



## 私の論文

／ 今振り返ってみて、行間にこめた思い、エピソード

# 充填層の不均一な熱物質移動特性

—離散要素による新たな製鉄プロセス設計—

Heat and Mass Transfer Characteristics in the Non-uniform Packed Bed

—New Designing Ironmaking Process Using Discrete Element Simulation Model—

夏井俊悟  
Shungo Natsui

北海道大学 大学院工学研究院  
材料科学部門  
助教

## 1 はじめに

このたび、平成25年度俵論文賞受賞論文「粒子配置を考慮した充填層の熱物質移動解析」について著者個人の視点から紹介する機会を頂いた。ここに本誌面を拝借し、改めて本研究を遂行するにあたりご指導、ご支援をいただいた皆様に深甚なる謝意を表したい。ここでは研究の着想と論文を執筆するに至った背景、さらには今後の研究展望について紹介させていただきたいと思う。

## 2 論文の概要

環境負荷が大きい製鉄プロセスにおいて、地球温暖化防止の背景からCO<sub>2</sub>排出量削減が継続的かつ重要な課題とされている。鉄鉱石を鉄原料、炭素を還元材として連続的に鉄鉄を生産する高炉法においては低還元材比操業、さらにはコスト競争力の観点から低コークス比操業への要求が高まっている。一方では2008年のリーマンショック以来、高出鉄比を維持した低還元材比操業が求められ、この課題へのアプローチとして、コークスと焼結鉱の混合装入、廃プラスチック吹込、高反応性コークスの使用など様々な手法が模索されている。これらの方法は熱力学的あるいは熱工学的に上述の問題を解決する方策であるが、同時に炉内分布が不透明化することが予測され、従来の経験に基づいた操業設計が困難になってきている。適切な操業設計指針が粒子層の局所的な熱移動および反応挙動、流れの高精度な予測によって実現するのは議論の余地がない。

高炉内部は、原料と還元材からなる固体粒子が作る充填構

造、温度場と反応場の大きな不均一性、固気液粉が共存する向流型移動層を特徴とする複雑なシステムである。稼動している炉の半数が内容積5000 m<sup>3</sup>以上の大型反応容器であるため、充填層内は可視光をまったく透過せず、高還元雰囲気かつ高温のため直接的な計測が困難である。これに対して、高速な計算力を背景としたコンピュータシミュレーション利用によるモデル解析技術は、高炉内部で生じる運動量、熱、物質の移動を総括的に可視化できる有用なアプローチとして注目され続けている。後述するが、近年のCPUのマルチコア化やGPUの高性能化・高容量化、NVLinkなどのインターコネクト技術によりコンピュータの情報処理速度がますます向上しており、様々な分野で応用され、解析スケールも大きく広がっている。中でも離散要素法 (Discrete Element Method, DEM) に代表されるLagrange的記述による3次元解析が、充填層の荷下がり挙動や応力場の理解において有用な成果をあげている。さらには、連続流体運動とのカップリングであるDEM-CFDシミュレーションの高炉プロセスへの応用が従来よりも広いスケールで可能となっている<sup>1,2)</sup>。高炉プロセス解析の解像度を向上させ、窓の広いスケールでの熱と物質移動の理解、さらには上述の操業設計に供するモデルを提案したい、とのコンセプトが本研究のモチベーションとなっている。

## 3 研究の進展

本研究が実行されたのは、著者が東北大学大学院博士課程 (H22-25) に在籍時であるが、テーマが策定されたのはそれ以前の修士課程時代に多元物質科学研究所山達郎教授

\* [今回の対象論文]

夏井俊悟, 昆 竜矢, 植田 滋, 加納純也, 井上 亮, 有山達郎, 桒上 洋: 「粒子配置を考慮した充填層の熱物質移動解析」, 鉄と鋼, Vol.98 (2012), No.7, pp.341-350 (第76回俵論文賞受賞論文)

