



Title	分子動力学法による塑性仕事の熱変換効率の予測の境界条件依存性
Author(s)	李, 響
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2026, 16, p. 134-137
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/106255
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

分子動力学法による塑性仕事の熱変換効率の予測の境界条件依存性

李 響

大阪大学 大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻

1. はじめに

近年、塑性加工の高速化に伴い、被加工材の性能や特性などを高精度で予測することが重要になっている。ここで、加工中における被加工材の温度上昇は、その欠陥挙動、結晶組織などの進展を影響することによって、加工後のその性質や性能などを影響する。したがって、加工中における温度上昇を正確に予測することが必要である。

塑性加工中に、材料に付与される塑性変形仕事 W^p から変換された熱（加工発熱） Q は、被加工材の温度を上昇させる主因である。塑性仕事は熱に変換される割合は、熱変換効率 Taylor-Quinney coefficient (TQC) β で表すことができる。したがって、加工中における温度上昇を正確に予測するためには、正確に TQC を評価する必要がある。従来（特に市販の有限要素解析ソフト）では、材料によらず TQC を一定で $\beta = 0.9$ と仮定されることが多かった。すなわち、塑性変形仕事由来の熱量はその 90% であると経験的にされていた。しかし最近、実験的研究が多く行われるようになり、TQC は定数ではなく、変形のモード、変形速度、材料の種類などへの依存性があることが報告されている⁽¹⁾。

これまで、実験による TQC の測定では、変形中の材料の温度上昇 ΔT をその場測定して次式で求めるのが一般的である（積分式 β^{int} ）。

$$\beta^{\text{int}} = \frac{\Delta Q}{\Delta W^p} = \frac{c \Delta T}{\Delta W^p} \quad (1)$$

ここで、 c ($\text{JK}^{-1}\text{m}^{-3}$) は比熱、 ΔT は変形中の温度変化、 ΔW^p は変形中の塑性仕事の変化を表す。また、温度上昇および塑性仕事の時間微分で定義される微分式 β^{diff} (次式) も用いられている。

$$\beta^{\text{diff}} = \frac{\dot{Q}}{\dot{W}^p} = \frac{c \dot{T}}{\dot{W}^p} \quad (2)$$

実験による TQC の評価には、変形中における

試験片の温度上昇を正確に測定することが必要であり、変形と同時に起こる熱伝導と熱膨張による温度変化への影響をほぼ 0 に抑制する必要がある⁽²⁾。すなわち、熱力学的に断熱定積の境界条件を作る必要がある。そのために、高速変形を施すことによって、熱伝導・熱膨張に時間を与えず、近似的に断熱定積の条件を作るのが一般的な手法として用いられていた。ただし、変形速度そのものが TQC の影響因子であり⁽¹⁾、高速変形による手法では、熱伝導・熱膨張を抑制できる一方で、TQC の測定結果にバイアスをもたらす可能性がある。

ところで、分子動力学 (MD) 計算では、熱力学的境界条件を規定することによって、変形の条件に依存せず、温度、応力、ひずみ、およびエネルギーなどの熱力学量が正確に計算できる。そのため、MD を用いて TQC を正確に評価できることが期待されている。ただし、TQC は、その影響因子が多く、MD 計算の手法に影響される可能性があるため、MD 法による評価には、まず妥当な計算手法を設計する必要がある。そして、その結果の計算条件への依存性を考察する必要がある。

本研究は、MD 法を用いて TQC を求める手法を設計し、TQC の熱力学的境界条件への依存性について考察する。

2. 解析方法

2.1 塑性変形の MD 計算

アルミニウム (Al) の完全結晶原子モデルを新たに構築して、MD シミュレーションに用いた。モデルの原子数は 27,000,000 であり、結晶構造は面心立方格子 (FCC) である。分子動力学シミュレーター LAMMPS⁽⁴⁾ を用いて MD シミュレーションを行う。原子間相互作用を表すポテンシャルは EAM ポテンシャル⁽⁵⁾ を用いた。

