超高速衝突下のデブリ雲構造の衝突速度依存性の分子動力学解析[†]

中谷 敬子* 栢木 良典** 杉山 吉彦***

Molecular Dynamics Study of Impact Velocity Dependence of Structure of Debris Cloud under Hyper Velocity Impact

by

Keiko NAKATANI^{*}, Ryosuke KAYANOKI^{**} and Yoshihiko SUGIYAMA^{***}

A molecular dynamics simulation is carried out to study the hyper-velocity impact fracture at a space debris' attack to a man-made satellite. A target-projectile system is modeled as a face-center-cubic system which consists of aluminum atoms. Morse potential is adopted as the interatomic potential. Impact velocity dependence of distribution of debris clouds is studied in the different velocity conditions. As a result, the structure of debris cloud of the case of 7km/s impact differs from that of 12km/s. The size of fragment of the debris clouds becomes smaller with increasing impact velocity. The axial component of debris cloud velocities are shown to decrease as target thickness-projectile diameter ratio t/D is increased. These results qualitatively agree well with an experimental result.

Key words : Computational mechanics, Molecular dynamics, Space debris, Hyper velocity impact, Debris cloud, Penetration

1 緒 言

人工衛星やロケットの運用上の廃棄物、ミッション終了後の人工衛星やロケット、およびそれらの破片や塗料片などは回収不可能な無価値な人工物質として宇宙空間に多数存在している。これらは、スペースデブリとよばれており、その数は、地上から観測されているもので約8000個、観測できない小さなものを含めると3500万個存在するとされる。ブレイクアップの発生によって、現在も増加しており、これらは、人工衛星から宇宙ステーションにいたる宇宙構造物に平均10km/sで衝突するために大きな被害を与える危険性が指摘されている。¹⁾

スペースデブリによる高速衝突から、人工衛星本体を防護する有効な対策の1つとして、シールド板で制御するという方法が考案され、実用化されている。例えば、2重壁構造²⁾のWhippleシールド³⁾は、スペースデブリはシールド板に衝突すると同時に粉碎し、デブリ雲となる。その結果、衝撃のエネルギーは拡散し、構造物本体への致命的破壊は回避される。このシールド板の設計のために、多くの衝突の地上実験が行なわれ、有用な情報が提供されている。⁴⁾例えば、Piekutowski⁵⁾は、2段式軽ガスガンを用いた衝突実験を行ない、シールド板衝突後に生じるデブリ雲、特にその内部構造について研究している。衝突速度や t/D 比(プロジェクトイルの直径 D に対するターゲットの厚さ t の比)を変えて実験を行ない、デブリ雲内の破片のサイズが、衝突速度と t/D 比の増加に伴

い、小さくなるという結果を得ている。Walkerら⁶⁾は、成形火薬を用いて、10km/sを越える衝突速度での実験を行なっている。白木ら⁷⁾は、プロジェクトイルの形状が、衝突時のデブリ雲形状にどのような影響を与えるかについて調べている。その結果、デブリが細長くなるほど、シールドに衝突後生じるデブリ雲が拡散しにくくなり、与圧壁を貫通する可能性が高くなることを指摘している。他にも、多くの実験が行なわれているが、衝突速度が高速になれば、用いるプロジェクトイルの形状が限定されるのが現状である。

一方、超高速衝突破壊現象のメカニズムを調べる目的では、シミュレーションが有効となってくる。これまでに行なわれている代表的な解析では、Sandia国立研究所により開発されたCTH(Chart-D to the Three-Halves)コード⁸⁾やSPH(Smooth Particle Hydrodynamics)法^{10), 11)}がしばしば用いられている。高岡ら¹⁰⁾は、SPH法を用いて、デブリ雲の形状、衝突前後の運動エネルギーを調べ、2重壁構造の性能を評価している。

McDonaldら⁸⁾は、高速衝突によってターゲットに生じる貫通孔のサイズとプロジェクトイルの質量、速度、密度の関係をCTHコードを用いて調べている。

SPH法では、実時間・実長さスケールの解析が可能であるが、固体、液体、気体の全ての状態を適切に表現できる状態方程式を予め与える必要があり、通常、状態方程式のパラメーターは現象論的に導入される。これに対

