

# 粒子法の精錬反応解析への応用

## Application of Particle Methods for the Analysis of Refining Reactions

伊藤公久

Kimihisa Ito

早稲田大学  
基幹理工学部 応用数理学科  
教授

### 1 はじめに

近年の製鋼プロセスに対する最も強い要求の一つに、精錬反応の高速化と高効率化が挙げられる。しかし、溶銑予備処理炉、転炉、2次精錬炉、電気炉等において進行する複雑な精錬反応自体の精緻な解析なくして、この要求を実現することは困難である。精錬反応の解析と制御を行うために必要な学理と手順とをFig.1に示した。精錬反応の最終到達目標の値は、熱力学によって与えられる。一方、時間の経過に伴って変化する精錬装置内の状況は、速度論によって記述することができる。この速度論的解析において重要になるのは、熱や物質の各種輸送係数や、反応に関与する各相の幾何学的な状態である。速度論の方程式にこれらの情報を入力することで、精錬反応の進行を的確に予測することが可能になる。しかしここで、流体の流れや各相の形状を実際に観察し、それ

を必要な情報として用いることは非常に困難であり、高温におけるモデル実験もまた複雑で困難なものとなるのが通常である。このような理由から、数値流体力学は、実際の観察や実験の代わりに必要な情報を提供してくれるツールとして、大変貴重な働きをしてくれることが期待される。

複数の相が複雑に混合・分離している精錬装置内での流れや界面の形状を計算で求める時、従来の格子法による解析を適用するのが非常に難しいことは、よく知られている。これに対して粒子法 (particle method) は、界面の大変形を伴う流れを比較的容易に扱うことができるので、精錬反応の解析に適用できる計算手法の中で、最も有望なものの一つである。本稿では、高温における気体-液体-固体間の精錬反応解析のために重要となる、異相間界面積の推算に焦点を当て、筆者の研究室で行っている、精錬反応への粒子法の応用について紹介してみたい。

### 2 MPS法を用いた溶融鉄・スラグの流下シミュレーション

スラゲーマタル間反応への粒子法を用いた最初の解析例として、MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法を用いた溶融スラグの溶鉄への衝突シミュレーションの結果<sup>1)</sup>を紹介する。本解析の目的は、溶鉄に落下する溶融スラグ流と溶鉄との接触界面積、すなわち反応界面積を求めることにある。MPS法は、越塚ら<sup>2,3)</sup>によって提案された非圧縮性流体の計算法であり、近年広く用いられている代表的な粒子法の一つである。MPS法の詳細については成書<sup>2,3)</sup>や本特集号の記事<sup>4)</sup>を参照されたい。

流体計算の基礎式は、(1)式で表されるNavier-Stokes方程式であり、 $u$ 、 $\rho$ 、 $P$ 、 $\mu$ 、 $F$ は、それぞれ速度、密度、圧力、粘性係数、外力を表している。

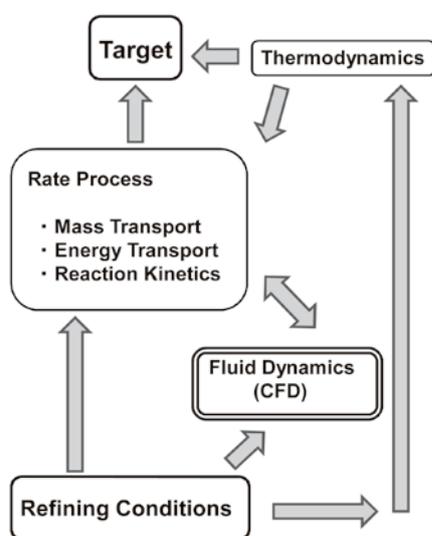


Fig.1 The scheme for the analysis and control of a steel refining process<sup>1)</sup>.

$$\frac{Du}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 u + F \dots\dots\dots (1)$$

