

CO₂排出ミニマムを目指した実高炉内の4相（固気液粉）流れの大規模シミュレーション

プロジェクト責任者

松崎 眞六 新日本製鐵株式会社 技術開発本部 製鉄研究開発部

著者

湯 晋一、大岳 R & D コンサルタント事務所

梅景 俊彦、九州工業大学 工学部 機械知能工学科

松崎 眞六*1、国友 和也*1、内藤 誠章*1

*1 新日本製鐵株式会社 技術開発本部 製鉄研究開発部

廣川 雄一*2、板倉 憲一*2、上原 均*2

*2 独立行政法人 海洋研究開発機構 計算システム計画・運用部

抄録

本プロジェクトでは、ガス流れを記述するNavier-Stokes 式、粒子の不連続な運動を記述する離散要素法 (DEM) を連成して実高炉内現象を計算するシミュレーションモデルを開発し、CO₂増加の最大の原因である不安定現象を再現し、その防止法を提示する。最終的には四相の運動、反応、伝熱、物質移動を全て連成して計算し、それらの運動等を明らかにして、それに基づきCO₂削減のための高効率で安定な操業技術を明らかにする。本プロジェクトの初年度である本年度は課題選定委員会からのコメントにしたがい、地球シミュレータでプログラムを実行するための準備期間として、申請プログラムの最適化や高度化を主に行った。すなわちDEMを用いて、実高炉の円周方向 1/4 (90 度分) の領域においてコークスと鉄鉱石を層状に配置し、沈降させて初期状態を形成し、そこに羽口から速度 250m/s で気流を吹き込むところまでのシミュレーションをおこなった。その際、本プログラムの最も大きな問題であるDEMのベクトル化、並列化がなされた。利用ノード数は 16 ノード (128AP)、気流の計算セル数は 840 万、粒子数はその時点で 550 万個であった。粒子の沈降状態の計算結果から初期における羽口間、粒子間の相互影響からランダムで一様な初期状態の形成などの結果がえられた。

キーワード：実高炉、DEM、Navier Stokes 式、非定常不安定流れ、コークス、鉄鉱石

1. はじめに

CO₂削減に大きく寄与する飛躍的に高効率で変動のない安定な操業技術の開発のためには実高炉全体の気流、コークス、鉄鉱石、鉄鉱石が溶けて形成する融着帯の運動を明らかにする必要がある。高炉内部は千数百度という高温でかつ気流と高濃度の粒状体および鉄鉱石の溶融帯が複雑に運動し、堆積しているため、内部状態の正確な測定は現在でも不可能に近い。したがって、高炉の内部の状態は未知の部分が多く、それらを明らかにすれば格段に高い効率でかつ安定に操業できる技術の開発が可能となる。また京都議定書には大

気中のCO₂の増加による地球温暖化現象が進行し、地球環境の危機的状態の到来が示されている。わが国の全高炉からのCO₂発生量は全産業からの約 15%にも及ぶ。高炉の高効率で安定な操業技術の開発は銑鉄の製造と言う観点だけでなく、地球の温暖化防止にも非常に重要な役割を担っている。

高炉の内部の状態を明らかにし格段に高効率で安定な操業技術を開発する手法として、高炉内部での測定、実験が困難であるため、数値シミュレーションが最も有望である。しかし高炉は高さが約 30 mと大規模大型装置であるため、通常のコンピューターでは実高炉の数百分の1の領域しか計算できない。そこで世界第一級の容量と演算スピードをもつ地球シミュレータを用いて実高炉内の運動、状態を計算し、内部の状態を明らかにし、上述の格段に高効率で安定な操業方法を明らかにして、排出CO₂の削減に大きく寄与することを達成したい。

本プロジェクトの初年度である本年度は課題選定委員会からのコメントにしたがい、地球シミュレータでプログラムを実行するための準備期間として、申請プログラムの最適化や高度化を主に行った。また、離散要素法 (DEM) を用いて、実高炉の周方向 1/4(90 度分)の領域においてコークスと鉄鉱石を層状に配置して、沈降させ初期状態を形成し、そこに羽口から速度 250m/s で気流を吹き込むところまでのシミュレーション結果をえた。その際、本プログラムの最も大きな問題である DEM のベクトル化、並列化がなされた。利用ノード数は 16 ノード (128AP) で、気流の計算セル数は 840 万、その時点での粒子数は 550 万個であった。