本稿を、「超高速衝突下のデブリ雲形成の分子動力学シミュレーション(第1報)(Molecular Dynamics Simulation of Formation of Debris Cloud, I)」とする。

[†] 原稿受理 平成17年11月24日 Received Nov. 24, 2005 ©2007 The Society of Materials Science, Japan

* 正会員 大阪府立工業高等専門学校総合工学システム学科 〒572-8572 寝屋川市幸町, Dept. of Industrial Systems Eng., Osaka, Prefectural College of Tech., Saiwai-cho, Neyagawa, 572-8572

** 富士通㈱ 〒211-8588 川崎市中原区上小田中, Fujitsu Co., Nakahara-ku, Kawasaki, 211-8588

*** 正会員 龍谷大学理工学部機械システム工学科 〒520-2194 大津市瀬田大江町横谷, Mechanical and Systems Eng., Faculty of Sci. Tech., Ryukoku Univ., Yokotani, Setaooe-cho, Otsu, 520-2194

して原子レベルの解析法である分子動力学法では、扱えるモデルの時空間スケールは制限されるが、適切なポテンシャルを仮定すれば、原理的に固体、液体、気体の全ての状態を再現できる。また、粗視化手法やマイクロ・マクロモデル間のアナロジーから、これら2つの方法を混合することで、互いの長所を活かしたシミュレーションを行なえる可能性が示されている。たとえば、Hoover¹¹⁾らは、SPH法と原子レベルシミュレーションである分子動力学法とのハイブリッド法の研究を行なっている。マクロ解析のマイクロ解析からの裏づけ、および、それらのハイブリッド解析の有効性は、現在のところ物質系の種類や状態に強く依存しており、全ての問題に対して示されているわけではない。しかしながら、今後、全く現象論的マクロモデルとマイクロシミュレーションとを結びつける理論が重要になると思われる。その基礎的な検討として、本研究では、分子動力学法を用いて、衝突速度に対するデブリ雲内部の構造の相違を解析結果を可視化¹²⁾することで調べる。また、 t/D 比によるデブリ雲内の速度を調べ、実験結果と比較する。ここでは、実材料のスケールよりもはるかに小さいマイクロ構造に対する解析を実施するが、系の試料の寸法比や無次元化した力学量の関係として成立する可能性のある普遍的な性質について議論する。

2 解析方法

2・1 分子動力学法

分子動力学法は、古典的な力学法則にしたがって運動する粒子の集合体が相空間中に描く軌跡を計算する方法である。¹³⁾ある初期時刻で相空間上の出発点を与えられれば、その後の時間発展を追跡できることに特徴がある。この方法では、現実には原子間ポテンシャルの表現能力によって定量的な精度が左右されるものの固体、液体、気体といった物質の三態を一連のシミュレーションで統一的に取り扱うことができ、高速の力学挙動を追跡できること、さらに、温度をはじめとする種々の条件について適切な目標値に設定して計算することができることなどから、ここで考えている超高速現象の解明にも有用な知見を与えることが期待される。

質量 m の N 個の原子からなる系を考える。原子 α の i 方向座標 q_i^α についての運動方程式は、

$$\ddot{q}_i^\alpha = \frac{F_i^\alpha}{m} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N) \quad (1)$$

と表される。ここで、 $\ddot{q}_i^\alpha$ は、 q_i^α の時間に関する2階微分を意味し、 F_i^α は、ある時刻での原子 α に働く力の i 方向成分であり、全ポテンシャルエネルギー Φ の空間勾配で、

$$F_i^\alpha = -\frac{\partial \Phi}{\partial q_i^\alpha} \quad (2)$$

として評価される。ここでは、原子間相互作用に単純な2体ポテンシャルを用いるものとし、その及ぶ範囲を有限の区域に限定する近似として、原子 α が感じるポテンシャルエネルギーの総和は、カットオフ距離 r_c 内の原子からの寄与を正確に計算し、それより遠距離の原子との相互作用を無視する方法を用いる。さらに、カットオフ距離での相互作用がなめらかに零となるように修正した、shifted-force ポテンシャル、

$$\phi_{SF}(r) = \begin{cases} \phi(r) - \phi(r_c) - \phi'(r_c)(r - r_c) & (r < r_c) \\ 0 & (r \geq r_c) \end{cases} \quad (3)$$

