

ADEM シミュレーションによる充填層軟化挙動の予測

研究代表者 東北大学多元物質科学研究所 助教 石原真吾

1. はじめに

鉄鋼業においては、良質な鉄鋼資源の枯渇に伴う原料の低質化、高コスト化への対応および二酸化炭素排出量の削減が喫緊の課題となっている。高炉をはじめとする製鉄工程で使用されるエネルギーは製鉄所全体に投入されるエネルギーの約 70%といわれており、製鉄プロセスの省エネルギー化には高炉プロセスのエネルギー改革、とりわけ原料性状に対応した高炉操業が必要不可欠である。年々変化する資源環境に対応した安定的な操業のためには高炉内充填層の通気性の確保が重要である。充填層の通気性を低下させる要因として積層中における原料の軟化挙動が挙げられるが、現状では原料軟化挙動は十分に解明されていない。荷重軟化試験による温度、圧力、粒子充填構造における軟化を伴った粒子挙動と、高炉における実際の粒子挙動とを結びつけることはできておらず、原料最適設計や操業条件の最適化がなされているとは言い難い。

そこで本研究では、製鉄プロセスにおける高炉内充填層の軟化挙動をシミュレーションによって明らかにし、粒子が軟化することで充填層の通気性に与える影響について検討を行った。粒子軟化挙動のシミュレーションには離散要素法(DEM)[1]をベースとして開発した ADEM(Advanced Distinct Element Method)[2]を用い、充填層のガス流れ解析には DNS を用いることとした。充填層における軟化粒子の割合を変化させたときの空隙率の変化およびそのときのガス流れを解析した。

2. 計算方法

2. 1. ADEM

従来の DEM では、粒子間の力の伝達は粒子が接触しているときにのみ行われる形であったため、連続体としての挙動を計算することはできなかった。そこで、近傍に存在する構成粒子間において、接触が起これなくとも力を伝達することができれば、連続性を持たせることができると考え、連結バネを用いて構成粒子同士を接続することとした。本手法では応力の計算を簡略なバネで計算し、シンプルなモデルで記述することとした。連続体を解析する手法として FEM[3]があるが、FEM と DEM の中間に位置する手法ということができる。連結バネには破断の閾値を設定し、閾値を超えてバネが伸びた際、連結バネが破壊されることとした。連結バネが破壊されると、構成粒子は従来の DEM と同様の離散体として扱われるため、連続体が破砕され、破砕片が生じていく過程をシームレスに 1 つのモデルで取り扱うことができる(Fig.1)。連結バネ定数の大小は実際のヤング率の大小に相関することがこれまでの研究で知られており、ここでは連結バネ定数を小さくすることで軟化した粒子を表現することを試みた。また、破断の閾値は変形に対して非常に大きく