2. 実高炉内のコークス、鉄鉱石および気流の計算方法

コークス粒子の運動の基礎式は、直交座標系における並進および回転に関する Lagrangian 型運動方程式で、それぞれ次式で表される。

$$m_p \frac{d(U_{pi})}{dT} = \sum_j (F_j + D_j)_i + F_{Di} + F_{Li} + F_{gi} \quad (1)$$

$$I_p \frac{d(\Omega_{pi})}{dT} = \sum_j (M_j + M_{Dj})_i + M_{Fi} \quad (2)$$

Eq.(1),(2)の右辺第 1 項は、それぞれ着目粒子と直接接触する全粒子から作用する接触力および接触力モーメントの総和で、DEM^{1,2)}を用いて計算した。Eq.(1)の F_{Di} , F_{Li} はそれぞれ粒子に作用する抗力と揚力で、その反作用力が気流に作用する S_t および S_{tL} で下記の気流のところで示しているEq.(7)-(9)で求まる。これらの項で粒子の運動と気流の運動がリンクされ、それらが連成された運動が求まる。Eq.(1)の F_{gi} は粒子に作用する重力、Eq.(2)の M_{Fi} は粒子が流体から受ける摩擦トルクである。なお本計算では流体による摩擦トルク M_{Fi} をTakagi³⁾の式に基づいて計算した。

気流の運動の基礎式は、空隙率及び粒子との相互作用を考慮した無次元化された円柱座標系の Navier-Stokes 式と連続の式で、それぞれ次式で表される。

(r 方向)

$$\begin{aligned} & \varepsilon \frac{\hat{a}u_r}{\hat{a}} + \varepsilon u_z \frac{\hat{a}u_r}{\hat{a}z} + \varepsilon u_r \frac{\hat{a}u_r}{\hat{a}r} + \varepsilon \frac{u_\theta}{r} \frac{\hat{a}u_r}{\hat{a}\theta} - \varepsilon \frac{u_\theta^2}{r} \\ &= -\varepsilon \frac{\hat{a}p}{\hat{a}r} + \frac{1}{Re} \varepsilon \left[\frac{1}{r} \frac{\hat{a}u_r}{\hat{a}r} + \frac{\partial^2 u_r}{\hat{a}z^2} + \frac{\partial^2 u_r}{\hat{a}r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} - \frac{u_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\hat{a}u_\theta}{\hat{a}\theta} \right] - St_r - St_{Lr} \end{aligned} \quad (3)$$

(θ 方向)

$$\begin{aligned} & \varepsilon \frac{\hat{a}u_\theta}{\hat{a}} + \varepsilon u_z \frac{\hat{a}u_\theta}{\hat{a}z} + \varepsilon u_r \frac{\hat{a}u_\theta}{\hat{a}r} + \varepsilon \frac{u_\theta}{r} \frac{\hat{a}u_\theta}{\hat{a}\theta} + \varepsilon \frac{u_r u_\theta}{r} \\ &= -\varepsilon \frac{1}{r} \frac{\hat{a}p}{\hat{a}\theta} + \frac{1}{Re} \varepsilon \left[\frac{1}{r} \frac{\hat{a}u_\theta}{\hat{a}r} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\hat{a}z^2} + \frac{\partial^2 u_\theta}{\hat{a}r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial \theta^2} - \frac{u_\theta}{r^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\hat{a}u_r}{\hat{a}\theta} \right] - St_\theta - St_{L\theta} \end{aligned} \quad (4)$$

(z 方向)

$$\begin{aligned} & \varepsilon \frac{\hat{a}u_z}{\hat{a}} + \varepsilon u_z \frac{\hat{a}u_z}{\hat{a}z} + \varepsilon u_r \frac{\hat{a}u_z}{\hat{a}r} + \varepsilon \frac{u_\theta}{r} \frac{\hat{a}u_z}{\hat{a}\theta} \\ &= -\varepsilon \frac{\hat{a}p}{\hat{a}z} + \frac{1}{Re} \varepsilon \left[\frac{1}{r} \frac{\hat{a}u_z}{\hat{a}r} + \frac{\partial^2 u_z}{\hat{a}z^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\hat{a}r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial \theta^2} \right] - St_z - St_{Lz} \end{aligned} \quad (5)$$