Navier-Stokes 方程式の右辺第一項は圧力項、第二項が粘性項、第三項が外力項であり、外力項には、重力加速度や表面張力、界面張力などが入る。シミュレーションにおいては、重力と表面張力の効果を考慮した。水槽に水および油を流下・衝突させるシミュレーションを2次元で行う一方、擬似的に2次元を再現する水モデル実験を実施し、両者の結果を比較することによって、計算の正しさを実証した。その後、溶鉄-スラグ系の物性値を用いて計算を実行した。Fig.2 に1873Kにおける計算結果の一例<sup>1)</sup>を示すが、a) では、初速 0.5m/s で溶鉄浴に溶鉄を流入させた場合の侵入深さの変化が推定できている。また b) では、溶鉄浴に溶融転炉スラグを流入させた場合のスラゲーメタル界面形状の変化を推定することができた。流入速度を上げると進入距離は増加し、転炉スラグの侵入距離は高炉スラグに比べて、約50%程度増加した。さらに、界面に存在する溶鉄の流体粒子を抽出し、スラゲーメタルの界面積を求めたところ、落下流の存在によって、静的なスラゲーメタル界面に比べて界面積は増加し、流入速度の増大に伴って、さらに増加する傾向にあることが分かった。このシミュレーションにおいては、各相の表面張力は考慮しているものの、スラゲーメタル間の界面張力は考慮に入れていない。それは、MPS法は半陰的アルゴリズムを用いているために計算時間が長くなるので、正確な界面評価のために必要な多数の粒子を用いて計算することが、当時は困難だったためである。

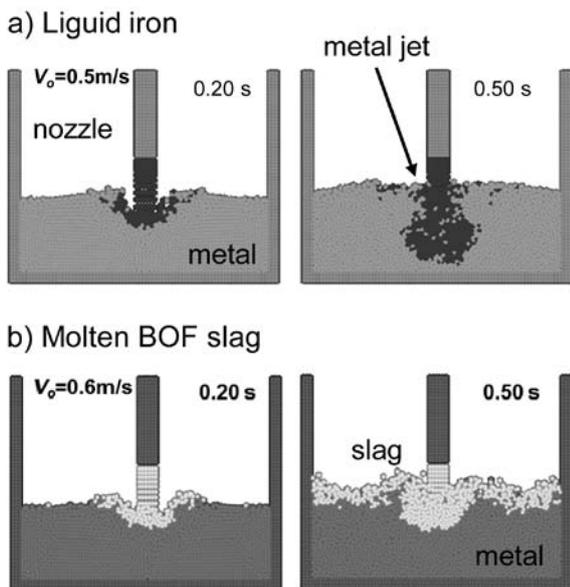


Fig.2 Penetration of a falling liquid jet into a molten bath. a) iron-iron system, b) BOF slag-iron system by using MPS method.

### 3 SPH法を用いたフラックス粒の溶鉄への衝突シミュレーション

SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法は、当初宇宙物理学分野で開発された計算法<sup>5,6)</sup>であり、圧縮性流体に対応したシミュレーション手法である。最初にSPH法について簡単に説明しておくことにしよう<sup>3)</sup>。空間内にいくつかの評価点(粒子)を考えたとき、位置の評価点における物理量 $f(x)$ はデルタ関数 $\delta(x)$ を用いて、(2)式で書くことができる。

$$f(x) = \int f(x') \delta(x-x') dx' \dots\dots\dots (2)$$

ここで評価点を中心に影響半径 $h$ 内の空間にカーネル関数 $W$ を用いて物理量を連続的に分布させ、粒子位置で離散化すると、(3)式の近似式が得られる。

$$f(x) = \int f(x') W(x-x', h) dx' \cong \sum_{j=1}^N f(x_j) \frac{m_j}{\rho_j} W(x-x_j, h) \dots\dots\dots (3)$$

ここで $x_j$ は、 $j$ 番目の代表点の位置であり、 $h$ はカーネルの影響半径、 $m_j$ と $\rho_j$ は、それぞれ代表点における質量と密度である。

さらに、(3)式の勾配を求めることによって、物理量 $f(x)$ の勾配を(4)式で近似することができる。

$$\nabla f(x) \cong -\sum_{j=1}^N f(x_j) \frac{m_j}{\rho_j} \nabla W(x-x_j, h) \dots\dots\dots (4)$$