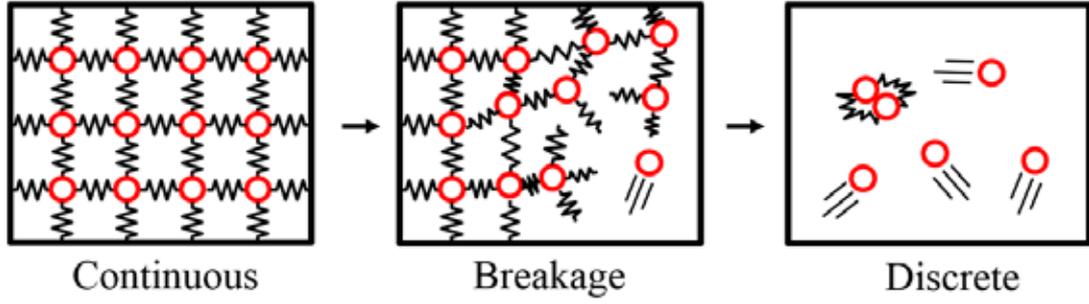


Fig.1 Schematic diagram of the calculation flow of breakage

設定することで，今回は連結バネの破壊が起こらない条件で計算を行う事とした．連結バネ定数による近傍粒子との相互作用力は，以下の式で表される．

$$F_{n,c} = K_{n,c}a_n + \eta_{n,c} \frac{da_n}{dt} \quad (1)$$

$$F_{t,c} = K_{t,c}a_t + \eta_{t,c} \frac{da_t}{dt} \quad (2)$$

ここで， $F_{n,c}$ ， $F_{t,c}$ は法線方向，接線方向の相互作用力を， a_n ， a_t は連結バネの自然長からの法線方向変位，接線方向変位を表す． $K_{n,c}$ ， $K_{t,c}$ は法線方向，接線方向の連結バネ定数， $\eta_{n,c}$ ， $\eta_{t,c}$ は法線方向，接線方向の連結バネに付随する減衰係数を表す．今回の検討では，連結バネで接続される範囲を粒子径の 1.5 倍とし，その距離よりも近くに存在する粒子を近傍粒子としている．

2. 2. DNS

乱流の解析を行う際，基礎方程式に対して一切のモデル化を行わずにそのまま解析を行う方法が最もシンプルで厳密であり，このような方法を DNS(Direct Numerical Simulation)[4]という．原理的には最もシンプルであるが，DNSによって流れを正確に解くためには，発生する最小スケールの渦を解像できるほどの小さなメッシュで空間を分割する必要があり，必要なメッシュ数が膨大になることから計算負荷が高い手法と知られている．本研究では，まずは流体を精度よく解析できる DNS を用いてガス流れ解析を実施し，数値解析の基礎的な指標となるデータを得ることを目的とした．数値計算法の概略は以下のとおりである．

固体表面を含むセルにおいて，体積平均速度 \mathbf{u} を次式で定義する．

$$\mathbf{u} = (1 - \alpha)\mathbf{u}_f + \alpha\mathbf{u}_p \quad (3)$$

α は界面を含むセルでの固体の体積割合， \mathbf{u}_f は流体の速度， \mathbf{u}_p は剛体運動する固体内部の速度である． \mathbf{u} に対しては次の方程式を与える．

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla \frac{P}{\rho_f} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nu_f \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}_p \quad (4)$$

f_p は界面を含むセルだけで意味をもち、これを除外すれば Navier-Stokes 式となる。 f_p は 相関の相互作用力を表すと解釈できるので、粒子の運動方程式、角運動方程式における流 体応力の表面積分は f_p の体積積分に置き換えることができる。この方法は、強制力で速度 を指定する方法の考え方を境界の取り扱いに応用し、埋め込み格子法(Immersed Boundary Method)を簡略化したものである。空間微分は4次精度の中心差分法で近似し、 時間進行には2次 Adams-Bashforth 法、圧力と速度場のカップリングは SMAC 法を用い た。なお、今回の検討では簡単のため、充填層を構成する粒子は固定し、移動しない壁と みなして計算を行うこととした。

3. 計算結果

本研究では、まず軟化粒子充填層を作成し、作成した粒子充填層に対してガス流れ解析 を行った。充填層の作成のための計算条件を Table 1 に示す。計算領域の上部からクラス ター粒子を1つずつ生成し、自由落下により堆積させて粒子充填層の初期座標を取得した。 作成した充填層において、それぞれ 0, 10, 30, 50%の割合でランダムに選択した粒子を軟 化粒子とし、連結バネ定数を小さく設定した。Fig.2 に各軟化粒子割合における充填層の 様子を示す。赤色の粒子が軟化粒子で、青色の粒子が非軟化粒子である。その後、粒子充 填層に対して上部から 0.1 MPa の圧縮圧力で加圧した。このとき、側面の境界は周期境界 条件とした。Fig.3 には充填層を下から 20mm までの領域で拔出し、空隙(緑色)、軟化 粒子(赤色)、非軟化粒子(青色)で色分けした様子を、Fig.4 に軟化粒子割合と空隙率の 関係を示す。軟化粒子割合が増加することで空隙率が低下し、また、軟化粒子の連結バネ 定数の値が小さいほど空隙率が小さくなっていることがわかる。このことから、軟化粒子 が加圧下の充填層において、空隙を埋めるように変形していることがわかる。

Table 1 Calculation conditions for packing simulation

Calculation area	mm	30×30×35
Primary particle diameter	mm	1.0
Cluster particle diameter	mm	6.0
Number of primary particle	-	49
Joint spring coefficient	N/m	10 (Softening particle: 0.1, 1.0)
Maximum strain	-	-
Compress pressure	MPa	0.1