を用いる。この時、全ポテンシャルエネルギー Φ は、

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N \phi_{SF}(r^{\alpha\beta}) \quad (4)$$

で与えられる。ここで、 $r^{\alpha\beta}$ は、原子 α と原子 β の間の距離である。

式 (1) は、 $3N$ 個の連立2階常微分方程式となるが、一般的に解析的には解けないため、数値積分を行なう。ここでは、運動方程式の数値積分法として、簡便で高精度が得られ、シンプレクティック性などの好ましい性質を有している速度 Verlet の方法を用いる。初期条件として、位置と速度を与え、この積分法で原子ひとつひとつの運動方程式を積分し、時々刻々の原子の位置と速度を求める。¹⁴⁾

時間増分は $\Delta\tau = 2 \times 10^{-15}$ s とする。この値は、基準格子振動モードを十分な精度で追跡できるように定めており、固体中の弾性波の伝ばなどの基本的な現象が再現されることを確認している。また、ここで取り扱う解析を通して、全エネルギーが一定に維持されていることをモニターしている。

3 解析モデルと解析条件

Fig. 1 に示すように、解析モデルは、直径 D の球形のプロジェクトイルと厚さ t の平板のターゲットからなり、いずれもアルミニウムの結晶構造である面心立方構造を持つとする。プロジェクトイルは、原子を直径 D の球内に配置し、ターゲットの平板は、構成する原子を最稠密面 (111) 面が表面となるよう配置する。

ここで解析する現象はアルミニウム固体中の音速をはるかに超えるスピードでの超高速衝突であり、ターゲット周囲の拘束の影響を受けにくいと考えられること、および、定性的な知見を得る目的を考慮して、ターゲットの衝突面のサイズを決定する。具体的には、Table 1 に示すように、系 A から系 E までの5つの系を考える。

予備的計算で、ここで考察するモデルよりもターゲットの板厚を小さくしたモデルについても検討したが、表面層の影響が強く現われ、貫通孔が修復され塞がってしまうというバルクとは異なるマイクロモデルに特有の現象が見られたので、ここでは、 $t > 2.24$ nm とする。

原子間の相互作用は、二体間ポテンシャルである Morse ポテンシャル¹⁵⁾

$$\phi(r) = A \left(e^{-2B(r-r_0)} - 2e^{-B(r-r_0)} \right) \quad (5)$$

と仮定する。ここで、 $A = 4.330717408 \times 10^{-20}$ J, $B =$

Fig. 1 Atomic arrangement of target-projectile system.

Table 1 Dimensions of projectile-target system.

System	The number of atoms	Projectile (D [nm])	Target ($L_x \times L_y \times t$ [nm])
A	64513	4321 (5.5)	60192 (20.09 $\times$ 20.03 $\times$ 2.98)
B	26417	1721 (4.0)	24696 (14.91 $\times$ 14.76 $\times$ 2.24)
C	53719	3319 (5.0)	50400 (18.26 $\times$ 18.45 $\times$ 2.98)
D	52747	2347 (4.5)	50400 (18.26 $\times$ 18.45 $\times$ 2.98)
E	34649	1721 (4.0)	32938 (14.91 $\times$ 14.76 $\times$ 2.98)

$1.1646 \times 10^{10} \text{m}^{-1}$, $r_0 = 3.253 \times 10^{-10} \text{m}$ であり, $r_c = 2r_0$ とする.

衝突のシミュレーションでは, 板の周囲からカットオフ距離内の原子は境界条件として完全に固定し, 初期温度を絶対零度に設定して, Table 2 に示すようなプロジェクトailsの初速度, t/D 比に対して異なる 7 つのケースで分子動力学シミュレーションを行なう.