ここで、完全結晶モデルをそのまま変形させると、降伏応力が流動応力よりはるかに高くなる現象（応力オーバーシュート）が起こり、初期の弾性仕事が過剰に蓄積し、加工発熱に弾性仕事による散逸も含まれ、TQC の評価結果には誤差をもたらす可能性がある⁽⁶⁾。応力オーバーシュートを避けるために、安定な初期欠陥を導入しておく必要がある。そこで、本研究では表 1 に示す条件で P-H-D (Pre-Hold-Deform) 法⁽³⁾という計算プロトコルを用いた。P-H-D 法では、TQC の評価するための本変形 (Deform) を行う前に、完全結晶のモデルに予変形 (Pre-deform) を施し、初期欠陥を自発的に形成させてから、変形を止め、除荷（すなわち応力を 0 にする。表 1 では $\gamma = 0$ と記す）して初期欠陥が安定するまで構造緩和させる (Hold)。そして、Deform の（変形以外の）設定条件で、もう一回構造緩和 (Hold-2) を行い、Pre-deform と Hold における熱履歴などをリセットする。P-H-D 法によって、モデルに熱力学的に安定な初期欠陥を導入し、応力オーバーシュートを最小化することが期待される。アンサンブルへの依存性を調査するために、Deform はそれぞれ NVE、NVT、NPH または NPT アンサンブルで行った。

表 1 : MD シミュレーションの条件

Stage	Pre	Pause	Deform
Ensemble	①	②	③
Deformation	Shear		Shear
Time, t / ps	500	500	500
Pressure, p / Pa	-	$\gamma = 0$	-
Strain, $\Delta\epsilon$	0.25	$-\gamma^e$	0.25
Strain rate, $\dot{\epsilon}$ / s ⁻¹	5×10^8	0	5×10^8

※ アンサンブル : ①-NVE、②-NPH、③-NVE/NVT/NPH/NPT

2.2 TQC の計算

TQC は式 1 ($\beta^{\text{int}} = \Delta Q / \Delta W^{\text{P}}$) および式 2 ($\beta^{\text{diff}} = \dot{Q} / \dot{W}^{\text{P}}$) を用いて計算する。TQC を計算するために、それぞれ ΔQ ($\dot{Q}$) と ΔW^{P} ($\dot{W}^{\text{P}}$) を計算する。

ΔQ ($\dot{Q}$) は、アンサンブルによってその計算方

法が異なる。断熱的アンサンブル (NVE または NPH) では、変形中における温度上昇またはその時間微分を用いて、($\Delta Q = c\Delta T$)または($\dot{Q} = c\dot{T}$)で計算する。 c は比熱であり、NVEでは定積比熱 c_V 、NPH では定圧比熱 c_p を用いる。定温的アンサンブル (NVT または NPT) では、温度を制御する（本研究では 300K）際に、Nose-Hoover サーマスタット^(7,8)に仮想的熱伝導によってモデルから奪われたエネルギーの量を熱として定義する。

ΔW^{P} ($\dot{W}^{\text{P}}$) は、全変形仕事 ΔW ($\dot{W}$) から、弾性仕事 ΔW^e ($\dot{W}^e$) を除去して計算する。まず、応力 σ とせん断ひずみ増分 $\dot{\gamma}$ から、

$$\dot{W} = \sigma \cdot \dot{\gamma} \quad (3)$$

を計算する。そして、その時間積分で ΔW を計算する。

$$\Delta W = \int_0^t \dot{W} dt \quad (4)$$

弾性仕事 W^e および塑性仕事 W^{P} ($\dot{W}^{\text{P}}$) は、せん断剛性率 G および応力を用いて

$$W^e = \frac{\sigma^2}{G}$$

$$W^{\text{P}} = W - W^e \quad (5)$$

$$\dot{W}^{\text{P}} = \frac{dW^{\text{P}}}{dt}$$

のように計算する。

2.3 計算リソース

本研究では、LAMMPS による分子動力学シミュレーションはすべて、大阪大学 D3 センターのスーパーコンピュータ SQUID の CPU ノード群を利用して行った。計算リソースは一回あたり、64 ノードで 8 時間程度であり、ストレージは約 250GB である。

3. 解析結果

3.1 P-H-D 法

図 1 に、P-H-D 法を用いて得られた応力-ひずみ曲線を示す。Pre-deformation は、モデルの初期状態は完全結晶であるため、大きな応力オーバー

シュートが発生した。一方、Deform の段階では、応力オーバーシュートが起らず、応力-ひずみ曲線は弾完全塑性に近い挙動を示している。よって、本研究では、P-H-D 法によって応力オーバーシュートを最小化することができた。

