

令和元年6月27日現在

機関番号：12301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2018

課題番号：16K14499

研究課題名(和文)超高速飛翔体衝突による材料の損傷進展の微視的過程に関するマルチフィジックス解析

研究課題名(英文) Multi-physics Analysis of Microscopic Process of Damage Development of Material by Hypervelocity Impact (HVI) of Projectile

研究代表者

相原 智康 (AIHARA, Tomoyasu)

群馬大学・大学院理工学府・准教授

研究者番号：00231100

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：航空宇宙分野におけるスペースデブリ等への防御を想定し、金属および有機ポリマー固体同士の超高速飛翔体衝突(HVI)について、分子動力学法(MD)によるシミュレーションを行った。衝突に起因する超高速変形・衝撃波伝播・破壊・相変化について、時系列データのマルチフィジックス解析を行った。(1)科学的観点から、金属材料において発生する弾性波としての衝撃波の伝播と変形・破壊・相変化との関係、ならびに衝撃波面の微細構造についてナノレベルで解明した。(2)工学的観点から、どのような金属/ポリマー複合構造が耐スペースデブリシールドとして適切であるかの解析を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

材料の動的変形に関する連続体力学計算(FEM等)では、変形・熱・相変化に関する物理量間の変換パラメータの仮定が必要である。本研究結果は、これらのパラメータの仮定なしに単一の方程式から得られたものである。従来の材料変形に関するMD計算は変形前後での結晶構造変化や欠陥発生の評価に留まっていた。本研究は、各原子が有する種々の物理量のその場解析、すなわち、超高速変形とそれに伴う諸現象のダイナミクスの詳細をリアルタイムに解析できることを示す。本研究結果は、耐スペースデブリシールドの複合構造の最適化の知見を与える他、航空機への高速飛翔体衝突によるダメージの低減(特に乗員の安全性確保)にも応用できる。

研究成果の概要(英文)：For the protection from the space debris etc. in the aerospace field, hypervelocity impact (HVI) between the metallic and/or the organic polymer solid projectiles was simulated by using molecular dynamics method. Multi-physics analyses of time series were performed on ultra-fast deformation, elastic wave propagation, fracture and phase change which are caused by collision.

(1) From a scientific viewpoint, the relationship between the propagation of shock wave as an elastic wave generated in metallic materials and the deformation, destruction, and phase change, as well as the fine structure of the shock wave surface have been clarified in nano level.
(2) From an engineering viewpoint, it has been analyzed what kind of metal/polymer composite structure is appropriate as space debris shield.

研究分野：材料工学，分子シミュレーション

キーワード：超高速飛翔体衝突 HVI 超高速変形 衝撃波 分子動力学法 塑性変形 スペースデブリ 金属/ポリマー複合構造

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

(1) 地球周囲の宙空間上のスペースデブリ（宇宙ゴミ）は増え続けており、これらは～10 km/s レベルの相対速度で宇宙ステーション・宇宙船・人工衛星等と衝突する。この様な超高速飛翔体衝突（HVI: Hypervelocity Impact）においては、スペースデブリが微小質量であってもこれらの構造体に甚大な被害をもたらす、安全上の大きな問題となっている。

(2) 耐スペースデブリシールドについては、米国・ESA を中心に、地上での超高速飛翔体衝突実験による材料損傷の研究がなされている。現行の国際宇宙ステーションでは、Nextel 織布・低密度ポリエチレン・ケブラー織布などを多重積層したシールドが用いられている[引用文献①]。しかし、超高速飛翔体衝突は極短時間に生じる超高速現象であるため、材料の損傷過程には不明な点も多い。また、他のシールド方法の開発も望まれている。

(3) 研究代表者は、分子動力学法（MD）による材料および流体のシミュレーション研究を長年行っている。分子動力学法（MD）は、物質の原子レベルでのダイナミクスをフェムト秒レベル（ $1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$ ）以下の時間分解能でシミュレーションすることが可能な方法である。研究代表者は、平成24年度からは高速飛翔体衝突による金属の変形・破壊現象を研究している。最近、原子毎の物理量に着目した解析により、物質中の局所的な力学状態や温度変化を可視化する手法を確立した。これより、超高速飛翔体衝突による材料の高速変形・破壊の過程の解析には、MD 計算とマルチフィジクス解析との併用が有用との着想に至った。