(連続の式)

$$\frac{\partial \varepsilon}{\hat{a}} + \varepsilon \frac{u_r}{r} + \varepsilon \frac{\hat{a}u_z}{\hat{a}z} + \varepsilon \frac{\hat{a}u_r}{\hat{a}r} + \frac{1}{r} \varepsilon \frac{\hat{a}u_\theta}{\hat{a}\theta} = 0 \quad (6)$$

式中の St および St_L はそれぞれ気流・粒子間で作用する抗力と揚力で気流と粒子の相互干渉項を表わす。前述したようにこれらがEq.(1)の F_D と F_L に相当し、気流と粒子が連成された運動が求まる。

気流・粒子間で作用する抗力による相互干渉項には、粒子周りレイノルズ数が 1000 以下の場合には Shiller and Naumann の実験式⁴⁾に基づく次式を用い、

$$St = \frac{3\pi\mu D_p ND(1 + 0.15 Re_p^{0.687})}{U_0 \rho} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \xi(\varepsilon) \quad (0 \leq Re_p \leq 1000) \quad (7)$$

粒子周りレイノルズ数が 1000 より大きい場合には Newton 域の抗力係数に基づく次式を用いた。

$$St = 0.055\pi D_p^2 ND (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p)^2 \xi(\varepsilon) \quad (1000 < Re_p) \quad (8)$$

気流・粒子間で作用する揚力による相互干渉項には揚力係数に基づく次式を用いた。

$$St_L = \frac{\pi}{16} \left(\frac{C_L}{\Omega^*} \right) D_p^3 N(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \times \left(\frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u} - \boldsymbol{\omega}_p \right) \xi_L(\varepsilon) \quad (9)$$

本計算ではKurose and Komoris⁵⁾が数値計算によって求めた揚力係数のデータを著者らが数式化して用いた。

数値計算では Navier-Stokes 式の慣性項の計算には4次の中心差分を、その他の空間微分項の計算には2次の中心差分を適用し、Navier-Stokes 式のダイバージェンスを取って得られる圧力に関するポアソンの式を、緩和法を用いて計算した。

DEM と Navier-Stokes 式の計算条件を表1に示す。

表1 計算条件

計算領域（炉体）寸法	半径： $R_o = 7,350$ mm（羽口部）， $R_f = 8,379$ mm（ベリ一部） 周方向： 90° ，高さ： $H = 27,840$ mm（炉頂まで）
計算時間ステップ	$\Delta T = 5.0 \times 10^{-5}$ s
気流計算セル数（内点）	57（ r 方向） \times 140（ θ 方向） \times 348（ z 方向）
気流計算セル幅（有次元値）	$\Delta r = 147.0$ mm, $\Delta \theta = 1.122 \times 10^{-2}$ rad, $\Delta z = 80.0$ mm
羽口（ノズル）気流噴出速度	$U_o = 250$ m/s
計算粒子径	炉壁および羽口を構成する粒子： 50.0 mm（均一） コークス粒子：平均径 57 mm （最小径 39.5 mm～最大径 67.5 mm） 鉱石粒子：平均径 45 mm （最小径 41.0 mm～最大径 49.0 mm） コークス粒子と鉱石粒子は粒径分布と粒度偏析を考慮。
計算粒子数	炉壁および羽口を構成する固定粒子の数：約 23.5 万個 重力沈降開始時の初期配置粒子数： コークス粒子：約 257.8 万個 鉱石粒子：約 207.8 万個 荷下り時に炉頂部から1チャージ毎に供給する粒子数： コークス粒子：約 7.7 万個 鉱石粒子：約 20.8 万個 最大計算粒子数：合計 900 万個
計算粒子の見掛け密度	コークス粒子： 1050 kg/m ³ , 鉱石粒子： 3260 kg/m ³
計算粒子のその他の物性	縦弾性係数： $E = 1.0 \times 10^7$ N/m ² , ポアソン比： $\nu = 0.25$, 摩擦係数： $\mu = 0.45$

3. 計算プログラムの最適化

ベクトル化については、粒子の衝突過程のベクトル化などを行い、約 10 倍高速化を達成した。ベクトル化率向上よりも実行速度向上を重視したため、ベクトル化率は 77.2%である。またメモリーへのデータ配置の最適化を行い、キャッシュミスおよびバンクコンフリクトを約 7 割削減した。