主査の「分散現象に基づく次世代高炉数式モデルの開発」研究会 (H19-21)<sup>3)</sup>に参加させていただいたのがきっかけであった。なお、御所属・御役職は当時のものである。著者は、模型実験とDEMの比較に基づいた高炉型移動層構造に与える粒子物性の影響を調査中であったが、2009年2月の第8回研究会にて、現在の研究を紹介してみないかとお声掛けいただいて、当時神田にあった鉄鋼協会会議室に足を運んだ。製鉄分野の研究者、粉体力学解析をご専門とされる先生方が一堂に会している中、今思えば、内容は大胆なものであったと思うが、炉頂で形成された粒子構造は、粒子の摩擦や回転抵抗の物性に依らず荷下がり時に充填層内ではほぼ変化せず、その傾向は降下速度にもほぼ影響を受けないため、炉頂の安息角が高炉充填層を形成する支配的因子となるというものであった<sup>4)</sup>。この考察は意外にもある程度受け入れていただけたという印象があった一方、固体流れへ及ぼすスケールアップの問題、壁面の影響などを無視しているのご指摘もあった。余談であるが、議論は懇親会まで続き、有意義な時間を過ごさせていただいたのが、その後の進路決定のひとつのきっかけであったかと思う。

粒子運動を前述のDEMを用いて解き、流体運動は計算セルを用いたSIMPLE法などを用いて解くいわゆるDEM-CFD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別途流体抵抗のような付加的な物理モデルを導入することで連成するのが一般的である。その模式図をFig.1に示す。分割されたセルと呼ばれる空間にある粒子の位置は空隙率と平均粒径として平均化され、空間情報は減少するにもかかわらず、充填構造特性を反映しながら広いスケールでの分布を俯瞰することが可能であり、粒子移動特性からプロセス内応答までを予測したいという工業的なニ-

ズから広く用いられている。最近ではR-flow、PFC、STAR-CCMなど商用ソフトウェア使用環境も整っており、また、実粒子運動を代表粒子として平均化する実用的手法も開発されている。2009年冬には高炉内の粒子-流体運動を記述するプログラムのコーディングが完了し、このモデルによって解析を行ったところ、充填構造内ではネットワーク構造を有する不均一な応力分布が形成した。そのため、炉頂の安息角が気相の中心流によって低下する一方、荷重に対して気相流の与える影響は最大となるポッシュ部でも5%程度と見積もられた<sup>5)</sup>。気相流によって低下した安息角が、荷下がりした粒子充填構造へ与える影響<sup>6)</sup>をシームレスに説明できた。稼動羽口本数を変化させた炉下部の不均一な流れ構造の計算結果はsteel research international誌の表紙にも掲載され<sup>7)</sup>、新たな手ごたえを感じたつもりでいた。

## 4 本研究への展開

上記の運動量と同様、固気相の熱移動、物質移動もDEM-CFDモデルに組み込むことができる。粒子とセルに温度と化学種質量分率を与え、それぞれの輸送方程式を解けばよい。しかし、本質を失わないように炉内物質を単純化しても、ガス成分、鉱石の酸化鉄成分と脈石成分、コークスの炭材成分と灰分は少なくとも考慮する必要がある。相変化などを含めると反応は20種以上におよび、実粒子よりも拡大した代表粒子を用いると、収支誤差が蓄積して解が発散する傾向が非常に大きかった。原因は長く不明であったが、著者が試行錯誤を繰り返したところ、代表粒子内の温度分布を考慮しない場合、反応熱が相当に大きく見積もられ、非線形項が増大するのが一因であると考察した。粒子内部熱伝導と表面からの熱

