原真吾, 張其武, 加納純也 : 粉体工学会誌, 51 (2014) , 407.
- 13) 綱澤有輝, 田原一輝, 細田幸祐, 所千晴, 大和田秀二 : 粉体工学会誌, 51 (2014) , 415.
- 14) 夏井俊悟, 昆竜矢, 植田滋, 加納純也, 井上亮, 有山達郎, 埜上洋 : 鉄と鋼, 98 (2012) , 341.
- 15) S.Natsui, R.Shibasaki, T.Kon, S.Ueda, R.Inoue and T.Ariyama : ISIJ Int., 53 (2013) , 1770.
- 16) S.Natsui, S.Ueda, H.Nogami, J.Kano, R.Inoue and T.Ariyama : Chem.Eng.Sci., 71 (2012) , 274.
- 17) C.W.Hirt and B.D.Nichols : J.Comput.Phys., 39 (1981) , 201.
- 18) K.Takatani : ISIJ Int., 47 (2007) , 545.
- 19) S.Natsui, H.Takai, T.Kumagai, T.Kikuchi and R.O.Suzuki : Chem.Eng.Sci., 111 (2014) , 286.

(2014年6月18日受付)