

令和 2 年 6 月 12 日現在

機関番号：32689

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K06881

研究課題名(和文)高温反応プロセス解析のためのマルチフェーズ熱流体シミュレータの開発

研究課題名(英文) Development of the multi-phase thermal fluid simulator for the analysis of high temperature processes.

研究代表者

伊藤 公久 (Ito, Kimihisa)

早稲田大学・理工学術院・教授

研究者番号：10159866

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：SPH法を用いた熱流体解析シミュレータの開発を行い、以下の成果を挙げた。1)非ニュートン流体の解析プログラムを開発し、溶融スラグの顕熱回収プロセスのシミュレーションを行い、実機と良い一致を見た。2) XSPH法を導入した気液混相流のシミュレーションプログラムを完成させ、水中を上昇する気泡形状の予測および浴表面への高速ガスジェット吹付シミュレーションを実施するとともに、実験による検証を行った。さらに伝熱や膨張を考慮したモデルを作成した。3) 粒子打ち込みプログラムに伝熱及び化学反応を連成させることで、溶融鉄浴中に打ち込まれた部分焙焼された炭酸カルシウムの熱分解シミュレーションを行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

一般に数値流体力学では、与えられた境界条件の中での流れ場の再現を指向するが、本研究では、自由界面の変形を追跡することによる反応界面積の定量的評価を直接の目的としたCFD計算を指向している。本研究の成果により、高価で時間のかかる高温での実験を補完して、計算機上で様々な実験を行うことができるようになる。その結果、高温系における複雑な現象の理解が進み、プロセス開発の障壁が大きく取り除かれることとなり、革新的な新高温反応プロセスの開発が大いに期待される。さらに非ニュートン流体の計算法の確立は、レオキャストリング、高分子の成型、生体内の流れなどにおいても必要な情報であり、大きな波及効果が期待される。

研究成果の概要(英文)：The numerical simulator for the analysis of thermo-fluid in metallurgical processes was developed. The obtained results are as follows: 1) CFD program for non-Newtonian fluids was developed and applied to analyze the heat recovery process of steelmaking slags. 2) The gas-liquid two-phase flow simulator using XSPH method for the prediction of rising bubbles and the gas jets impinging onto the molten metal bath. Additionally, the heat transfer and expansion effects were considered. 3) The heat transfer equations and chemical reaction rates were coupled the developed simulator, which was applied to the simulation of the thermal decomposition of partially calcined CaCO₃ particles driven into a molten metal bath.

研究分野：金属生産工学

キーワード：粒子法 シミュレータ 熱流体 溶融金属 スラグ 化学反応 非ニュートン流体

様式 C - 19, F - 19 - 1, Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

鉄鋼・非鉄金属製造やガラス製造に代表される高温反応プロセスにおいては、原材料の多様化や CO₂ 排出量削減、省エネルギー、副生物の利材化といった様々な要求に対して、迅速に対応できる技術開発の重要性が増していた。高温反応プロセスの解析と制御を行うためには、まず反応の最終到達目標の値を熱力学計算によって求め、反応の経過を、速度論を用いることによって記述するのが一般的であるが、速度論的解析における最大の問題は、炉内における各相の動きや接触状況、特に反応界面積の正確な見積もりが非常に困難なことである。特に高温反応プロセスのような高温系では実験上の困難もあり、界面積を十分に推定できてはいない状況であった。計算機能力の向上と相まって著しく発達してきた計算流体力学(CFD)は、この問題を解決するための強力な手段となり得るものと期待できるが、実際の反応炉内では、気・液・固の異なる相が大きく変形しながらその接触状況を変化させているため、従来の格子法を用いた計算には、数多くの困難が伴ってきた。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という特徴を持っており、高温反応の解析に応用できる有望な手法ということができ、その一方で計算コストが大きいという欠点も持ち合わせていた。研究開始当初において GPGPU による高速計算が普及し始めており、これを活用した粒子法計算に大きな期待が持てる状況になったとともに、SPH 法を用いた高温プロセス分野の研究は皆無の状態でもあった。

2. 研究の目的

本研究は、複数の相が複雑に関与する現実の高温反応プロセスに近い条件での反応界面積の正確な評価を、SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法を中心とした熱流体シミュレーションによって実現し、この結果を速度論シミュレータと連結させることによって、実験の補完が可能な能力を持つ高温反応プロセス解析のためのマルチフェーズ熱流体シミュレータを開発することを目的としている。具体的には、その対象を 1) 非ニュートン流体とニュートン流体との相互作用、2) 高速気体と液体との相互作用、3) 高温液体と固体の相互作用の 3 つに定め、実験と数値計算の両面から基礎的研究を進め、最後にこれらを既存の速度論シミュレータと連結することにより、実験の補完が可能な能力を持つシミュレータを開発することである。