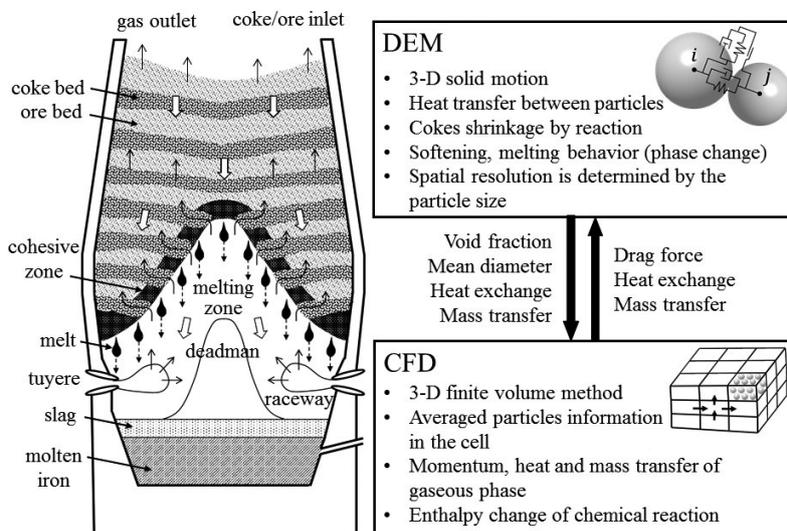


Fig.1 Schematic illustration of the Euler-Lagrange coupled blast furnace model.

伝達量の比はBiot数で表され、実粒子径を適用する場合はこれが十分低下するため粒子内温度分布は無視し得るが、代表粒子モデルでは成り立たない。また、瞬間的に反応が終了するレースウェイから数時間単位で移動する固体粒子層のタイムスケールを鑑みると、現実的な時間で炉全体のシミュレーションを実行するには、計算速度が全く不足していた。さらに、炉下部においては、すでに空隙率に加え液相率を与えることでDEMと連続体モデルをカップリングする方法を提案したが<sup>5)</sup>、焼結鉱の相変化速度と物質収支の整合性を維持することは非常に難しく、またいわゆる焼結鉱の軟化・溶融の動的挙動をHertzの弾性接触理論で評価する方法<sup>8)</sup>にも多くの疑問が残っていた。

やはり“千里の道も一歩から”であり、高炉全体を俯瞰するモデルを構築するにはEuler-Lagrangeモデルは知見が明らかに不十分であることを認め、まずはDEM-CFDが対応できるスケールに着目すべきで、まずは粒子の変形が微小で反応速度が比較的緩やかなシャフト部分に着目したモデル作成に取り掛かることにした。さらに簡略化するため、固定層中を通過する気相の流れ場を仮定した。複雑な粒子物性変化には、焼結鉱の多界面未反応核モデルやコークスのshrinkingをDEMへ組み込むことで評価した。震災による中断はあったが、幸いバックアップデータを復旧して何とか試作コードが完成した。実粒子径で構築された充填層および気相の熱物質移動シミュレーション結果をFig.2に示す。論文では円筒

座標系を適用したが、この試作コードでは直行格子を使用しており、高炉壁面への対応が困難である半面、物質収支の観点からは有利であった。粒子構造による影響が連続体モデルにも反映されたユニークな結果となっており、異粒径間の空隙形状変化によって局所的な筋状通気パスが形成され、気相の流速・温度・濃度の垂直方向の分布が現れている。論文にも記載したとおり、本モデルでは反応熱が他の伝熱形態と比較して支配的と見積もられたため、1273K付近の充填粒子層の温度は粒子単位では不均一であり、また壁付近ほど還元率が高い結果となった。すなわち、流速の大きさに比例して還元が進行しており、従来検討されてきた粒子温度と配置によって気相の流れと還元の空間不均一性を可視化することができた。

