# 特集「日本における衝突研究の軌跡」 離散要素法による衝突の数値シミュレーション の歩み

# 和田 浩二1

2015年6月1日受領, 査読を経て2015年7月13日受理.

(要旨)数値シミュレーションは天体の衝突現象を解明するうえで有効なツールである.日本の天体衝突研 究においては粒子法による数値シミュレーションが盛んに行われ成果を挙げている.本稿では粒子法の中で も筆者が中心となって取り組んでいる離散要素法について解説し,衝突シミュレーションの事例を幾つか紹 介する.離散要素法は個々の粒子の振る舞いを計算する手法であることから、レゴリス層やダストといった 粒子からなる系における衝突現象を解明する有効な手段であり,さらなる応用が期待される.

# 日本における天体衝突数値シミュレ ーションと離散要素法

天体衝突現象は惑星系の進化の各段階でことごとく 顔を出す重要な鍵となる過程であり、室内実験やフィ ールド調査ならびに探査による観測など様々な手法で 研究されている。それらの手法に対して数値シミュレ ーションの貢献するところは、実験では再現し得ない パラメータ(天体サイズや衝突速度など)の影響を明ら かにすることや、実験や観測においてみられる現象の 詳細な過程を明らかにすること、などであり、天体衝 突を研究するうえで必須の手法となっている. しかし ながら日本の惑星科学における天体衝突研究において は、それらの手法がバランスよく取り組まれてきたと は言えない状況である、本特集号の記事群が示す通り、 衝突実験を行う研究室は国内に数多く存在し多くの重 要な貢献を果たしてきたが、数値シミュレーションに 関しては盛況とは言えなかった(今では多少改善され た). これは天体衝突現象に興味のある研究者に実験 家が多かったという歴史的経緯によるものであろう. 10年以上前のそのような状況において大学院生であ った筆者は、衝突実験に対するこだわりもなく、国内 ライバルも少ないだろうという目論見もあって、衝突

wada@perc.it-chiba.ac.jp

の数値シミュレーションに取り組むことにし,以来研 究を続けている.

一口に数値シミュレーションと言ってもその方法は さまざまである。大きく分けると、計算空間をメッシ ュ(格子)で区切って各格子点上の物理量の推移を計算 していく格子法(またはオイラー法)と、計算空間に粒 子(的なもの)を配置し粒子の運動を追いつつ粒子上の 物理量を計算していく粒子法(ラグランジュ法)がある. 世界を見渡せば、天体衝突のシミュレーションは格子 法も粒子法も同様に開発・利用されている。例えば、 格子法では近年iSALEというコードが天体衝突研究 用に無償配布され普及しつつある(解説は[1]参照). また粒子法の代表的なものとしてはSmoothed Particle Hydrodynamics(SPH法)があり、天文分野を はじめ惑星科学上の衝突現象に対して数多くの研究事 例がある(本特集別記事参照[2]). そんななか,国内 ライバルに限れば安穏としていられても、世界をみれ ばライバルの多い同じ手法で後発として飛び込み勝負 するのは分が悪いとみた筆者は、まだ惑星科学におい てほとんど使われていなかった離散要素法(Discrete Element Method: DEM)と呼ばれる粒子法に着目しこ れをもって勝負しようと考えた次第である.

DEM自体は,他分野,例えば粉体工学や土質力学 分野で盛んな手法であり,手引書も多く刊行されてい るが[例えば3,4],天体衝突現象とくに衝突クレータ

<sup>1.</sup> 千葉工業大学惑星探査研究センター

ー形成に対しては後述するいくつかの理由もあって用 いられてこなかった. DEMは、粒子からなる系にお いて近接(多くの場合は接触)粒子間相互作用を計算し ながら個々の粒子の運動を追跡するものである.計算 するうえで、連続体力学の概念である場の圧力や構成 方程式といったものを必要とせず,連続体(流体)シミ ユレーションとは本質的に違う手法になる(ちなみに SPHは粒子法であるが連続体シミュレーションであ る[2]). 粉体工学分野で盛んなことからもわかる通り、 多数の粒子からなる系の振る舞いをシミュレートする 最も素直な方法と言えよう. では惑星科学分野での有 用性はどうだろうか?天体衝突には、「粒およびその 集合体」の振る舞いが重要な場面が多々ある. 例えば 近年の探査によって月面のみならず小惑星の表面も砂 粒から構成されるいわゆる [レゴリス層] で覆われて いることが一般的であることが明らかになってきた [例えば5]. そのようなレゴリス層の振る舞いおよび それへの衝突を理解するには、離散要素法によるシミ ュレーションは力を発揮するだろう.また、原始惑星 系円盤において、惑星形成への道はミクロンサイズ以 下の粒子である固体ダストから始まる。そのダストが 衝突合体成長して多数の粒子からなるダストアグリゲ イトとなり、やがて微惑星形成へと至るとされている。 しかしながら微惑星形成はさまざまな理由から問題を 多く抱えており[6]、ダストアグリゲイトの衝突過程 をシミュレーションにより解き明かすことが重要であ る. ここにもDEMによるシミュレーションの貢献が 期待される。

以下では、DEMについてその方法および利点欠点 を解説しながら、計算例として筆者が取り組んできた 研究テーマである衝突クレーター形成過程とダスト衝 突過程について取り上げる. さらにこれまでの研究を 俯瞰して見えてきた共通見解についても述べる.