3. 研究の方法

(1) 非ニュートン流体とニュートン流体との相互作用

SPH 法を用いてビンガム流体および指数則流体の流動を記述するシミュレーションプログラムを完成する。ここでは、最適な粘性モデルの導入と粒子探索方法の改善を行い、最大 1000 万粒子数規模でのシミュレーションを可能にした。さらにニュートン流体との液 - 液 2 相流についても計算を進めた。計算と並行して実験を行うことによりシミュレーションの検証を行い、プログラムの最適化を図った。非ニュートン流体としては、ビンガム流体と擬塑性流体を対象とした。

(2) 高速気体と液体との相互作用

高速気体と液体との相互作用を解明するため、液体面に高速で気体が衝突した場合および高速で液体中に気体が吹き込まれた場合の流れを、粒子法によって計算した。この場合、気体粒子と液体粒子を配置して計算するが、粒子の密度比が 1 : 1000 程度となるため、計算に困難をきたすことが予想される。本研究ではこれを克服する新たに XSPH 法を用いた計算方法を開発した。実験による流れの可視化を行い、シミュレーションの検証を行った。

(3) 高温液体と粒子の相互作用

高温液体中への固体粒子の侵入後の熱履歴を再現するため、粒子法を用いた熱伝導計算を実施した。さらに高温場においては輻射伝熱の影響が大きいことが予想されるので、輻射伝熱の計算も含めたシミュレータを構築した。さらに、熱分解反応による熱吸収を含めた温度計算を行った。また、新たに、

最後に、以上の 3 つの研究によって得られた成果を、すでに開発済みの速度論シミュレータに反映するため、CFD シミュレータとの統合を行い、マルチフェーズ熱流体シミュレータを完成させる。

4. 研究成果

(1) 非ニュートン流体とニュートン流体との相互作用

本研究では、粘性項とそれ以外の項の計算を分離して計算した後に、粘性項を陰的に解く方法を確立した。また、GPGPU による計算の高速化効果をさらに導き出すために、粒子探索アルゴリズムとデータ転送アルゴリズムに改良を加え、3 次元流れの計算を実現した。これを用いて以下の研究成果を得た。

凝固析出を伴う非ニュートン流体の解析プログラムを開発し、溶融スラグの顕熱回収プロセスのシミュレーションを行った。脱炭スラグの平衡状態図から固相率を概算し、Einstein-Roscoe の式から見かけの粘度を算出する粘度モデルを構築した。半陰的 SPH 手法を用いて双ロール式スラグ連続凝固プロセスにおける、スラグの凝固及び流動の予測を行い、実機と良い

一致を見た。

擬塑性流体の流動シミュレータを開発し、グリースを用いたスクイズ流れの実験を実施してプログラムの検証を行い、その正当性を確認した。このプログラムを、鉄鋼製錬における泡立ちスラグへ適用し、泡立ちスラグがビンガム流体と擬塑性流体のそれぞれの場合について、ニュートン流体である熔融鉄液滴を含むエマルジョンの製鋼炉内での挙動をシミュレートする目的で、スラグ中の熔融鉄液滴の沈降挙動を計算した。その結果、スラグをニュートン流体と考えた場合に対して、両流体は沈降開始が遅れるものの、その後の沈降速度は大きくなること示された。

(2) 高速気体と液体との相互作用

XSPH 法を導入した気液混相流の詳細シミュレーションプログラムを完成させ、水中を上昇する気泡形状の予測を行い、報告されている実験結果を再現することが出来た。新たな粒子探索アルゴリズムを GPGPU に組み込むことにより、1000 万粒子数での計算を可能にした。このプログラムを用いて、以下の研究成果を得た。

円柱形水浴の中央に高速ガスジェットを吹付け、ジェットによるキャビティの生成や液面変動を計算した。シミュレーションの精度確認のため、実際に実験を行って結果を比較した。水中を上昇する気泡形状の計算プログラムに熱伝導方程式を連成させ、伝熱の効果を計算した。また、円柱形水浴の中央に高速ガスジェットを吹付け、ジェットによるキャビティの生成や液面変動を計算し、実際に実験を行って結果を比較した。その結果、Fig.1 に示すように、液表面でのキャビティの形成や、高速領域での液面の大変形を精度良く予測することが出来た。しかし 20m/s 以上の速度では、侵入したブルームが液中に留まり、計算精度を悪化させることが確認され、さらなる粒子数の増加が必要であることが結論された。