詳細は条件により異なるが, プロジェクトail 1721 原子, ターゲット 32928 原子からなる系についての 2ps のシミュレーションを日本電気製スーパーコンピュータ SX-4 を用いて実行した結果は, 約 5000 秒を要する.

4 解析結果と検討

4・1 デブリ雲の構造の速度依存性

Fig. 2 ~ Fig. 4 に, それぞれ解析ケース E7, E8, E12 に対する衝突時の変形, およびデブリ雲分布の様子を示す. 図中(a)は, 衝突直後のスナップショットであり, 衝突に伴う変形の様子を表現するために, 中央部で厚さ 0.915nm の断面領域に含まれる原子のみを表示している. 原子の色は, それぞれ, プロジェクトail構成原子を濃灰色, ターゲット構成原子を薄灰色として示している. (b) は, デブリ雲の構造を検討するために, プロジェクトail, およびターゲットの中心を通る z 軸を中心とし半径 1.5nm の円柱内領域に存在する原子に対して, 原子数密度 $n(r, z)$ を表現したものである.

いずれのケースも, ターゲット後方にデブリ雲が生じている. このデブリ雲の外側は, 大部分がターゲットの破

Table 2 Analysis cases.

Case	Initial velocity of projectile V_p [km/s]	Target thickness - projectile diameter ratio t/D
A7	7.0	0.542
B7	7.0	0.559
C7	7.0	0.596
D7	7.0	0.663
E7	7.0	0.745
E8	8.0	0.745
E12	12.0	0.745

Fig. 2 Snapshot and distribution of atomic arrangement (E7). (a)snapshot, (b) the number density which is evaluated as an average.

Fig. 3 Snapshot and distribution of atomic arrangement (E8).

Fig. 4 Snapshot and distribution of atomic arrangement (E12).

片, 内側はプロジェクトイルの破片から構成されている.

衝突速度が 7km/s, 8km/s の場合, Fig. 2 (a), Fig. 3 (a) の (3)~(5) から, デブリ雲内部が 2 つのクラスターからなる 2 層構造が現われていることが確認できる. これは, 2 つのピークを明確に示している Fig. 2 (b), Fig. 3 (b) の (3)~(5) から明らかである. この 2 層構造の内側のクラスターは, プロジェクトイルの破片, 外側のクラスターは, ターゲットの破片で構成される.

衝突速度が 12km/s の場合, Fig. 4 (a) (b) の (3)~(5) が示すように, 各原子はクラスタ構造を作らずに, ばらばらに運動を続け, 後方へのデブリ雲はよりも広がった構造になる. Fig. 2, Fig. 3 で見られた 2 層のクラスター構造は確認できず, 低速の場合とデブリ雲の分布の携帯は異なると考えられる. また, 衝突速度が増すほど, デブリ雲内の破片は細くなっており, 地上実験の結果とも一致している.¹⁶⁾

4・2 衝突後のデブリ雲内の軸速度

4・2・1 速度の測定点と測定方法 デブリ雲内の速度を調べるにあたって, 参考にした地上実験の論文¹⁷⁾では, Fig. 5 のように, 速度の測定点は, ショットライン (入射線; z 軸) に沿った 3 点に取られている. 図中の 1 点は, 範囲 1 の先端部, 2 点は範囲 1 と範囲 2 の境界部, そして 3 点は範囲 2 の後方部に取られている. これら 3 点でのショットライン方向への軸速度 V_{dc} が求められている. 範囲 1 と範囲 2 は, 破片のサイズや密度の違いによって分けられており, 概ね, 範囲 1 は先頭の外側のクラスター, 範囲 2 は後方の内側のクラスターにそれぞれ対応する.