2. 研究の目的

(1) 超高速飛翔体衝突（HVI）を受ける材料のマルチフィジクス解析として、MD 計算から得られる時系列データを、熱力学量・変位や速度等の動力学量・弾性力学量・弾性波（衝撃波）の観点から解析する。これらの解析で得られる原子レベルでの諸物理量と、材料の原子・組織レベルでの変形・破壊・相変化との相関から、超高速飛翔体衝突による材料損傷の微視的な本質を解明する。

(2) 材料の変形・破壊と強い相関を示す物理量と、材料の組成・結晶構造・組織・界面構造との関係を明らかにし、超高速飛翔体に対するシールドに最適な材料の複合構造を探索する。

3. 研究の方法

(1) 分子動力学法（MD）による原子レベルでのシミュレーション

金属や有機ポリマーからなる飛翔体と被衝突体とを相対衝突速度 1～10 km/s で衝突させる MD シミュレーションを複数回実施し、マルチフィジクス解析のための原子毎の位置と速度の時系列データを得る。解析と可視化を容易にするために、衝突後の系の重心の運動量が 0 となるように両物体の初期速度を設定する。

(2) マルチフィジクス解析とその可視化

原子毎の物理量として、スカラー量である温度・ポテンシャルエネルギー・内部エネルギー・数密度、ベクトル量である運動量・変位、テンソル量であるひずみについて解析する。各種の物理量の空間的な局所平均を計算して材料組織学的な変化と比較する。また、これらを原子レベルでマッピングした可視化を行う。

超高速飛翔体衝突により生じる材料中の変化は非正常現象であるため、原子の変位・運動量ベクトルの時空相関から変形挙動と衝撃波（弾性波）を解析する。また、MD シミュレーションにおいて得られる原子毎の位置の時系列データについて、FFT アルゴリズムによる高速フーリエ変換を行い、連続体の観点から評価する。

超高速飛翔体の持つ高い並進運動エネルギーがシールド材料内の熱エネルギーに変換される過程についてマルチフィジクス解析を行う。これにより、材料の融解・気化等の相変化によるダメージの生じやすさと、材料の組成・結晶構造との関係を明らかにする。

(3) シミュレーションモデル

金属および有機ポリマーを対象材料として、超高速飛翔体衝突における種々の衝突モードについての計算モデルと境界条件の最適化を行う。

原子間の相互作用は、金属については EAM 等の汎関数ポテンシャルにより、有機ポリマーについては有機分子内部の原子間結合の多体効果を考慮した Dreiding ポテンシャルにより計算する。

界面構造を含む被衝突体のモデル（異種材料を複合化したシールド構造）について計算する。材料の変形や運動量の空間分布特性の違いを積極的に利用して、超高速飛翔体の持つ運動量を効果的に分散させることができる耐スペースデブリシールドの構造について検討する。

4. 研究成果

(1) 平成28年度

金属飛翔体と金属被衝突体の材質として複数種類の金属材料を対象とするとともに、被衝突

体表面に対して種々の角度で飛翔体を衝突させる MD シミュレーションを実施した。金属結晶中の音速よりも塑性変形の進展速度が速くなると弾性波としての衝撃波は塑性領域先端を頂点とした円錐状に進展すること、飛翔体による侵徹および被衝突体の損傷の程度はそれらの金属の組成・結晶構造・弾性スティフネスに依存して変化すること、被衝突体表面に対して飛翔体が斜めに衝突する場合は、飛翔体に回転が生じて侵徹の程度が低くなること、および、被衝突体の表面では表面波動的な変位が長距離で生じることを明らかにした。

高速金属飛翔体の非晶質ポリエチレンポリマー被衝突体への衝突のシミュレーションと解析も実施した。金属飛翔体の被衝突体への侵徹中に両者の界面ならびに非晶質ポリエチレンポリマー表面でポリエチレン分子の特異な構造が形成されること、ポリエチレン分子には一種の自己修復性が存在すること、および、1 km/s レベル以下の相対速度の衝突ではポリエチレンポリマー被衝突体は比較的高い耐侵徹性を有することを明らかにした。これらは、ポリエチレンの鎖状の分子構造と金属との相互作用に起因する。

分子動力学シミュレーションから得られる 3 次元の原子毎の離散型データを連続体量としての格子型データへ変換する手法について種々検討した。その中で、空間を一旦均等にセル分割し、その後改めてスパーセルベースで原子毎の物理量の空間的な局所平均を計算する方法が効果的であることを見出した。原子毎の離散型データの 3 次元高速フーリエ変換 (FFT) とそれに続く逆フーリエ変換による連続体量への変換手法よりも、本手法は高速計算が可能でかつ FFT と同等レベルの精度を有する。

