

# Euler-Lagrange 法による高炉モデル

夏井俊悟<sup>1)</sup> 菊地竜也<sup>2)</sup> 鈴木亮輔<sup>3)</sup>

## 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・還元を行う工程である。現在の主な製鉄用高炉は内容積 3000~5000 m<sup>3</sup> の大型円筒容器で、これを満たす焼結鉱、コークスの充填層に加熱空気を通気する。図 1 に高炉内の流れを模式的に示す。炉内では、炉頂から装入された原料から、羽口付近の raceway と呼ばれるコークス燃焼帯まで約 500~2800 K と幅広い温度分布が生じる。したがって、コークスのガス化や融着帯での鉱石熔融の相変化、化学反応に伴う組成不均一性、粉体の発生など多くの原因によってプロセス中は固気液相が混在する系となる。

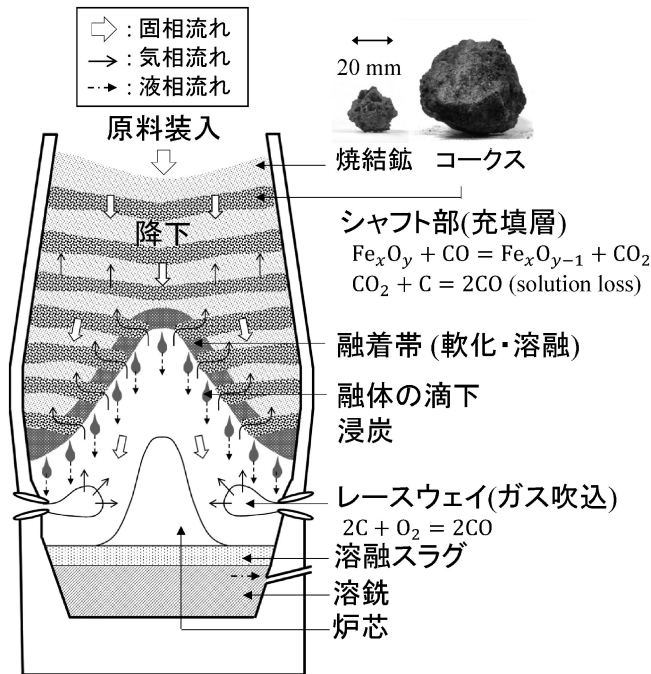


図 1 製鉄用高炉プロセスにおける各相の流れ。

近年では、CO<sub>2</sub> 排出量削減のために製鉄プロセス設計の見直しが図られ、主たる方策として低コークス比操業、還元材の水素置換、高反応性原料の使用が提案されてきた<sup>(1)</sup>。これらの方法は熱力学的には CO<sub>2</sub> 排出量削減が可能だが、炉内通気性や温度・反応場にも大きな影響を与えることが予想されている。炉内の流れに停滞が生じてしまうと操業は成り立たない。CO<sub>2</sub> 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。

適切な操業設計指針を得るため、数値解析を用いた非経験的な移動現象モデルが炉内現象予測に重要な役割を担ってきた。最近では、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取り扱いが困難であった現象の直接解析が実用的になってきた(例えば文献<sup>(2)</sup>)。固体粒子運動の計算方法である離散要素法 (DEM)<sup>(3)</sup>、およびその数値流体力学との連成手法<sup>(4)</sup>、また本特集号の記事にあるメッシュフリー粒子法を用いることで、今までブラックボックスとされてきた炉内のモデリングや、直接的な数値実験の試みがなされている。今後の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、DEM を中心に固気相の運動量、熱、物質移動を同時に解析する Euler-Lagrange 法によるモデルを対象とした紹介する。

## 2. DEM による固体粒子運動シミュレーション

高炉を特徴付ける原料の充填層構造は、数億個の粒子から形成され、これらによって炉内の流れが制御されると言っても過言ではない。充填構造を微視的観点で検討するために、個々の粒子運動を時間積分して考える。この立場では粒状体としての特性が顕在化するため、充填層を連続流体として近似しない。一般に固体粒子の運動は、並進および回転運動の運動方程式を支配方程式に外力項を付加して与えられる。運動の素過程を物理機構の面から理解するには、粒子同士の干渉を記述する必要がある。DEM は、粒子間の若干の重なり