シミュレーションでは, この 3 点に対応する区間を決定し, それぞれの区間での軸速度 V_{dc} を求める. まず, デブリ雲を Fig. 6 のように, z 軸方向に 10 等分する. 速度 V_{dc} は, それぞれの区間内にあるひとつひとつの原子の z 軸方向の速度を平均して求める. Fig. 7 は, 衝突速度とそれぞれの区間での速度比 $V_{dc} = V_p$ をそれぞれの区間の z 軸方向の中心座標に対してプロットしたグラフを示したものである. Fig. 5 のデブリ雲先端部 1 点での軸速度 V_{dc1} は, デブリ雲の最も先端の区間 j での平均軸速度に対応する. ただし, 区間 i と区間 j で $V_{dc} = V_p$ の差が大きい場合, 区間 j 内には相互作用を振り切って飛び出した原子の割合が高いと考えられ, 正確な速度を求

Fig. 5 X-ray debris cloud picture with points of the cloud measured.

Fig. 6 Snapshot of debris cloud divided into ten parts to measure velocities.

められないために, その区間を除く. 次に, Fig. 5 の範囲 1 と範囲 2 の境界部 2 点での軸速度 V_{dc2} に対応する平均軸速度を求める. 実験の論文では, 範囲 1 のショットラインに沿った距離は, 時間が経過してもほぼ一定で, 範囲 2 の距離は広がっている. これは, 先端部 1 と境界部 2 での軸速度 V_{dc} の差がないことを示している. Fig. 7 で, 区間 h と区間 i で $V_{dc} = V_p$ の差が小さく, 区間 g と区間 h でその差が大きくなっていることから, 境界部 2 点の軸速度は区間 h での平均軸速度に対応する. 範囲 2 の後方部 3 点の軸速度 V_{dc3} は, デブリ雲の最も広がった区間での平均軸速度に対応する. これは, Fig. 5 の D3 点がデブリ雲の幅の最も広い部分に取られている比に対する衝突前後の速度比ためである.

4・2・2 t/D 比に対する衝突前後の速度比 プロジェクトイルとターゲットの密度を ρ とし, 簡単なモデルを考える. 体積 $(4\pi/3)(D/2)^3$ のプロジェクトイルが速度 V_p で衝突することにより, ターゲットの直径 D 厚さ t の領域がプロジェクトイルと共にデブリ雲として速度 V_{rmdc} で一体となって等速で運動すると考えると, 運動量保存則より,

$$\rho \left\{ \frac{4}{3} \pi \left(\frac{D}{2} \right)^3 \right\} V_p = \rho \left\{ \frac{4}{3} \pi \left(\frac{D}{2} \right)^3 + \pi \left(\frac{D}{2} \right)^2 t \right\} V_{dc} \quad (6)$$

から,

Fig. 7 Distribution of normalized velocity of debris cloud $V_{dc} = V_p$. The characters a, b, c, ..., j correspond to the domain defined in Fig. 6.

Fig. 8 Relationship between velocity of debris cloud (V_{dc}) and target thickness-projectile diameter ratio t/D . V_{dc1} , V_{dc2} and V_{dc3} correspond to the region 1, 2 and 3 in Fig. 5.

$$\frac{V_{dc}}{V_p} = \left\{ 1 + \frac{3}{2} \left(\frac{t}{D} \right) \right\}^{-1} \quad (7)$$

と表される。実際には、デブリ雲の構造は不均一であり、このような単純な仮定はなりたないが、超高速変形では、構造全体の支持状態にほとんど依存せず変形は衝突点近傍の幾何学的な形状に強く依存することが知られており、Piekutowski¹⁶⁾をはじめ、これまでに多く q の実験結果がパラメータ t/D で整理できることが示されている。

Fig. 8 は、 t/D 比に対する衝突前後の速度比 $V_{dc} = V_p$ を示したものである。この図から、 t/D 比の増加に伴い、それぞれの区間の V_{dc} および V_p が一定の割合で減少していることが分かる。これは、 t/D 比の増加に伴い、デブリ雲に含まれるターゲットの破片の割合が高くなり、衝突後の速度が減少するためである。

また、実験結果とシミュレーション結果をプロットした点が、一直線上にのっていることを確認できる。これは、 t/D 比をパラメータとして用いることで、モデルのサイズを考慮しないで、実験が困難な領域を分子動力学シミュレーションで定量的に予測できる可能性を示している。