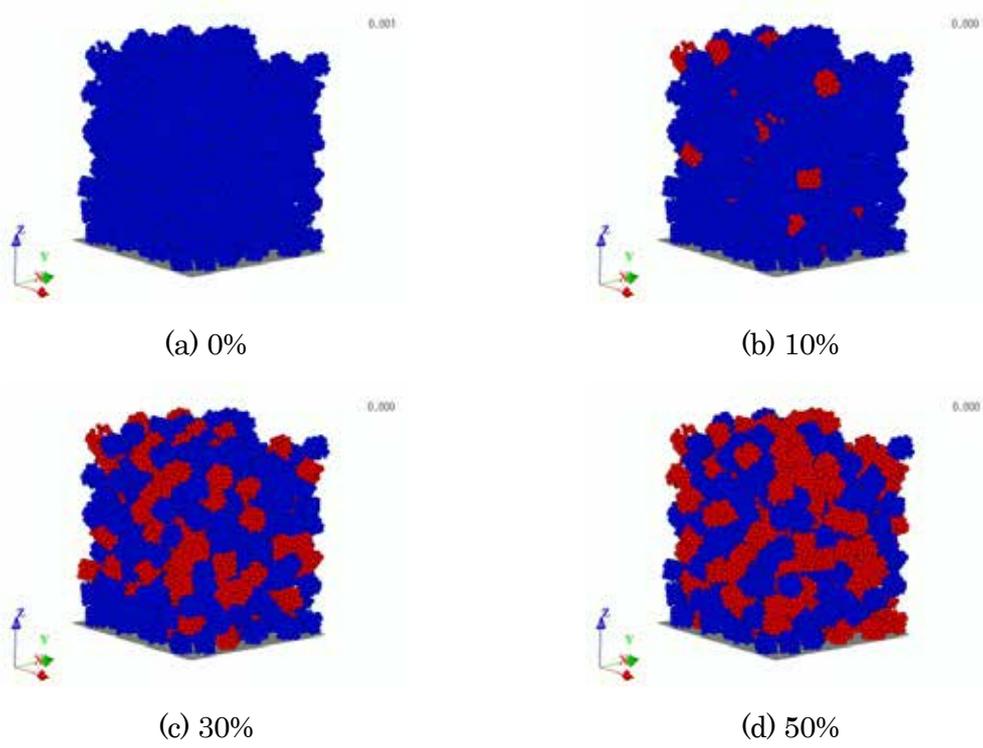


Fig.2 Packing behavior of each softening particle ratio

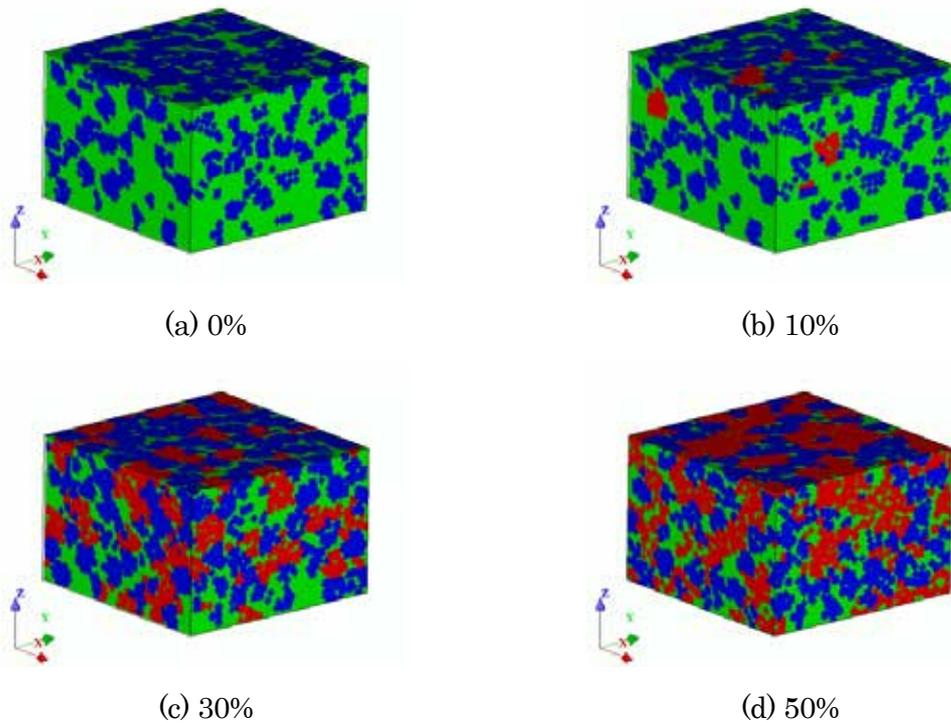


Fig.3 Void structure of each softening particle ratio

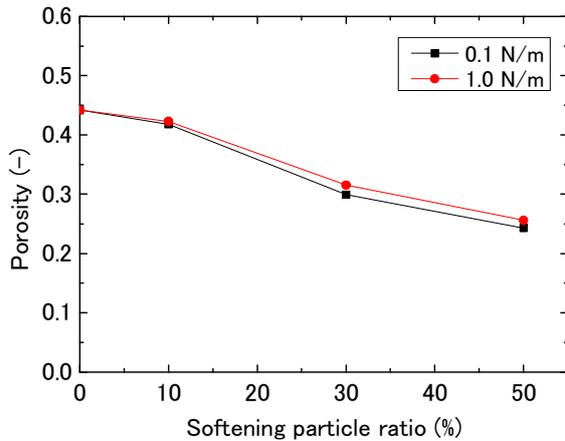


Fig.4 Porosity as a function of softening particle ratio

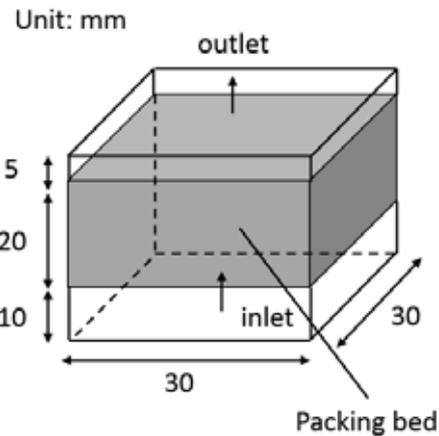


Fig.5 Schematic diagram of fluid analysis

上記の検討で作成した充填層に対して、ガス流れ解析を実施した。流体計算における計算領域の概略図を Fig.5 に、計算条件を Table 2 に示す。ガスの物性は常温における空気のものとした。流体解析における格子幅は、0.25mm であり、粒子充填層における構成粒子径の 1/4 のサイズとした。Fig.6 には、軟化粒子の連結バネ定数を 1.0 N/m としたときの各軟化粒子割合におけるガス流れ解析結果を示す。ここでは、軟化粒子を白色、非軟化粒子を黒色で表した。