並列化については、分散メモリー並列化および共有メモリー並列化をおこなった。この結果、並列化率は 99.1%である。

以上のことにより、900 万個の粒子の場合、最適化した計算プログラムはオリジナルのそれと比較して約 53 倍以上の高速化が達成されている。

4. 実高炉内の計算

初年度である本年度は、地球シミュレータでプログラムを実行するための準備期間と位置づけ、申請プログラムの最適化や高度化を行った。すなわち離散要素法 (DEM) を用いて、実高炉の周方向 1/4 (90 度分) の領域においてコークスと鉄鉱石を層状に配置して、沈降させ初期状態を形成し、そこに羽口から速度 250 m/s で気流を吹き込み、気流の運動を表わす Navier-Stokes 式と粒子の運動を表わす DEM 方程式を連成して計算した。ただし気流は羽口出口のところまでしか現在のところ結果はえられていない。本プログラムの最も大きな問題である DEM (その時点で 550 万粒子) のベクトル化、並列化がなされた。以下に計算結果を示す。図中のカラーバーの数字の単位は全て cm/s である。

図 1 に実高炉の右側半分の鉛直断面におけるコークスと鉄鉱石が層状に堆積され、沈降していく際の鉛直方向の粒子速度 (上向き正) をカラーコンタ (初期状態から 10000 $\Delta T=0.50s$ 後) で示す。

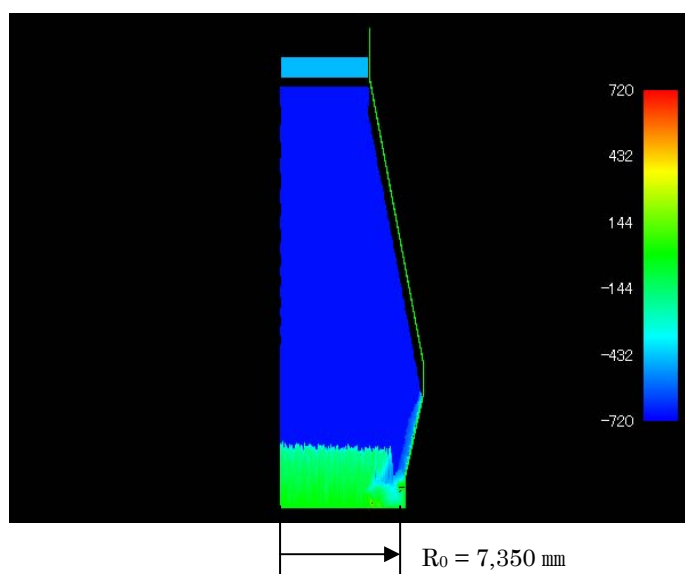


図 1 実高炉と同一寸法の高炉における粒子沈降速度コンタ (右側鉛直断面図, 10000 $\Delta T=0.50s$)

一様に沈降している粒子群はボッシュ部の壁近傍で複雑な流れとなり、羽口近くで大きく乱れている（後出の図2に詳しく現れている）のが分かる。また底に着いた粒子は跳ね返り、正の速度をもってわずかに上昇する。

図2に羽口近傍の羽口を含む鉛直断面での鉛直方向の粒子速度をカラーコンタ（初期状態から $10000 \Delta T = 0.50s$ 後）で示す。0.50s 後だと一様速度で沈降する粒子への羽口の影響がまだ直接現れ、複雑な流れを示している。図3の1.05s 後になると、粒子速度はランダムな一様速度に変化し、その後、静止状態へと進むことが予測される。時間が経過すると、