5 結 言

微小なスペースデブリの人工衛星等への超高速衝突時の破壊の現象を分子動力学法を用いて解析した。得られた知見を整理すると以下のとおりである。

(1) 異なる衝突速度に対して、デブリ雲の構造を調べ、その違いを確認した。衝突速度 7, 8km/s と 12km/s で、デブリ雲の構造が異なることを明らかにし、さらに衝突速度の増加とともに、デブリ雲の破片が細くなることを示した。

(2) t/D 比を変えることで、デブリ雲内の速度を調べ、衝突前後の速度比をプロットした点が一直線上にのることを示した。

実験結果とここで示したシミュレーション結果との間には、寸法の違い、 t/D のパラメータの範囲に差があり、かならずしも定量的比較はこの段階では難しいが、今後の検討によって、実験の困難な領域を分子動力学シミュレーションが補える可能性も期待できる。

尚、本研究は、稲盛財団からの研究助成を受けた。記して謝意を表す。

参 考 文 献

- 1) T. Yasaka, "Space debris problems", (1997) Shokabo.
- 2) G. D. Olsen and A. M. Nolen, "Advanced Shield. Design for Space Station Freedom", Int. J. Impact Engng, Vol.14, pp.541-549 (1993).
- 3) M. L. Alme and C. R. Rhoades, Jr., "A Computational Study of Projectile Melt in Impact with Typical Whipple Shields", Int. J. Impact Engng., Vol.17, pp.1-12 (1995).
- 4) R. P. Young, Jr. and M. E. Smith, "The Evaluation of Debris Bumper Systems Using the Counter-Fire Test Technique", Adv. Astro. Sci., Vol.90, pp.781-789 (1996).
- 5) A. J. Piekutowski, "Fragmentation of Sphere Initiated by Hypervelocity Impact with a Thin Sheet", Int. J. Impact Engng., Vol.17, pp.627-638 (1995).
- 6) J. D. Walker, D. J. Grosch and S. A. Mullin, "Experimental Impacts above 10km/s", Int. J. Impact Engng, Vol.17, pp.903-914 (1995).
- 7) K. Shiraki, M. Harada, N. Noda, T. Yamamoto and M. Katayama, "An Evaluation of the Projectile Shape Effects for the Hypervelocity Impact Test", Proc. of the 41th JSASS/JSME Structures Conference, pp.173-176 (1999).
- 8) R. A. McDonald, W. G. Tanner and W. M. Alexander, "A Comparison of Hole Size Formation Caused by a Hypervelocity Impact with a Thin Film Using Molecular Dynamics and CTH", Int. J. Impact Engng., Vol.14, pp.509-518 (1993).
- 9) E. P. Farhentholt and C. H. Yew, "Hydrocode Simulation of Hypervelocity Impact Fragmentation", Int. J. Impact Engng., Vol.17, pp.303-310 (1995).
- 10) H. Takaoka, K. Koshiba and T. Fujiwara, "Numerical Simulation on Multiphase Deformation Caused by a Hyper-Velocity Impact", J. of the Jpn Soc. for Aeronautical and Space Sci., Vol.45, No.522, pp.371-379 (1997).
- 11) W. G. Hoover, AMD-vol.180/PVP-vol.268, ASME, pp.231-242 (1993).
- 12) K. Nakatani, N. Kousaka, R. Kayanoki and Y. Sugiyama, Japanese edition of Scientific American (NIKKEI SCIENCE), Vol.29, No.2, p.115 (1999).
- 13) H. Kitagawa, T. Kitamura, Y. Shibutani and A. Nakatani, "Shoshinsya notameno Bunshidorikigakuho" (1997) Yokendo.
- 14) A. Ueda, "Computer Simulation" (1990) Asakura Books Cooperation, Tokyo.
- 15) L. A. Girifalco and V. G. Weizer, "Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals", Phy. Rev., Vol.114, pp.687-690 (1959).
- 16) A. J. Piekutowski, NASA Contractor Report, 4707 (1996).
- 17) R. Destefanis and M. Faraut, "Testing of Advanced Materials for High Resistance Debris Shilding", Int. J. Impact Engng., Vol.20, pp.209-222 (1997).