(4)式からわかるように、SPH法においてスカラー関数の勾配を求める際には、カーネル関数の微分を行うだけでよいことがわかる。

カーネル関数は、①極限がデルタ関数である、②規格化されている、③影響半径 $h$ の外では0である、という3つの条件を満たす必要があり、実際には様々な種類の関数が提案されているが、代表的なものとして(5)式で与えられるLucy型<sup>5)</sup>のカーネル関数が広く使われている。ここで $r$ は評価点からの距離である。

$$W(r, h) = \frac{5}{\pi h^2} \left(1 + 3 \frac{r}{h}\right) \left(1 - \frac{r}{h}\right)^3 \dots\dots\dots (5)$$

Fig.3に、(5)式のカーネル関数の概形および、 $x$ 軸上の黒丸で示した各評価点におけるカーネル(破線)と、それを重ね合わせて得られる $f(x)$ (実線)を示した。図から読み取れるように、空間は評価点によって離散化されているが、その物理量はカーネルによって滑らかに分布しているので、その

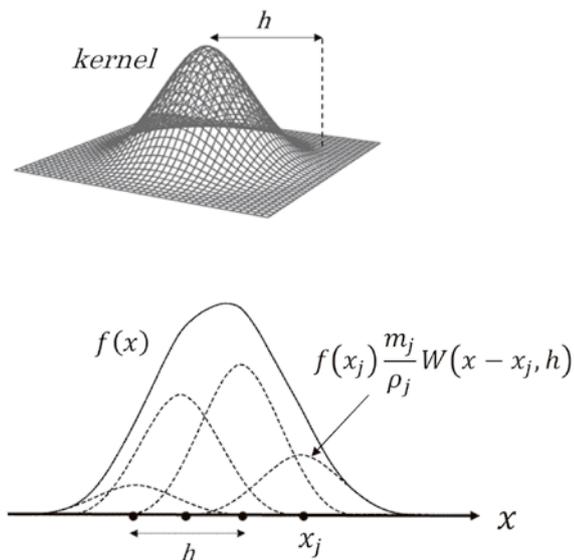


Fig.3 Explanation of the kernel function  $W(r, h)$  .

重ね合わせである物理量  $f(x)$  は連続体の物理量になっていることがわかる。したがってSPH法における粒子は、実体をもつ流体粒子ではなく、あくまで評価点であることに注意が必要である。

前述したように、元来SPH法は圧縮性流体に対応したシミュレーション手法であり、非圧縮性は保障されていない。非圧縮性流体への適用はMonaghanら<sup>7)</sup>によって提唱されたが、密度変化に対して強い圧力変化をさせる状態方程式を導入することによって、疑似的な非圧縮性流体として数値解析を行うことができる。

SPH法は陽解法であるため、同じ計算機的能力であれば、MPS法に比べてはるかに計算速度が大きい。この利点を生かして、SPH法を用いたフラックス粒の溶鉄への衝突シミュレーションを行った例<sup>8-10)</sup>を紹介する。この計算においては、固体粒子—溶鉄間の界面張力の評価が重要となるが、表面張力や界面張力によって流体に与えられる力を求めるためには、界面を連続体とみなした場合の計算方法を適用する場合、界面の曲率と各位置における法線ベクトルとを求めなくてはならない。比較的滑らかな界面の場合には、曲率と法線ベクトルの計算に十分な数の代表点が存在する 경우가多いが、激しく乱れた表面・界面や、固体粒子の場合には代表点の数が十分ではないために、この方法では計算が破綻してしまう。したがって、別の手法を考えなくてはならない。

ここで、表面張力と流体粒子に働く力を比較してみよう。Fig.4 a) は、ヤングの式 (6) を説明する際によく使われる図である。

$$\gamma_{ls} - \gamma_{gs} + \gamma_{gl} \cos \theta = 0 \dots\dots\dots (6)$$

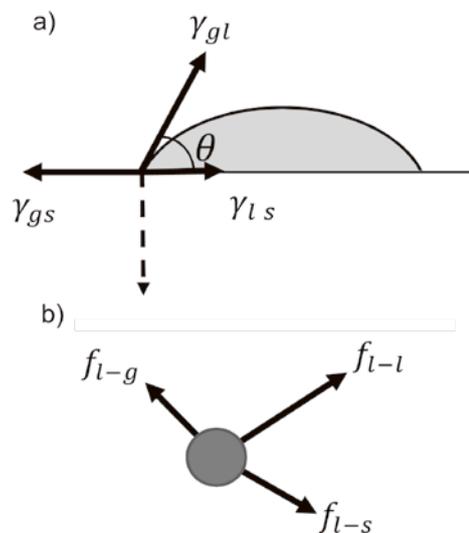


Fig.4 a) Forces acting on a sessile drop. b) Actual forces acting on a fluid particle.