\* 北海道大学大学院工学研究院材料科学部門；1)助教 2)准教授 3)教授(〒060-8628 札幌市北区北13条西8丁目)  
 Blast Furnace Modeling by Euler-Lagrange Method; Shungo Natsui, Tatsuya Kikuchi and Ryosuke O. Suzuki (Faculty of Engineering Hokkaido University, Sapporo)  
 Keywords: ironmaking blast furnace, discrete element method, Euler-Lagrange coupling method, packed bed, decreased coke ratio, pressure drop, reduction rate  
 2015年5月7日受理[doi:10.2320/materia.54.432]

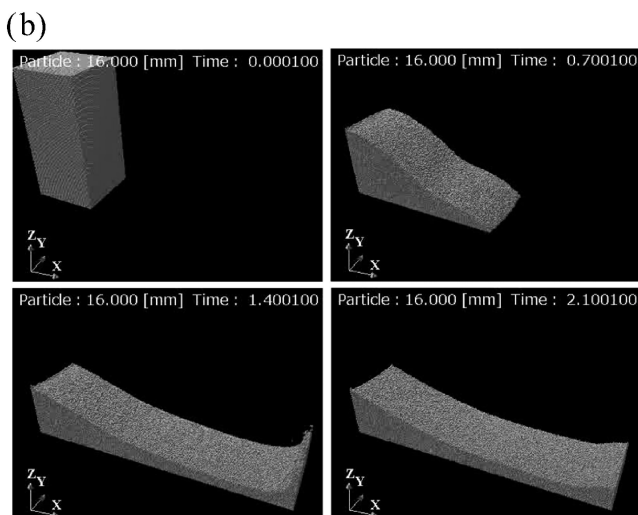
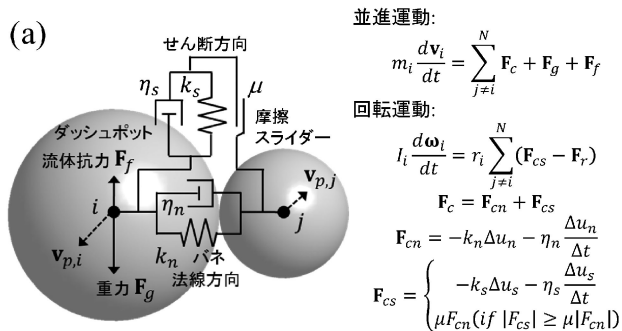


図2 DEMによる粒状体シミュレーション。(a) Heltzの理論に基づいた弾性接触モデル、(b)粒状体で構成されるダム崩壊計算例。

から粒子間反発力を与え、粒子群を構成する個々の粒子座標を時間発展的(非定常)に決定していく方法である。接触二粒子間にはバネとダッシュポットおよび摩擦スライダーが並列して接続されており、適切な各定数を与えることによって正確に粒子群の挙動を追跡できる。これらは Heltz の弾性接触理論<sup>(3)</sup>に基づいて、粒子の Young 率、Poisson 比から与えることが可能である。図2に粒子間に働く接触力の模式図と計算例を示す。このように DEM では連続流体や固体とも異なる粒状体運動がシームレスに再現される。

### 3. Euler-Lagrange 法による固気相運動量・熱・物質移動モデル

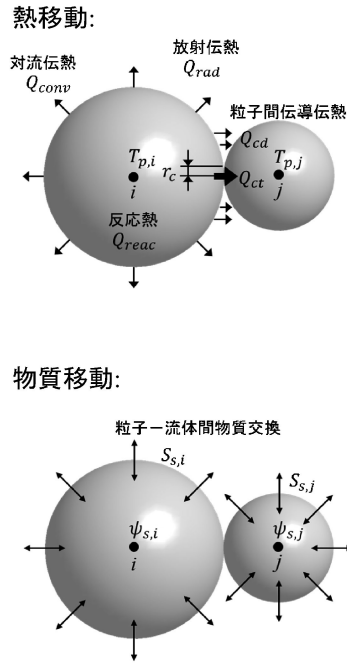
次に、固気二相流のモデリング手法をご紹介したい。固気流れを記述するには、流れに対して視点を固定する方法と動く視点による方法がある。流れている領域の1点に着目し、その位置における物理量の時間に対する変化を観察するのは Euler の方法、流体を流れる要素群ととらえ、それらの動きを観察するのは Lagrange の方法と呼ばれる。差分法や有限要素法などの空間をメッシュで分割する方法は Euler 的、DEM などの粒子法は Lagrange 的である。高炉モデルは、個々の固体粒子運動を計算メッシュ内で連続流体として近似