## 5 今後の展望

本論文では、低還元材比操業を見据えた高炉の伝熱・反応特性制御に視点を置き、その特性を粒子配置特性から予測する手法を紹介した。本成果により、充填層構造の性能と粒子スケールでの特性との関係を導く数値解析ベースの階層型シミュレーションモデルの構築に前進したといえる。一方でコンピュータ技術の進展は速く、本論文に記述した解析の実行から早5年が経過し、現在の計算環境は当時と全く異なるものとなっている。更なるスケール幅を持つ充填層を対象としたシミュレーション技術が次々と実行されている<sup>9-11)</sup>。同時に今後、早急に取り組み解明していく必要があると考えられる問題も多数浮き彫りとなってきた。高炉全体を俯瞰しながらも、その枠組みの中で要素モデルを構築することが必要である。著者が現在取り組んでいる離散要素をベースとした研究の模式図をFig.3に示す。すなわち、充填層を滴下する融体の自由界面形状<sup>12-14)</sup>、充填層中の粉体閉塞メカニズムの解明<sup>15,16)</sup>、焼結鉱熔融に伴う固液共存場の力学モデル構築<sup>8,17)</sup>、高炉原料の形状の及ぼす局所的閉塞への影響<sup>18)</sup>、Lagrange的解法による気液二相流の直接解析モデル構築<sup>19)</sup>、高反応性原料利用と粒子配置による熱移動特性と反応場の最適化<sup>20-22)</sup>が挙げられる。また、今後も続くと思われる計算機技術の発展は、さらなる大規模演算を可能にしていくと考えられる。現在、産業界における全粒子体系で $10^9$ 個オーダーの粒子数が求められている一方、現在、GPU TESLA-K80を利用したマルチコアGPU計算を行ったところ $10^7$ 個オーダーの粒子がリーズナブルに計算できるようになっており、さらにTESLA-P100とNVLinkの組み合わせでパフォーマンス向上が見込まれる。最先端の大規模計算プロジェクトでは、東京大学FX10スーパーコンピュータシステム全系を用いて、 $8 \times 10^{10}$ 個級DEM粒子の性能評価が実行され、超大規模シミュ

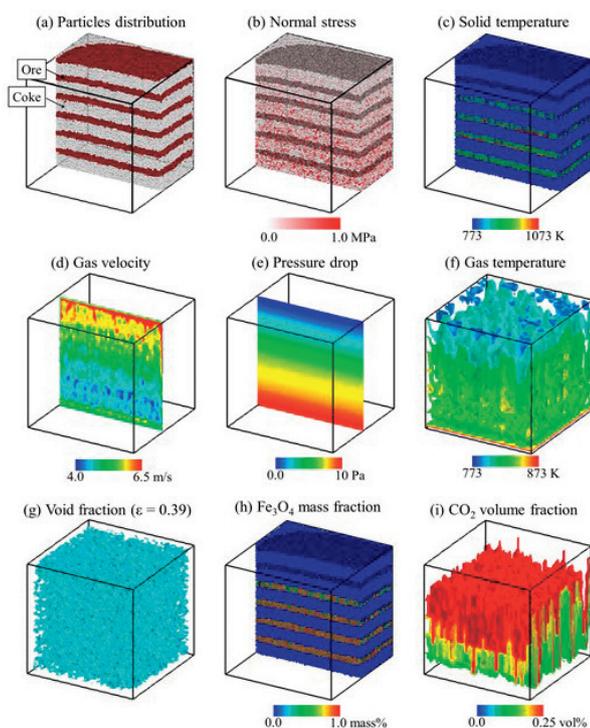


Fig.2 Various 3-D simulated results of heat and mass transfer in layer-by-layer structure.

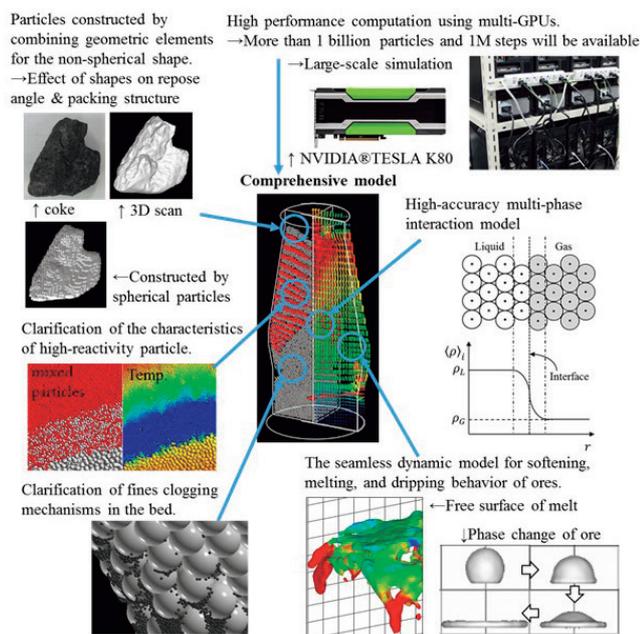


Fig.3 Future perspective for innovative blast furnace mathematical model.

