

# 分子動力学法による 溶融・凝固を伴う熱伝導シミュレーション

京大エネルギー科学研究科 ○学 上原拓也  
エネルギー変換科学教室 正 井上達雄

## 1. 緒言

従来の熱伝導解析では、熱力学の第一法則（エネルギー保存則）に、Fourier の法則を適用した熱伝導方程式が用いられている。Fourier の法則は、巨視的な物体に対する経験則であるから分子動力的な解析においてもこの法則が成立つことは限らない。本研究では分子動力学法による結果と、熱伝導方程式の数値解との比較を行い、原子レベルでの熱伝導現象について考察した。また、溶融・凝固を伴う熱伝導問題では、固体と液体の界面が存在し、その界面が移動する。この問題は移動境界問題、または Stefan 問題とよばれ、これまでにも多くの研究がなされているが、物体が連続体であると仮定した従来の解析法では、固液界面という不連続な面での扱いが非常に複雑となる。本研究では、物体は原子の集合体であるという立場から分子動力学法を用いて溶融・凝固を伴う熱伝導と熱応力のシミュレーションを行った。

## 2. 分子動力学法による解析モデルと解析条件

分子動力学法によるシミュレーションのモデルは図 1. (a) に示したように、原子数が x 方向に 40, y 方向に 20 の 2 次元モデルとした。境界条件は x, y 方向とも周期境界条件を与えた。原子間にはたらく力は次式のような Morse 型ポテンシャルで表されるものとした。

$$\phi(r) = \epsilon[\exp\{-2\alpha(r - r_0)\} - 2\exp\{-\alpha(r - r_0)\}] \quad (1)$$

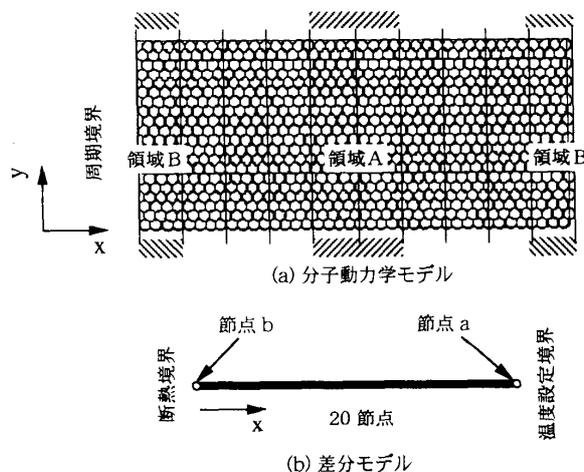


図 1. 解析モデル

表 I. 温度設定条件

No.	初期温度	加熱温度	加熱時間
1	300 K	900 K	0 step
2	300 K	900 K	3000 step
3	800 K	1600 K	3000 step

パラメータについては AI に対して得られている値を用いた。このモデルを図 1.(a) のように、x 方向に 10 分割し、各領域内の原子の運動エネルギーの平均値からその領域内の温度を求めた。熱伝導現象は、領域 A 内の原子だけについて温度制御を行い、周囲には領域 A から熱が流れていくものとして再現した。また、1 step は  $5.0 \times 10^{-15}$  sec とした。

ここでは表 I に示した 3 つの条件でのシミュレーション結果を示す。条件 1, 2 は実際の融点以下での解析で、最初の 2000 step は全体を初期温度に保って緩和計算を行い、条件 1 では瞬間的に、条件 2 では 3000 step の間に領域 A の温度を 900 K まで上昇させるものであり、条件 3 は 800 K から、融点を超えて 1600 K まで上昇させるものである。

## 3. 熱伝導方程式の数値解

3.1. 無次元化による比較 本研究で用いた分子動力学モデルは AI に対して得られているポテンシャルを用いた。しかし、2 次元モデルとしたことや、熱伝導に関しては原子の運動だけでなく、電子の影響が大きいとされるが、電子の影響はこのモデルでは全く考慮されないことから、熱物性値は必ずしも一致しない。熱伝導シミュレーションを行うのに先立って融点、熱伝導率、比熱、密度などを求めたが、表 II に示したように、いずれも実際の AI と定性的に一致するには至らなかった<sup>3)</sup>。したがって、2 つの解析結果を直接比較することはできない。そこで、本研究では無次元時間として Fourier 数

$$Fo = \frac{k}{\rho c l^2} t \quad (2)$$

表 II. 本モデルにおける熱力学的物性値

融点	熱伝導率 (300K)	比熱 (300K)	密度 (300K)
1250 K	12 W/mK	900 J/kgK	3000 kg/m <sup>3</sup>

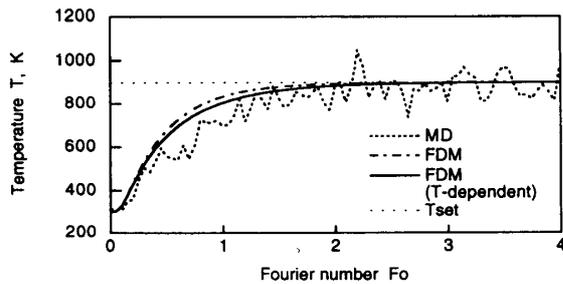


図 2. 領域 B, 節点 b の温度変化 (条件 1)