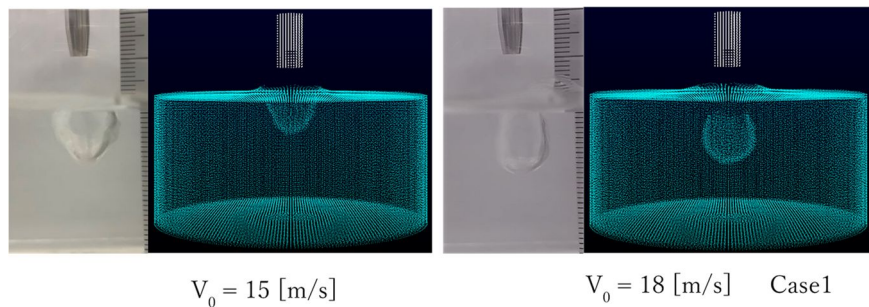


Fig.1 高速ガスジェット吹付けの計算結果とモデル実験の比較

高温液体中に吹き込まれた気泡について熱伝導と膨張を考慮したシミュレータを開発し、熔融金属中に吹き込まれた気泡の温度変化の推定を行った。

(3) 高温液体と粒子の相互作用

流体プログラムに伝熱及び化学反応を連成させることで、熔融鉄浴中に打ち込まれた炭酸塩の熱分解シミュレーションを行った。まず、熱伝導方程式と Stefan-Boltzmann の式を SPH 法の解析コードへ実装し、解析解との比較を行うことで十分な精度を持つことを確認した。その後、フラックス球が鉄浴へと打ち込まれる際の挙動を計算し、時間変化する内部温度分布を追跡した。分解速度式を導入して計算を行った結果、Fig.2 に示すように、粒子径が大きいものほど熱分解で発生する CO₂ の量が多いことが示唆された。CO₂ の発生速度は極めて大きく、フラックスが未反応核を持つのであれば、内部ガス圧が急激に上昇するため、クラッキングの発生によって粒子が鉄浴内へ広範囲に分散することが予想される。

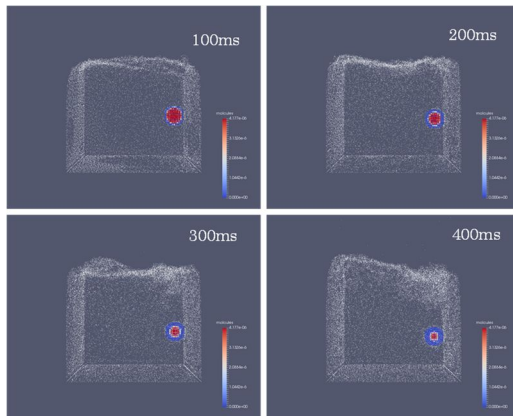


Fig.2 鉄浴中の CaCO₃ の熱分解計算

液体金属中への回転剛体の侵入を予測するシミュレーションプログラムの開発を行った。コールドモデル実験の結果と比較した結果、浴中での回転剛体の沈降速度が大きめに見積もられることが分かり、マグナス効果の評価に課題が残った。また、回転剛体の駅への溶解挙動についてもシミュレーションプログラムを試作し、水-シヨ糖結晶を用いたコールドモデルと比較を行った。

以上の研究において得られた速度パラメータを用いて、反応シミュレータの改良を行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Tsuboi Masahiro, Ito Kimihisa	4. 巻 57
2. 論文標題 Cold Model Experiment and Numerical Simulation of Flow Characteristics of Multi-phase Slag	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 1191 ~ 1196
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2017-045	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Aya Harashima, Moeko Tennichi, Sara Arakawa and Kimihisa Ito	4. 巻 1
2. 論文標題 The prediction of ettringite formation from a blast furnace slag under wet alkaline environments	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Proceedings of EMECR2017	6. 最初と最後の頁 94 ~ 97
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yuichi Tsurukawa, Masahiro Tsuboi and Kimihisa Ito	4. 巻 1
2. 論文標題 Numerical simulation of flow characteristics of partially solidified steelmaking slag for the recovery of its sensible heat	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Proceedings of EMECR2017	6. 最初と最後の頁 548 ~ 550
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 1) Jumpei Maruyama, Kazuki Ito, Makoto Ando, Jun Okada and Kimihisa Ito	4. 巻 60
2. 論文標題 Numerical Simulation of Impinging Gas Jet on a Liquid Bath Using SPH Method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ISIJ International	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI:10.2355/isijinternational.ISIJINT-2019-653	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 坪倉太郎、伊藤公久
2. 発表標題 SPH法による回転剛体の金属浴中侵入のシミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第176回秋季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 橋本亮之、伊藤公久
2. 発表標題 SPH法による擬塑性流体の流動シミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第176回秋季講演大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 鶴川雄一、伊藤公久
2. 発表標題 溶鉄中に打ち込まれた炭酸塩の熱分解シミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第173回春季講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 鶴川雄一、伊藤公久
2. 発表標題 SPH法によるスラグ連続凝固プロセスのシミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第174回秋季講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 丸山純平、伊藤公久
2. 発表標題 SPH法を用いた気液二相流シミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第174回秋季講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 荒川彩良、伊藤公久
2. 発表標題 高炉スラグからのエトリンタイトの生成の予測
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第174回秋季講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 瀧川耕平、伊藤公久
2. 発表標題 高CaF ₂ 含有スラグ中フッ素の固定
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第174回秋季講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 伊藤一樹、伊藤公久
2. 発表標題 伝熱を考慮した液中気泡の上昇シミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第178回秋季講演大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 堀綾子, 伊藤公久
2. 発表標題 SPH法を用いた乾燥破壊現象のシミュレーション
3. 学会等名 日本鉄鋼協会第178回秋季講演大会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----