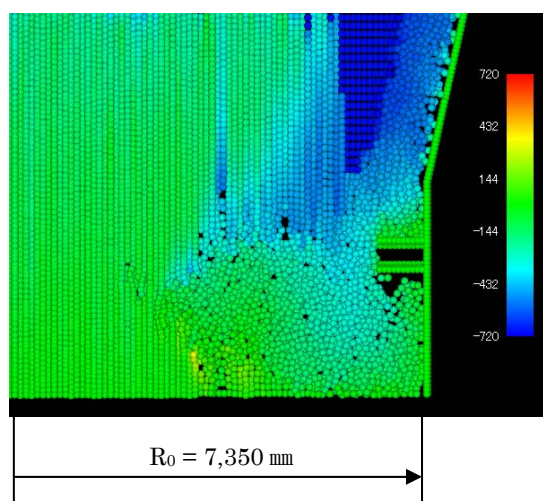


図2 実高炉と同一寸法の高炉における粒子沈降速度コンタ（羽口近傍の鉛直断面図, $10000 \Delta T = 0.50s$ ）

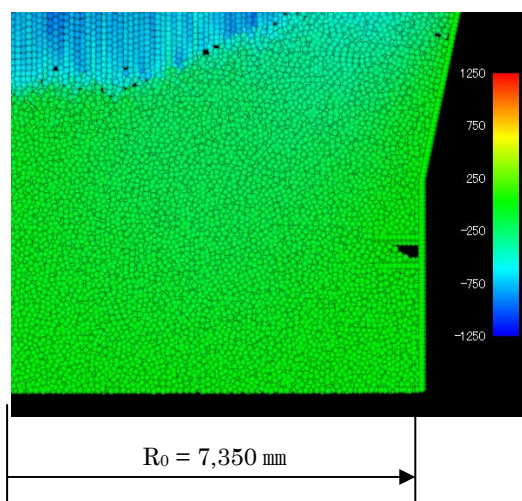


図3 実高炉と同一寸法の高炉における粒子沈降速度コンタ（羽口近傍の鉛直断面図, $21000 \Delta T = 1.05s$ ）

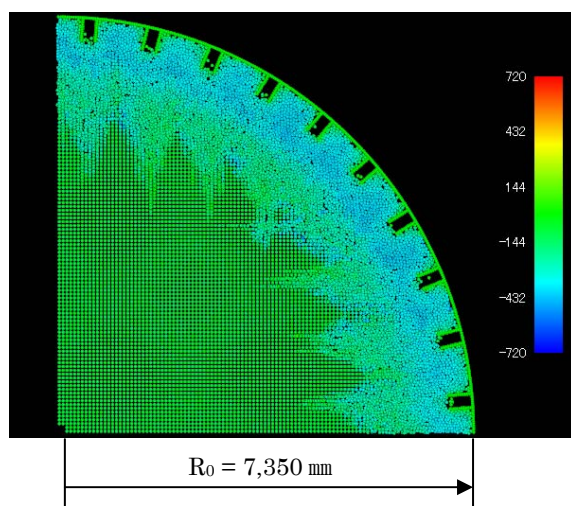


図4 実高炉と同一寸法の高炉における粒子沈降速度コンタ（羽口を含む水平断面図, $10000 \Delta T = 0.50s$ ）

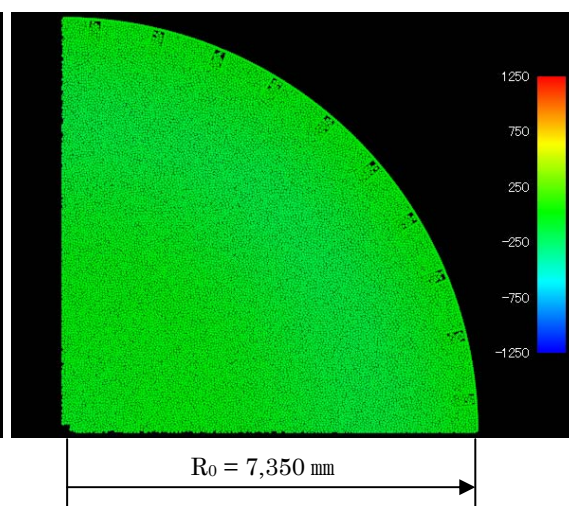


図5 実高炉と同一寸法の高炉における粒子沈降速度コンタ（羽口を含む水平断面図, $21000 \Delta T = 1.05s$ ）

このランダムな一様状態が一瞬（短時間）にして高炉全体に現出し、現実の高炉の初期状態に近い充填状態が形成されると考えられる。同様の計算結果の水平断面での（炉頂から見下ろした）様子を図 4, 5 に示す。沈降初期における粒子の沈降流の羽口を介しての相互影響が図 4（0.5s 後）に示されている。1.05s 後（図 5）になると、沈降や相互干渉が進み、断面全体にわたってランダムな一様状態が形成されている。これに速度 250m/s の気流を羽口から噴出させたが、現在のところ、羽口の出口までしか計算が進んでいない。