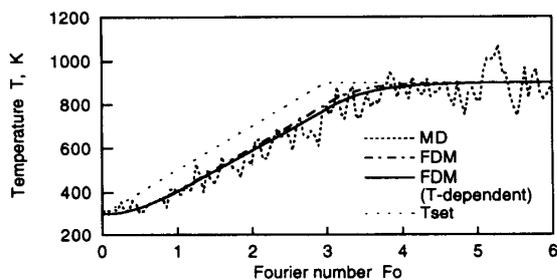


図 3. 領域 B, 節点 b の温度変化 (条件 2)

を用い、この無次元時間に対する温度変化を比較した。ここで  $k$  は熱伝導率 [W/(mK)],  $\rho$  は密度 [kg/m<sup>3</sup>],  $c$  は比熱 [J/(kgK)],  $l$  は長さ [m],  $t$  は時間 [s] である。

**3.2. 解析モデルと解析条件** 熱伝導方程式の数値解は図 1.(b) に示したようなモデルを設定して差分法によって求めた。境界条件は図 1.(a) の領域 A, B に対応するように、一方は断熱境界、他方は温度設定境界とした。また、分子動力学モデルでは 2 次元の解析を行ったが、 $y$  方向には温度分布は生じないため、このモデルは 1 次元とした。また、熔融を伴う解析では等価比熱法<sup>2)</sup>を用いた。これは、相変態がおこる温度領域では潜熱の効果を比熱に加えた等価比熱を用いることによって通常の熱伝導解析と同様に計算するものである。

温度設定の条件は表 I に対応するように設定した。条件 1 については初期温度を 300 K, 節点 a の温度を 900 K として計算をした。条件 2 の加熱時間については Fourier 数が一致するように設定した。条件 3 では融点が異なるため、温度についても融点で無次元化し、この値が一致するように初期温度と加熱温度を設定した。

#### 4. 解析結果

条件 1, 2 での領域 B と節点 b の温度変化を表したものが図 2, 3 である。熱伝導方程式の解のうち、破線は材料データの温度依存性を考慮しなかったものであり、実線は温度依存性を考慮したものである。このように、2 つの解析結果は同じような曲線となり、とくに条件 2 ではほぼ一致する結果が得られた。

また、図 4 は条件 1 における、領域 A, B および節点 a, b の熱応力の変化を表したものである。応力についても定

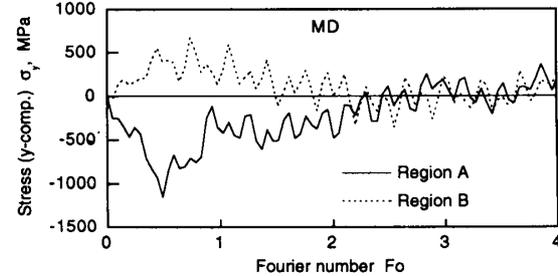
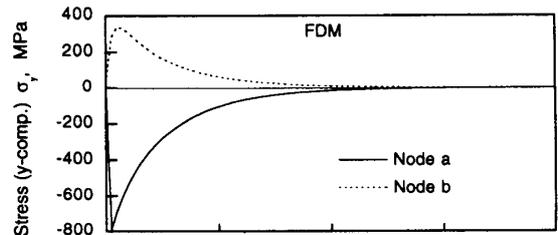


図 4. 領域 B, 節点 b の熱応力の変化 (条件 1)

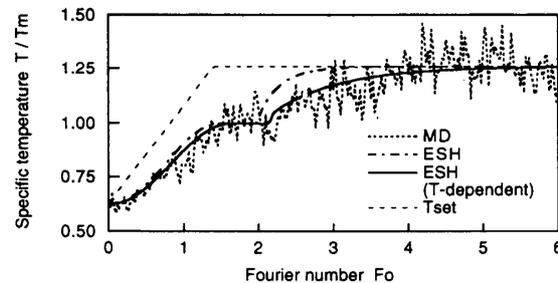


図 5. 領域 B, 節点 b の温度変化 (条件 3)

量的には異なるものの、同様な結果が得られることがわかった。次に条件 3 での結果を図 5 に示す。この場合、熱伝導方程式の解には材料データの温度依存性の影響が大きく現れるが、分子動力学法での結果は物性値の温度依存性を考慮した解析結果と非常によく一致した結果が得られることがわかった。

#### 5. 結言

熱伝導解析では、熱伝導率や比熱といった材料定数は異なるにも関わらず、無次元化時間を用いて比較するとほぼ一致する結果を得ることができた。また、分子動力学法ではポテンシャルさえ与えれば固相、液相の区別をすることなく計算を行うことができるため、移動境界問題への適用が容易である。

#### 参考文献

- 1) 安藤, 井上, 赤星, 原田, 原子/分子モデルを用いる材料強度評価シンポジウム(1994), pp. 51-56
- 2) 大中逸雄, コンピュータ伝熱・凝固解析入門— 鋳造プロセスへの応用 — (1985), 丸善
- 3) 上原拓也, 京都大学修士論文 (1996)