なお、 $r_{ls}$ は液体—固体間、 $r_{gs}$ は気体—固体間、 $r_{gl}$ は気体—液体間の界面張力をそれぞれ表し、 $\theta$ は接触角である。しばしば (6) 式を力の釣り合いで説明している例を見かけるが、(6) 式は界面張力を界面自由エネルギーと考えて、熱力学的平衡条件から導出されるものであり<sup>11)</sup>、力学的平衡を示しているものではない。三重点における力の釣り合いを考えた場合には、図より明らかなように、鉛直方向の力は釣り合っていないように見える。実際には鉛直方向の成分  $r_{gl} \sin \theta$  は、図中に破線で示した固体表面の局所における大きな応力と釣り合っている<sup>12)</sup>と考えられるが、多くの場合そのことには触れられていない。

Fig.4 b) は、粒子法における一つの液体粒子 (SPH法では評価点) に働く力を示したものである。 $f_{l-s}$ は固体粒子、 $f_{l-g}$ は気体粒子、そして $f_{l-l}$ は他の液体粒子が対象となる液体粒子に及ぼす力を表している。したがって、界面張力を粒子法において記述するためには、粒子間力を用いたモデルを採用するのが合理的と考えられる。粒子法において界面張力を扱ったモデルには、接触角を与え、三重点付近の流体粒子にのみ界面張力を働かせるモデル<sup>13)</sup>、固体も流体粒子とみなして表面張力を付与し、剛体-流体を一体化して扱うモデル<sup>14)</sup>、粒子間ポテンシャルを用いるモデル<sup>15, 16)</sup>などが報告されている。最後のモデルはいずれもMPS法において用いられているものであり、粒子間距離  $r$  の3次関数として粒子間ポテンシャルが与えられている。この形のポテンシャルを用いれば、Fig.4 b) に示した流体粒子に働く引力と斥力を表現することができる。スケールの変化に対応して正確に粒子間距離に応じた引力と斥力を表現するために、粒子間距離を影響半径で無次元化した距離  $q (= r/\delta)$  の関数として、ポテンシャル  $\phi(q)$

を (6) 式で定義した<sup>10)</sup>。

$$\varphi(q) = C \left( \frac{q^3}{3} - \frac{(h+d)q^2}{2h} + \frac{d}{h}q \right) \dots\dots\dots (7)$$

界面張力  $F_{inter}$  は (7) 式によって与えられるので、これを重力加速度項と同様に、支配方程式である Navier-Stokes 方程式の外力項に加えることで、計算が可能になる。

$$F_{inter} = \frac{1}{2} (\cos\theta + 1) \Sigma \varphi(q) \frac{\vec{r}}{|r|} \dots\dots\dots (8)$$

なおここで、 $\theta$  は接触角、 $d$  は初期に配置された粒子 (代表点) 間距離、 $C$  はポテンシャル係数であり、 $\varphi(q)$  'は微分、 $\vec{r}$  はベクトルを表している。

(7) 式を用いた界面張力計算の結果を評価するために、固体平板上における溶融鉄の静滴シミュレーションを行い、接触角として  $70^\circ$  と  $130^\circ$  を与えて計算した結果、それぞれの接触角を再現した静滴形状を得ることができた。この界面張力モデルを用いて粒子初速度  $10\text{m/s}$ 、 $\text{CaO}$  と溶鉄との接触角  $110^\circ$  の条件の下で、溶鉄に直径  $1\text{cm}$  の  $\text{CaO}$  粒を打ち込んだ場合の計算結果を Fig.5 に示す。衝突によって直径約  $4.4\text{cm}$  のキャビティが生じ、最大侵入深さは約  $2.2\text{cm}$  と求めることができた。