5. 今後の方針および計画

平成 18 年度で実高炉の周方向 1/4 の領域の粒子（高炉内に層状に堆積しているコークスと鉄鉱石を DEM で計算）と気流の連成計算プログラムの地球シミュレータへの最適化はほぼ達成されているので、これを用いて実高炉内の非定常なガス流れ、固体粒子の運動、形成融着帯の役割を明らかにする。実高炉の周方向 1/4 の領域の計算でケーススタディを行うと膨大な計算時間となる場合は領域を縮小して異常現象の解明に焦点をあてて計算する。これらを用いて高炉内部の不安定な異常現象の再現、予測をおこない、発生原因を明示する。計算結果に基づき、高炉の安定で高効率操業の手法を提案する。これらの結果を踏まえて、実高炉内の反応と伝熱をモデル化し、反応と伝熱を考慮した全ての固気液粉を SPH 法によって連成し計算する。得られた結果は現在最も現実の高炉に近いデータと考えられるが、それらを基にして高効率操業による CO₂ の低減のシーズを提言する。

謝 辞

本研究に関して、独立行政法人 海洋研究開発機構 計算システム計画・運用部の平野 哲 部長、北脇 重宗 調査役、新宮 哲 産業推進グループリーダーから貴重なご指導、ご助言をいただいた。またプログラムの最適化において津田 義典氏（日本電気株式会社）から貴重で有用なご指導、ご助言をいただいた。ここに記して感謝の意を表します。

参考文献

- 1) P.A.Cundall and O.D.L.Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies”, *Geotechnique*, Vol.29, pp.47-65, 1979.
- 2) S. Yuu, T.Umekage and Y.Johno, “Numerical simulation of air and particle motions in bubbling fluidized bed”, *Powder Technol.*, Vol.110, pp.158-168, 2000.
- 3) H.Takagi, “Viscous flow induced by rotation of a sphere”, *J.Phys.Soc.Jpn.*, Vol.42, 319-325, 1977.
- 4) L.Schiller and A.Naumann, “Ber die Grundlegenden Berechnungen bei der Schwerkraftaufbereitung”, *Z. Ver. Dtsch. Ing.*, Vol.77, 318-321, 1933.
- 5) R. Kurose and S. Komori, “Drag and lift forces on a rotating sphere in a linear shear flow”, *J.Fluid Mech.*, Vol.384, 183-206, 1999.

記号表

m_p :	粒子質量[kg]
U_p :	粒子速度[m \cdot s $^{-1}$]
F_j :	接触点 j での接触力[N]
D_j :	接触点 j での減衰力[N]
F_D :	粒子に作用する気流からの抗力[N]
F_L :	粒子に作用する気流からの揚力[N]
F_g :	粒子に作用する重力[N]
I_p :	粒子の慣性モーメント[kg \cdot m 2]
Ω_p :	粒子の角速度[rad \cdot s $^{-1}$]
M_j :	接触点 j での接触力によるモーメント[N \cdot m]
M_{Dj} :	接触点 j での減衰力によるモーメント[N \cdot m]
M_{Fi} :	粒子 i に作用する気流からの摩擦トルク[N \cdot m]
ε :	空隙率
u_r, u_θ, u_z :	無次元流速
Re :	レイノルズ数
St :	気流からの抗力による無次元相互干渉項
St_L :	気流からの揚力による無次元相互干渉項
p :	無次元静圧
μ :	気流の粘性[Pa \cdot s]
D_p :	粒子径[mm]
N :	単位体積あたりの粒子数[m $^{-3}$]
D :	羽口部分の高炉半径[m]
Re_p :	粒子レイノルズ数
U_0 :	羽口気流噴出流速[m \cdot s $^{-1}$]
ρ :	気流密度[kg \cdot m $^{-3}$]
\mathbf{u} :	無次元気流速度ベクトル
\mathbf{u}_p :	無次元粒子速度ベクトル
$\xi(\varepsilon), \xi_L(\varepsilon)$:	粒子集団系における抗力、揚力の補正関数
C_L :	揚力係数
Ω^* :	粒子の回転/並進速度の比
T :	時間[s]
t :	無次元時間
	(添字)
i, j :	粒子番号
p :	粒子
r, θ, z :	円柱座標系の各方向成分