して解析するモデルが主流であり、セル内の気相率(空隙率)から固気相の流れと固気間運動量交換を共通の計算セルで独立に解く。このアプローチは、Euler-Euler 法と呼ばれる。ひとつのセルに2つの流体が存在するので two-fluid 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ため、粒子数がどれほど多くても計算負荷には無関係かつ定常解析が可能であるため、計算コストが低い。しかしながら、粒子群の運動方程式は流体と同様に Navier-Stokes 式の形で誘導されるため、個々の粒子の変動が平均化されてしまい、粒状体としての特性は無視される。また粒径分布や粒子間応力の取扱いが極めて複雑で困難となる短所がある。

一方、計算時間の問題から取り扱うことのできる粒子数が限られてしまうが、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のみで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 法と呼ばれる方法である。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 SIMPLE 法などを用いて解く。この直接解法のアプローチでは、粒子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、現在のスパコンを用いた大規模演算で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、別途流体抵抗モデルのような付加的なモデルを導入する方法がとられる(メゾスコピックモデルと称する)。この方法は、セル内の粒子情報を平均化するにもかかわらず、充填構造特性をかなり反映することができ、プロセス全体の分布を予測したいという工業的なニーズから広く用いられるようになってきた。

高炉の場合、粒子群が充填層を構成しながら下方へゆっくりと移動し、その間隙を気相が満たしながら流れるとき、同時に伝熱と物質移動が生じる。著者らは、メゾスコピックモデルを用いた高炉の熱・物質移動解析を実施した<sup>(5)</sup>。図3にその模式図とモデル式を示す。熱移動に関して、粒子間接触伝熱、対流伝熱、放射伝熱に反応熱を同時に考慮できる。また、固気間の化学反応はすべて1次反応と仮定して、鉍石還元には多界面未反応核モデル、コークスガス化には不均一触媒反応モデルをそれぞれ適用する。本モデルによって空間に固定した格子中で粒子の偏在と時間変化、これによる空間的不均一性を直接評価することが可能となる。

Euler-Euler 法は汎用で扱いやすく、かつ十分にマクロ的な分布情報が得られるのならば、わざわざ格子スケールで局所相平均する Euler-Lagrange 法で粒子毎に計算し、熱や物質移動を計算する必要は無いのではないかと疑問を持たれるかもしれない。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。Euler-Lagrange 法は、粒子毎の物性の変化に柔軟に



$$m_i C_{p,i} \frac{dT_i}{dt} = Q_{reac,i} - (\sum Q_{cond,i} + Q_{conv,i} + Q_{rad,i})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho_g C_{p,g} T_g) + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_g \mathbf{v}_g C_{p,g} T_g) = \varepsilon \lambda_g \nabla^2 T_g + Q_p$$

$$\frac{d\psi_{i,l}}{dt} = S_{i,l}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho_g \psi_g) + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_g \mathbf{v}_g \psi_g) = \varepsilon \Gamma_g \nabla^2 \psi_g + S_g$$