物体としての重心速度を除外した各原子の運動量を用いることにより、衝突過程の初期においては、飛翔体と被衝突体の両材料の超高速変形・破壊・相変化を適切かつ効果的に解析・可視化できる。しかし、衝突過程の中期以降においては本手法は十分ではない。本研究では、固体中の音速よりも高速に進行する塑性変形と相変化に伴う連続体的な空間不均一性に、その原因があることを明らかにした。これより、材料中で原子サイズよりは大きい物体サイズよりは十分に小さい局所領域の重心速度をまず評価し、その影響を除外して各原子の変位や運動量を解析する必要があることを明らかにした。

(2) 平成 29 年度

平成 28 年度よりも衝突方向に十分な厚さを有する平板状金属被衝突体への柱状金属飛翔体の衝突のシミュレーションを行った。これより、柱状飛翔体の被衝突体への侵徹の形態が、被衝突体を構成する金属の種類に依存することを明らかにした。金属被衝突体の変形と破壊が、衝撃波進展領域・弾性変形領域・塑性変形による多結晶化領域・ランダム構造化領域の順序で、複合的に進展することを明らかにした。また、原子構造全体の時空相関の定量解析として動的構造因子を求めるスペクトル解析を行った。空間的な相関を解析する方向を限定することで、超高速飛翔体衝突の前後で結晶中のフォノンの状態が大きく変化することを明らかにした。

前段落のシミュレーションモデルは、高速変形と破壊の過程についての多くの情報を持たらず。しかし固体中を伝播する衝撃波面の形状は複雑となるため、衝撃波面の微細構造の解析は困難である。そこで、平成 29 年度では新たに、600 Å 強の全長を有する同一サイズの金属結晶同士の衝突モデルによる MD シミュレーションを行うことで、完全な平面波の弾性波として発生・伝播する衝撃波の時系列データを得た。これにより、完全な平面波としての衝撃波における結晶面毎のマルチフィジックス解析が可能になり、衝撃波進展に伴う原子の変位・運動量ベクトルの時空相関を明らかにできた。

非晶質ポリエチレンポリマー被衝突体への超高速飛翔体衝突についても、平成 28 年度よりも大規模化したモデルに対して、衝突の MD シミュレーションを行った。所定の時刻 0 と任意の時刻 t における末端炭素間距離自己相関関数を、各ポリエチレン分子の両端の C 原子の相対位置ベクトル $\mathbf{r}(0)$ と $\mathbf{r}(t)$ の内積として新たに定義し、変形・破壊に伴うポリマー分子形状の時間変化を定量解析し、ポリマー固体の高速変形特性を明らかにした。

(3) 平成 30 年度

金属同士の高速度衝突により、平面波の弾性波として発生・伝播する衝撃波について、原子面毎の速度と原子面間距離 (ひずみに相当) の解析を行った。連続体的観点からは、金属の音速レベルで進展する衝撃波面の前後で両物理量は大きく変化する。図 1 に示す様に衝撃波面の厚さは 50 Å レベルであり、衝撃波面進行方向からその後方に向かって両物理量は振動減衰するナノレベルの構造を有する。その構造はシグモイド関数、指数関数、および三角関数を用いて適切に近似できる。この衝撃波面の微細構造は、金属表面間に作用する原子間力が、衝突時の極短時間に引力から斥力に変化することにより発生する。また、衝撃波が金属材料中を最初に伝搬する場合は、衝撃波面の微細構造は維持されるが、

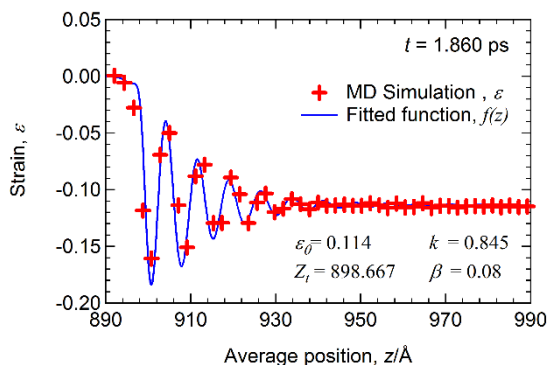


図 1 ひずみで評価した衝撃波面の微細構造

自由表面での反射後はその微細構造における高周波成分は時間とともに失われることを明らかにした。

複数の種類の金属/ポリマー複合構造を有する被衝突体への超高速飛翔体衝突のシミュレーションを行った。材料中で原子サイズよりは大きい物体サイズよりは十分に小さい局所的な領域毎の平均物理量についてマルチフィジックス解析を行い、どのような金属/ポリマー複合構造が耐スペースデブリシールドとして適切であるかの評価を行った。金属と比較すると、ポリマーは飛翔体の並進運動エネルギーを空間的に広げて伝搬する特性を有することが判明した。この効果により、同一材質・質量の金属とポリマーの複合構造において、例えば図2および3に示す様に両者の積層構造を適切に制御することにより、飛翔体の貫通を抑制できることを明らかにした。また、金属層中を侵徹する金属飛翔体先端部は高密度な状態となっていることを、局所密度の空間分布の解析から明らかにした。