また、速度ベクトル表示では流速が大きいほど赤色に近づき、流速が小さいほど青色に近づく。圧力分布においても同様の色分けで表示した。軟化粒子割合が 0% のとき、充填層には空隙が十分にあり、その空隙を流体が流れている様子がわかる。軟化粒子割合が 10~50% の場合、軟化粒子が変形することによって空隙が閉塞される様子が観察される。軟化粒子割合が増加することによって閉塞される流路が徐々に増加し、それに伴い圧力損失が増加している。軟化粒子割合 50% において、ガスが流れるための空隙が非常に狭く、充填層に流入するポイントにおいてガスが逆流している様子が観察された。これは実際の流体现象からは乖離した現象であり、計算格子幅に起因する計算精度の問題であると考えられる。狭小な流路に対して十分な解像度をもって計算格子幅を設定する必要があったと考えられる。軟化粒子割合と圧力損失の関係を Fig.7 に示す。軟化粒子割合が増加するほど圧力損失が増加しているが、軟化粒子割合 50% において、連結バネ定数

Table 2 Calculation conditions for fluid analysis

Number of cell	-	120×120×140
Time step	s	1.0×10 ⁻⁴
Inlet velocity	m/s	0.018
Calculation time	s	4.0
Viscosity	Pa · s	1.82×10 ⁻⁵
Density	Kg/m ³	1.205