レーションを活用したさらなる複雑な現象のメカニズム解明への進展が期待できる。そのためには、我々ユーザー側の計算機資源利用も高度化する必要があり、多機能型数学モデルを多く開発すると同時に、その信頼性確立について多角的な見当を重ねていくことが肝要だろう。その上で、高温化学、計測、解析、数値計算など製鉄プロセスに適合する異分野の集結によって知の相乗効果を生み出し、今後の進むべき方向性を見極める視点が、多様化する製鉄プロセス研究のさらなる活性化と革新へとつながると信じる。

参考文献

1) S.Yuu, T.Umekage, S.Matsuzaki, M.Kadowaki and K.Kunitomo : ISIJ Int., 50 (2010), 962.  
 2) W.J.Yang, Z.Y.Zhou and A.B.Yu : Chem. Eng. J., 278 (2015), 339.  
 3) S.Ueda, S.Natsui, H.Nogami, J.Yagi and T.Ariyama : ISIJ Int., 50 (2010), 914.  
 4) 夏井俊悟, 植田滋, F.Zhenyun, 加納純也, 井上亮, 有山達郎 : 鉄と鋼, 96 (2010), 1.

5) S.Natsui, H.Nogami, S.Ueda, J.Kano, R.Inoue and T.Ariyama : ISIJ Int., 51 (2011), 41.  
 6) 西尾浩明, 有山達郎, 佐藤道貴 : 鉄と鋼, 73 (1987) 1527.  
 7) S.Natsui, S.Ueda, H.Nogami, J.Kano, R.Inoue and T.Ariyama : Steel Res. Int., 82 (2011), 964.  
 8) H.Kurosawa, S.Matsushashi, S.Natsui, T.Kon, S.Ueda, R.Inoue and T.Ariyama : ISIJ Int., 52 (2012), 1010.  
 9) W.Zhong, A.Yu, X.Liu, Z.Tong and H.Zhang : Powder Technol., 302 (2016), 108.  
 10) G.D.Wehtinger, T.Eppinger and M.Kraume : Chem. Eng. Sci., 122 (2015), 197.  
 11) G.M.Karthik and V.V.Buwa : AIChE J., 63 (2017) 1, 366.  
 12) S.Natsui, R.Soda, T.Kon, S.Ueda, J.Kano, R.Inoue and T.Ariyama : Mater. Trans., 53 (2012), 662.  
 13) S.Natsui, T.Kikuchi, R.O.Suzuki, T.Kon, S.Ueda and H.Nogami : ISIJ Int., 55 (2015), 1259.  
 14) T.Kon, S.Natsui, S.Ueda and H.Nogami : ISIJ Int., 55 (2015), 1284.  
 15) S.Natsui, S.Ueda, H.Nogami, J.Kano, R.Inoue and T.Ariyama : Chem. Eng. Sci., 71 (2012), 274.  
 16) S.Kikuchi, T.Kon, S.Ueda, S.Natsui, R.Inoue and T.Ariyama : ISIJ Int., 55 (2015), 1313.  
 17) S.Matsushashi, H.Kurosawa, S.Natsui, T.Kon, S.Ueda, R.Inoue and T.Ariyama : ISIJ Int., 52 (2012), 1990.  
 18) S.Natsui, H.Takai, R.Nashimoto, K.Ohno, S.Sukenaga, T.Kikuchi and R.O.Suzuki : AIChE J., doi : 10. 1002/aic. 15538.  
 19) S.Natsui, H.Takai, T.Kumagai, T.Kikuchi and R.O.Suzuki : Chem. Eng. Sci., 111 (2014), 286.  
 20) S.Natsui, R.Shibasaki, T.Kon, S.Ueda, R.Inoue and T.Ariyama : ISIJ Int., 53 (2013), 1770.  
 21) S.Natsui, T.Kikuchi and R.O.Suzuki : Metall. Mater. Trans. B, 45 (2014), 2395.  
 22) S.Natsui, H.Takai, R.Nashimoto, T.Kikuchi and R.O.Suzuki : Int. J. Heat Mass Transf., 91 (2015), 1176.

(2016年11月29日受付)