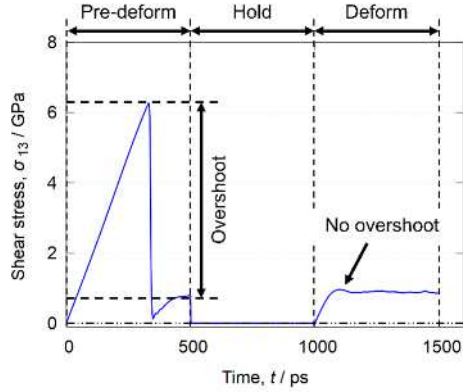


図 1：P-H-D 法による応力オーバーシュートの最小化

3.2 TQC の予測結果

表 2 に、それぞれのアンサンブル (NVE/NVT/NPH または NPT) における TQC の予測結果を示す。P-H-D 法を使用した MD シミュレーションを用いて、 β^{int} と β^{diff} を予測できた。TQC は、アンサンブルへの依存性を示した。NPH (断熱・定圧) において最も小さく、NVE (断熱・定積) において最も大きい結果を示した。

表 2：各アンサンブルでの TQC の予測結果

Ensemble	NVE	NVT	NPH	NPT
β^{diff}	0.987	0.997	0.949	0.953
β^{int}	0.967	0.961	0.924	0.935

4 考察

図 2 に、各アンサンブルでの変形中の a) 空孔密度および b) 転位密度の変化を示す。空孔密度は、いずれも単調に増加し、その増加量がアンサンブルごと明らかに差異を示した。転位密度は、変形初期に増加し、時間が 100~200 ps の間に最大値に到達してから減少していた。これは、変形中に動的回復 (Dynamic Recovery) が発生したと示している。動的回復は、変形仕事を駆動力とした転位の再配置による転位構造の最適化の過程

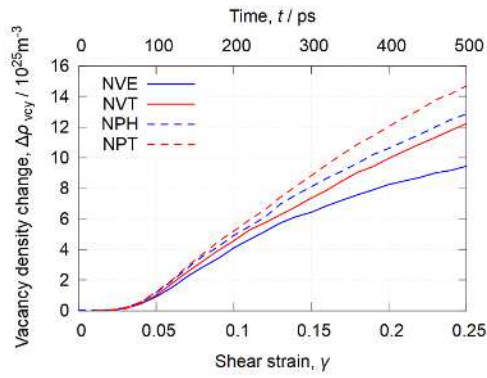
である。定積条件 (NVE または NVT) では定圧条件 (NPH または NPT) より、空孔密度が小さく (NPT>NPH>NVT>NVE)、転位密度が大きい (NVE≈NVT>NPT≈NPH)。ただし、いずれも TQC の予測値 (NVE>NVT>NPT>NPH) またはその逆順とは一致しなかった。したがって、TQC は格子欠陥密度のみではなく、欠陥の種類、その挙動、およびそれらに伴うエネルギー収支も考慮して評価・予測する必要がある。

TQC のアンサンブルへの依存性は、塑性変形中のエネルギー収支を用いて解釈することができる。本研究で用いたアンサンブルは、Nose-Hoover サーマスタットまたはバロスタット^(7,8)を用いて温度または圧力を制御する。その原子論的エネルギー収支は、次式で表すことができる。

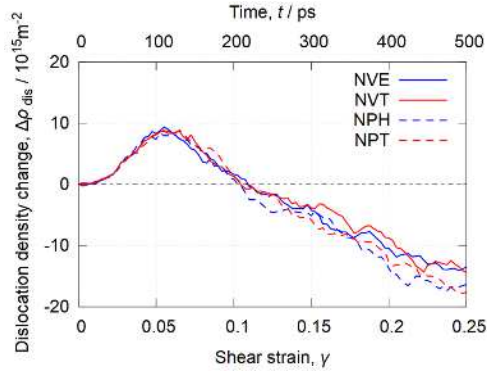
$$\dot{Q} = \beta^{\text{diff}} \dot{W}^{\text{P}} + \dot{E}_{\text{thermostat}} - \dot{E}_{\text{barostat}} \quad (6)$$

ここで、 $\dot{E}_{\text{thermostat}}$ は、サーモスタットと原子モデルの間のエネルギー交換であり、原子モデルからエネルギーが除去されるときに正と定義する。 $\dot{E}_{\text{barostat}}$ は、バロスタットと原子モデルの間のエネルギー交換であり、すなわち体積仕事を表す。体積が増加するときに正と定義する。