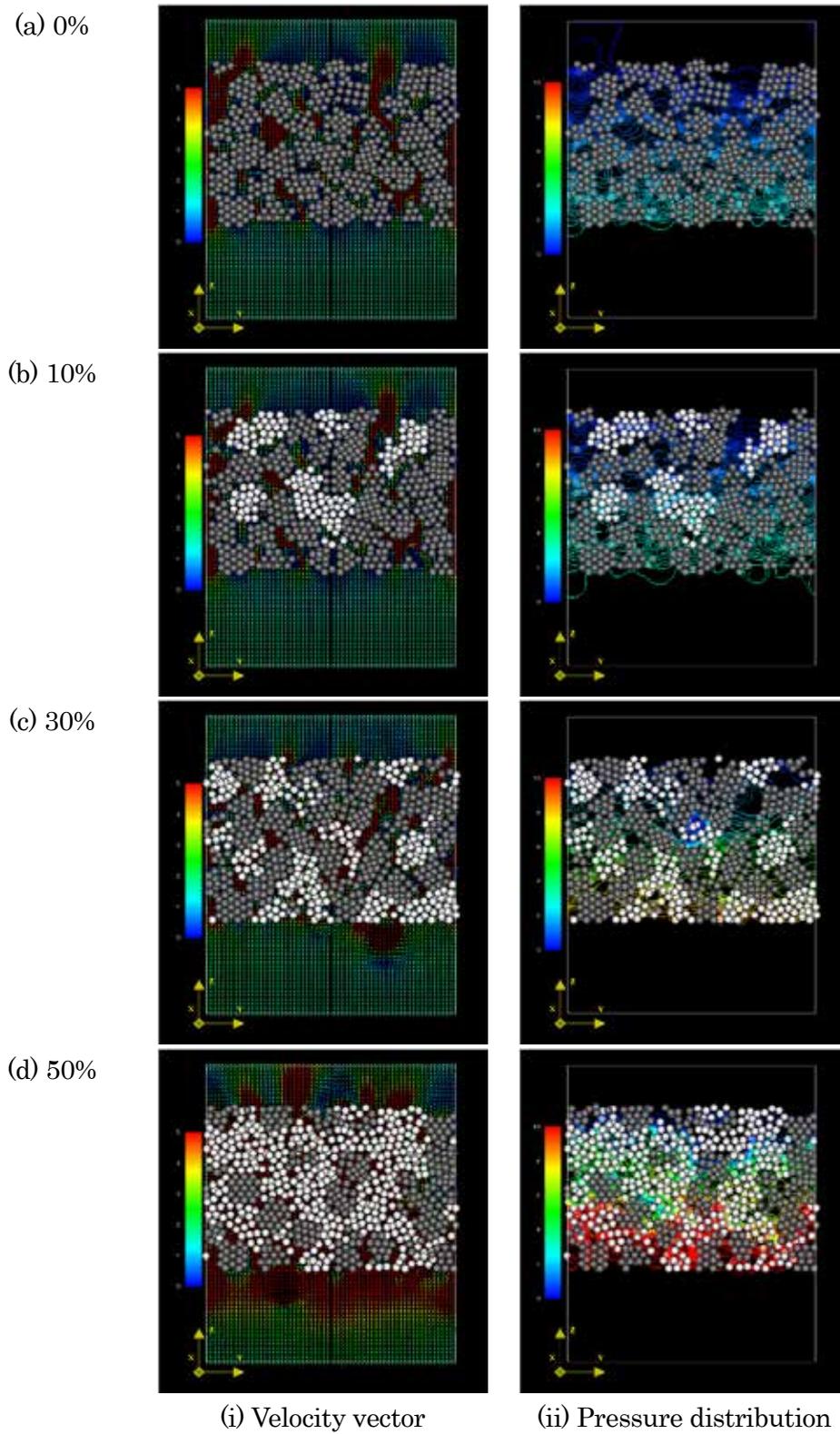


Fig.6 Velocity vector and pressure distribution of each softening particle ratio

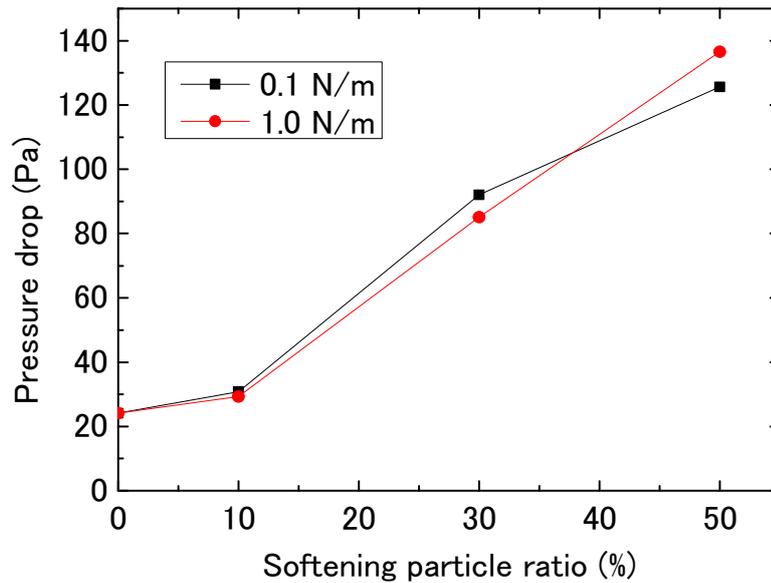


Fig.7 Pressure drop as a function of softening particle ratio

1.0 N/m のときの圧力損失が 0.1 N/m のときの圧力損失よりも小さい値を示した。これは、クラスター粒子が大変形した際の構成粒子間の空隙が原因であると考えられる。連結バネ定数が小さい場合、クラスター粒子は変形しやすくなり、変形量は比較的大きくなる。本手法では、球形の構成粒子の集合体でクラスター粒子を表現しているため、初期状態においてクラスター粒子内部に空隙を内包している。今回の検討で用いた流体計算における格子幅では、初期状態におけるクラスター粒子の内部の空隙にガスが流れる様子は観察されなかったが、クラスター粒子の変形量が大きい場合に、構成粒子間の空隙に流路ができてしまったと考えられる(Fig.8)。そのため、クラスター粒子内部の空隙にはガスが流れないようなモデルの改善を行う必要がある。例えば初期状態においてクラスター粒子内部に空隙ができないよう、構成粒子を密に配置することや、流体解析へと移行する際にクラスター粒子が占める空間は全て壁境界とみなすような工夫である。



Fig.8 Increase of voids in cluster particle when large deformation

4. まとめ

本研究は、高炉内充填層における粒子軟化挙動を、シミュレーションを用いて予測し、粒子軟化挙動が充填層の通気性に及ぼす影響を明らかにすることを目的とした。得られた結果は以下のとおりである。

- (1) ADEMにおける連結バネ定数により粒子軟化現象を表現することができた。
- (2) 粒子充填層において、軟化粒子割合が増加するほど空隙率が低下し、圧力損失が大きくなった。

今後は、クラスター粒子が大変形した場合の内部の空隙の取り扱いに関するモデルの改善や、実験値との比較によるシミュレーションの信頼性、妥当性の確認をすすめていく所存である。

5. 謝辞

本研究の一部は、公益財団法人 JFE21 世紀財団の 2015 年度技術研究助成により実施されたもので、ここに謹んで謝意を表す。

6. 参考文献

- [1] P. A. Cundall, O. D. L. Strack, “A discrete numerical model for granular assemblies”, *Geotechnique*, 29, 47-65 (1979)
- [2] Shingo Ishihara, Qiwu Zhang, Junya Kano, “ADEM simulation of particle breakage behavior”, *Journal of the Society of Powder Technology, Japan*, 51, 407-414 (2014)
- [3] D. Karamanlidis, “Alternative FEM formulations for the inelastic large deflection analysis of plane frames”, *Computers & Structures*, 28, 691-698 (1988)
- [4] Takeo Kajishima, “Direct numerical simulation of flows including solid particles”, *Nagare*, 21, 221-229 (2002)