変数	モデル式
$Q_{cond,i}$	$\left( 2\lambda_i r_c + \frac{2\pi\lambda_g \left[ 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{r_c}{r_i} \right) \right] (r_i - r_c)}{1 - \frac{\pi}{4}} \right) \cdot (T_j - T_i)$
$Q_{conv,i}$	$\frac{\pi\lambda_g d_p^2}{6} (2.0 + 1.1 \text{Re}^{0.6} \text{Pr}^{\frac{1}{3}}) (T_i - T_g)$
$Q_{rad,i}$	$\sigma \phi_{ij} A_i (T_i^4 - T_b^4)$
$Q_{reac,i}$	$\begin{cases} \text{コークスガス化: } \frac{\pi d_p^3}{6} \left( \frac{1}{k_d} + \frac{1}{\eta_e k_{c,t}} \right)^{-1} C_{\text{CO}_2} (-\Delta H_i) \\ \text{鉱石還元: } \frac{4\pi r_i^2 p_g a_i}{R_g T_g} (-\Delta H_i) \end{cases}$
$S_{i,l}$	$\begin{cases} \text{コークスガス化: } \frac{\pi d_p^3}{6} \left( \frac{1}{k_d} + \frac{1}{\eta_e k_{c,t}} \right)^{-1} \frac{v_{i,l}}{M_i} C_{\text{CO}_2} \\ \text{鉱石還元: } \frac{4\pi r_i^2 p_g v_{i,l}}{R_g T_g M_i} a_i \end{cases}$

図3 Euler-Lagrange法に基づく熱および物質移動モデル。

対応でき、今後、高反応性コークスの使用や原料品位変化を直接モデル化可能であるため、炉内現象への影響を直接検討するために重要な役割を果たすと考えられる。

#### 4. Euler-Lagrange法による高炉解析の例

さて、本節では著者らが行ってきた具体的な高炉解析の例をご紹介します。まず、充填層を形成する粒子群をDEMによって解析した例を図4に示す。装入された原料粒子群は、単純に層状構造を形成するだけでなく、装入時の転動、降下に起因した変動、および異なる粒径に起因した percolation が同時に生じている。また、充填層下部では法線応力が大きい粒子のネットワーク構造が表れており、特に raceway 上部でアーチ状の応力場が炉内全体の荷重を支える形態をとる。炉下部においても荷重のかからない粒子の存在が興味深い。raceway 付近のすべりを伴う粒子によってその周りの応力場が支配され、非線形性の強い流れが誘起される。そのためコークス圧壊強度を超える可能性がある 2.0 MPa 以上の応力を示す粒子が存在する。応力場の不均一性は粒子粗視化近似の影響、すなわち実験での粒径分布を再現していないため未だ検証の余地があるものの、炉内通気性に影響を与えるコークス圧壊による粉化量を議論できる可能性を示している。

メソスコピックモデルによって解析した気相分布を図5に示す。図5(a), (b)に示すように、装入された粒子群との相互作用によって、炉頂の気相流れが中心方向へ変化する。著者らは、この効果によって安息角が低下、結果として炉芯高さが低下する結果を得ている<sup>(6)</sup>。温度、気相濃度はさらに複雑で、鉱石還元の発熱反応とコークスガス化による吸熱反応、さらには輻射と対流場が影響し合った結果である。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。気流が滞ると反応速度も低下するため、粒子配置は間接的に反応速度に影響する。このことは周・径方向の不均一性が無視できない可能性を示しており、高反応性原料を用いる場合には三次元的な配置を考慮した操業設計が重要であると考えられる。粒子配置を変化させた場合の相対還元率分布を図6に示す。図6(a)に示す層状構造では、流れの影響から高さ方向上部ほど、また径方向に壁方向ほど還元率が高い。コークス層へ侵入した鉱石の還元率はそれほど高くなく、CO分率増加による還元への影響感度は低い。鉱石層内は均一ではなく、高い反応率を有する粒子が所々存在する。一方、図6(b)に示す粒子混合構造では、明らかな反応率不均一性が見られる。これは異粒径混合によって粒子間温度勾配が大きくなったことが理由であり、安定な低炭素操業には粒子単位での温度制御が求められるだろう。しかし、粒子周りの流れ構造は局所相平均するメソスコピックモデルより小さいスケールで変動する報告がなされており<sup>(7)</sup>、本モデルでは空間解像度が不十分であるため、前述の直接解法によって本法との力学関係を明らかにしていく必要がある。

#### 5. おわりに

Euler-Lagrange法を中心に最近の高炉プロセスモデルの一例をご紹介します。DEMに各素過程の物理的意味付けを与えることで現象に直感的なモデルが構築されてきている。DEMの宿命的な課題としては、粒子を真球と仮定しているため凹凸を含む本質的な原料形状は表現できないことである。これに対して複数の計算点を相対位置が固定された剛体