本研究で用いたアンサンブルは、原子論的な極限境界条件として考える必要がある。すなわち、NVE および NPH は系内に熱を保持するため温度上昇を生じる一方、NVT および NPT はサーモスタットを通じて熱を除去し、変形中を通じて温度を 300 K に維持していた (図 3a)。また、NVE および NVT では体積の変化が抑制され、体積は一定に保たれるのに対し、NPH および NPT では体積緩和が許容された (図 3b)。NPH では、NVE におけるエネルギー収支に加えて、発生した熱の一部が一定な圧力を維持するためにバロスタットに奪われた。その結果、NVE より低いもののゼロではない温度上昇が生じた (図 3a)。このとき、熱膨張が発生し (図 3b)、塑性仕事から発生した熱の一部が消費された。体積の変化は NPT においても起こりうるが、同時にサーモスタットによって熱が除去されるため、熱膨張に寄与する熱量は小さく、観測されたのは構造緩和に起因する体積の増加のみであった (図 3b)。

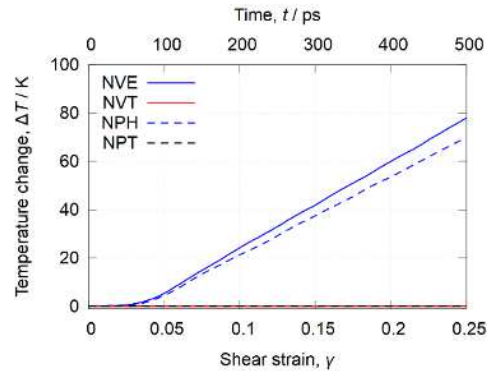


a) 空孔密度 ρ_{vcy}

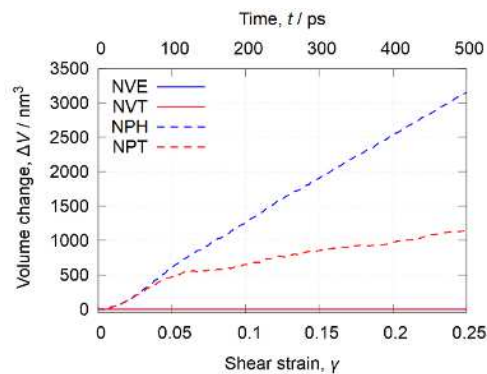


b) 転位密度 ρ_{dis}

図 2 : 各アンサンブルでの変形に伴う a) 空孔密度 ρ_{vcy} および b) 転位密度 ρ_{dis}



a) 温度 T



b) 体積 V

図 3 : 各アンサンブルでの変形に伴う a) 温度 T の変化および b) 体積 V の変化

5. おわりに

塑性仕事の熱変換効率 (Taylor-Quinney coefficient, TQC) を正確に予測するために、純アルミニウムの大規模原子モデルを新たに構築して、それぞれ断熱定積 (NVE)、定温定積 (NVT)、断熱定圧 (NPH) または定温定圧 (NPT) の境界条件 (アンサンブル) で分子動力学計算を行い、以下の知見を得た：

- ・塑性変形の分子動力学計算によくある応力オーバーシュートを避けるために、P-H-D 法を提案した。超大規模原子モデルを用いた P-H-D 法によるシミュレーションでは、応力オーバーシュートが最小化できた。

- ・分子動力学シミュレーションによる TQC の予測結果は、その熱力学的境界条件 (アンサンブル) に依存する。アンサンブルは、塑性変形仕事の熱、体積変化に伴う仕事、および欠陥によって蓄積されたエネルギーへの変換を決定し、TQC の値に影響する。本研究は分子動力学法による TQC の予測における条件設定、およびその予測結果の解釈に対して、基礎的な指針を提供した。

参考文献

- (1) D. Rittel et al., J. Mech. Phys. Solids, 107 (2017), 96.
- (2) D. Rittel, Mech. Mater., 31 (1999), 131.
- (3) 李響ほか: JIMM 2023 年春期講演大会, (2023), P98.
- (4) S. Plimpton, J. Comp. Phys., 117 (1995), 1-19.
- (5) M.I. Mendelev et al., Phil. Mag., 88-12 (2008), 1723.
- (6) J.C. Stimac et al., Acta Mater., 239 (2022), 118253.
- (7) S. Nosé, J. Chem. Phys., 81, (1984), 511-519.
- (8) W.G. Hoover, Phys. Rev. A, 31, (1985), 1695-1697.