## 4 Navier-Stokes 方程式以外の支配方程式の応用

通常 SPH 法によって流体を解析する場合、Navier-Stokes 方程式を運動方程式として用いるが、Hoover らはより一般性と自由度の高い運動方程式を提唱し、この手法が流体と固体の複雑な力学的変形に応用できることを示して、SPAM (Smoothed Particle Applied Mechanics) と名付けた<sup>17,18)</sup>。SPAM 法を粘性流体に応用する場合、SPH 法と全く同様に

カーネルを用いた計算を行うが、Navier-Stokes 方程式における粘性項を用いる代わりに、より単純化された2体間ポテンシャルを用いる点が異なっている。このため、煩雑なラプラシアン計算を行わずに済むという点が大きな特徴である。また、表面張力や界面張力も2体間ポテンシャルに組み込む形で表現することができる。

液体-液体2相流の解析においては、2相の間で複雑に形を変えながら運動を続ける界面の挙動を記述することが重要であるので、界面近傍の異種粒子間に働く力を正確に記述し、それを運動方程式に組み込むことが必要となる。この目的のためには、自由度が高い SPAM 法が適していると考えられる。水-油系における2相流の解析のため、界面近傍の両相の粒子に対して SPAM 運動方程式を用い、界面以外における同種の液体間の計算に関しては、Navier-Stokes 方程式を用いたハイブリッドモデルを用いて、2相流のシミュレーションを試みた<sup>19)</sup>。油-水粒子間に働く力は、Fowkes モデル<sup>20)</sup>を用いて運動方程式に組み入れた。20cm×4cm の二次元水槽における計算結果を Fig.6 に示したが、時間とともに水が油相の下に潜り込む挙動が得られた。計算に用いたものと同じ条件下で、荒木ら<sup>21)</sup>が行った実験結果との比較を行ったところ、十分に実験結果を再現できることを確認した。ガス、スラグ、メタル、フラックスという様々な相が混在する、精錬容器内の挙動をシミュレーションする場合には、それぞれの相を構成する粒子間に、適切な2体間ポテンシャルを設定するだけで計算が可能となる SPAM 運動方程式の活用が、非常に有望であると思われる。助永ら<sup>22)</sup>は、模擬マルチフェイズフラックスのずり応力-ずり速度の関係を測定し、固相の体積分率 30% 以上の系において、非ニュートン流体の一種であるピンガム流体としての挙動を示すことを報告しており、特にマルチフェイズフラックスを用いた精錬プロセスの解析には、Navier-Stokes 方程式に依らない SPAM 法が適していることがわかる。

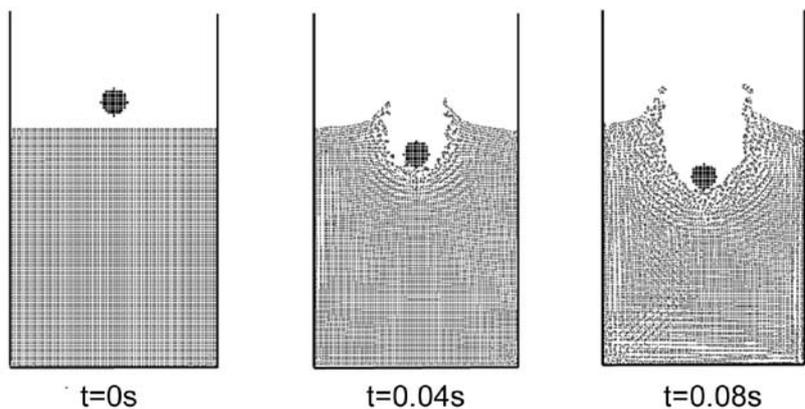


Fig.5 Simulation result of the CaO particle penetration into a molten iron bath by using SPH method.

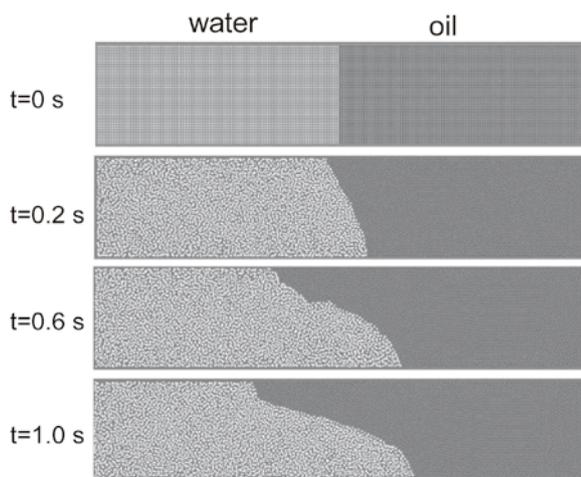


Fig.6 Simulation result of the mixing of water and oil in a rectangular cell by using SPAM-SPH method.