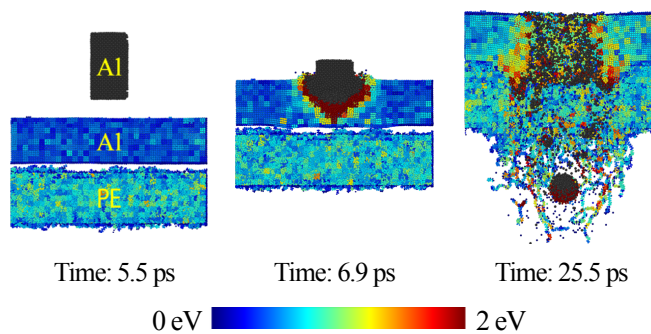


図2 Al/ポリマー複合構造被衝突体における局所熱エネルギーの空間分布 (相対衝突速度 5 km/h)

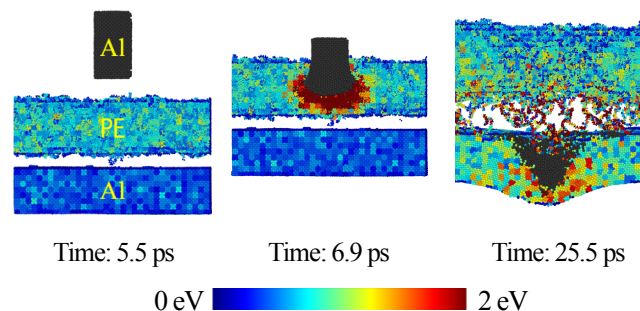


図3 ポリマー/Al 複合構造被衝突体における局所熱エネルギーの空間分布 (相対衝突速度 5 km/h)

<引用文献>

① Michael R. Gorman, Steven M. Ziola, Hypervelocity Impact (HVI) Volume 1: General Introduction, NASA/CR-2007-214885/Vol1, 2007, pp. 1-28

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 (計 0 件)

〔学会発表〕 (計 7 件)

- ① 大月 弥之助、相原 智康、金属材料中を伝播する衝撃波のダイナミクスに関する分子動力学解析、平成30年度衝撃波シンポジウム、2019年3月5日～7日、横浜国立大学 (神奈川県・横浜市)
- ② 狩野 翔、相原 智康、高速飛翔体衝突によるポリマー/金属複合構造の損傷に関する分子動力学解析、平成30年度衝撃波シンポジウム、2019年3月5日～7日、横浜国立大学 (神奈川県・横浜市)
- ③ 大月 弥之助、相原 智康、高速飛翔体衝突による金属材料の損傷に関する分子動力学解析、平成29年度衝撃波シンポジウム、2018年3月7日～9日、東北大学 (宮城県・仙台市)
- ④ 狩野 翔、相原 智康、飛翔体衝突によるポリマー材料の損傷に関する分子動力学解析、平成29年度衝撃波シンポジウム、2018年3月7日～9日、東北大学 (宮城県・仙台市)
- ⑤ 相原 智康、大月 弥之助、狩野 翔、高速金属飛翔体衝突による材料の損傷に関する分子動力学解析、日本機械学会2017年度年次大会、2017年9月3日～6日、埼玉大学 (埼玉県・さいたま市)
- ⑥ 相原 智康、吉川 亨、大月 弥之助、高速飛翔体衝突による金属材料の損傷に関する分子動力学解析、平成28年度衝撃波シンポジウム、2017年3月8日～10日、ヴェルクよこすか (神奈川県・横須賀市)
- ⑦ 吉川 亨、相原 智康、高速飛翔体の衝突による金属材料の変形のダイナミクスの分子動力学的研究、日本機械学会2016年度年次大会、2016年9月11日～14日、九州大学伊都キャンパス (福岡県・福岡市)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<https://www.mst.st.gunma-u.ac.jp/int3/aihara/>

6. 研究組織

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。