## 5 おわりに

粒子法は多くの研究者の努力と計算機能力の進歩によって近年目覚ましく発展し、その適用範囲も非常に多岐にわたっている。計算精度や計算速度の向上が進むことにより、我々鉄鋼精錬の研究に携わる者にとっても、より信頼性のある身近な解析ツールとしての粒子法の活用が大いに期待される。鉄鋼精錬プロセスの解析においては、異相間界面の評価や混相の取り扱いに代表される問題に対して、現象の正しい物理的描像と合理的なモデル化こそが、粒子法を活用する際の最も重要な課題であろう。その意味において、異相間相互作用に起因する界面形状の変化に焦点を当てた計算を行う場合には、精度等の面では劣るかもしれないが、Navier-Stokes方程式を支配方程式とするよりも、自由度の高い運動方程式を用いて現象を記述するのが現実的であるように思われる。さらなる計測技術の発展による実現象の観察や実験室における測定と、数値計算による実測不可能な領域の推算が、まさに車の両輪となって精錬研究を推進し、その結果として得られた成果が、新しい精錬プロセスの創造に繋がることを願っている。

最後に、本稿を纏めるに当たり文献収集や図面作成に助力いただいた、早稲田大学大学院生中野美枝子君に深く感謝申し上げます。

## 参考文献

- 1) M.Asai, H.Nijo and K.Ito : ISIJ Int., 49 (2009) , 178.
- 2) 越塚誠一：粒子法, 丸善, 東京, (2005)
- 3) 越塚誠一：粒子法シミュレーション, 培風館, 東京, (2008)
- 4) 平田直哉：ふえらむ, 19 (2014) 11, 781.
- 5) L.B.Lucy : Astronomical Journal, 82 (1977) , 1013.
- 6) J.J.Monaghan : Computer Physics Communication, 48 (1988) , 89.
- 7) J.J.Monaghan : Journal of Computational Physics, 110 (1994) , 339.
- 8) 森正樹, 財前航介, 若林貴士, 伊藤公久, 宮田政樹 : CAMP-ISIJ, 25 (2012), 991.
- 9) 栃木隆宏, 藤谷俊祐, 森正樹, 伊藤公久, 宮田政樹 : CAMP-ISIJ, 25 (2012), 992.
- 10) 中野美枝子, 伊藤公久 : 鉄鋼協会第168回秋季講演大会 学生ポスターセッション, (2014)
- 11) A.W.Adamson : Physical Chemistry of Surfaces 5th edition, John Wiley and Sons, New York, (1990) , 385.
- 12) J.N.Israelachivili : 分子間力と表面力 第3版, 朝倉書店, 東京, (2013) , 375.
- 13) 石井英二, 杉村泰介 : 日本機械学会論文集B, 78 (2012) , 1710.
- 14) 本郷卓也 : 日本機械学会東北支部第45 期秋季講演会, (2009) , 85.
- 15) M.Kondo, S.Koshizuka and M.Takimoto : Transaction of JSCES, (2007) , 20070028.
- 16) S.Natsui, R.Soda, T.Kon, S.Ueda, J.Kano, R.Inoue and T.Ariyama : Materials Transactions, 53 (2012) , 662.
- 17) W.G.Hoover and C.G.Hoover : Computing in Science and Engineering, (2001) , 78.
- 18) W.G.Hoover : 粒子法による力学, 森北出版, 東京, (2008)
- 19) 財前航佑, 伊藤公久 : CAMP-ISIJ, 27 (2013), PS-5.
- 20) F.M.Fowkes : Ind.Eng.Chem., 56 (1964) , 40.
- 21) 荒木健, 越村俊一 : 土木学会論文集B2, 66 (2010) , 66.
- 22) 助永壮平, 春木慎一郎, 山岡由宗, 齊藤敬高, 中島邦彦 : 鉄と鋼, 95 (2009) , 807.

(2014年8月1日受付)