## 2. DEM

DEMは個々の粒子の振る舞い(粒子間の非弾性衝 突や摩擦および回転運動など)をよく記述できるシミ ュレーション手法である.これは例えば衝突クレータ ー形成の際に生じる放出物(イジェクタ)粒子の運動を 理解し速度分布などを求めるうえで大きな利点である. さらに、粒子からなる系の振る舞いをシミュレートす るうえで、連続体シミュレーションでは前もって与え ねばならない構成方程式(これが良くわかっていな い)を与える必要がなく、個々の粒子間相互作用のモ デルを与えるだけで系の全体的な振る舞いはシミュレ ーション結果として出力される.

DEMには、粒子を剛体球(hard sphere)として扱う ものと軟体球(soft sphere)として扱うものの2つの流 儀がある.後者の軟体球を扱う手法をとくに個別要素 法(Distinct Element Method)と称することが多い(こ れは最初の論文[7]でそう呼称されたからという歴史 的経緯による.離散要素法も個別要素法もどちらもそ の英語表記を略せばDEMであり、多くの場合個別要 素法のことを指していることが多いが、離散要素法の 方がより包括的な概念である).以下では、DEMと記 述した場合、個別要素法を指すものとする.

剛体球モデルでは、粒子同士は重なることはない. その接触前後の振る舞いは、設定された粒子間反発係 数に応じて計算される.このため接触中の振る舞いは 計算されることなく、接触の帰結が「一瞬で」出力さ れる.このモデルでは、次に接触する粒子ペアを見つ けては時間を更新して計算を進めていけばよいことか ら、事象推進型(Event-driven)手法とも呼称される. 一方、軟体球モデルでは、接触している粒子同士が重 なることを許し(実際には粒子は接触面で変形してい ることになる)、その重なり具合に応じて(たいていの 場合重なった距離に応じて)接触中の弾性反発などの 相互作用を逐一計算し、結果として粒子の振る舞いが 計算される.これは分子動力学的(MD-like)手 法とも言われている.

二つのモデルにはそれぞれ得手不得手がある. 剛体 球モデルは,粒子同士の接触が頻繁ではなくあっても 2体接触である場合に有効である.計算の時間ステッ プは接触頻度によるため,接触頻度が少なければ計算 時間を大幅に短縮できる.例えば,惑星リング粒子の シミュレーション[8]などでは有効な手法である.一 方で,粒子接触が頻繁で3体以上の同時接触が盛んな 場合や粉体層のように粒子同士が常に接触しているよ うな場合には,原理的に計算の時間ステップを無限小 にする必要があり破綻する.それでも,計算時間の短 さと粒子間相互作用の計算の簡便さは魅力的であり, 破綻を回避する方策(例えば粒子塊の構成粒子の常時 振動を許容する,あるいは計算しない,など)を施して, 微惑星や小惑星の破壊と再集積のシミュレーションな どがこの方法で行われてきた[例えば9,10].

多数の粒子の同時接触の問題は,実際に接触中の粒 子の振る舞いが計算される軟体球モデルにおいては解 消される.しかし,接触中の計算を行うために計算の 時間ステップを小さくする必要がある.例えば,接触 球同士の弾性力をヘルツ(Hertz)則(反発力が重なり 距離の3/2乗に比例する)[11]に従ってモデル化した場 合,相対速度νで衝突した半径rの球同士の接触継続 時間τは

$$\tau = 5.84 \left[ \frac{\rho (1 - \nu^2)}{E} \right]^{2/5} \frac{r}{\nu^{1/5}}$$
(1)

で与えられるが(p: 粒子物質密度, v: ポアソン比, E:ヤング率).時間ステップはこれの1/20程度以下 にすることが推奨されている[4]. この式からわかる 通り, 高速の衝突や粒子サイズが小さい場合には時間 ステップはより小さくする必要があることが分かる. 例えば、半径1 mmの石英球が速度100 m/sで衝突す るとき、τはおよそ2μ秒となり、砂層におけるクレ ーター形成時間約0.1秒と比較するとごく短い.この ことは扱い得る粒子数にも限界が生じることを意味し. 現状のパソコン程度の計算機では、パラメータスタデ ィを行うことも考えると高々100万個程度の粒子数に とどめておくことが現実的である。100万個と聞くと 多い印象を抱かれるかもしれないが、一辺に100個粒 子を並べた立方体領域程度に過ぎず、スプーン一杯の 砂糖粒程度である. また. ヘルツ則に代表される粒子 間相互作用モデルは静力学平衡に基づいており、物理 的に意味のある粒子間相対速度には限界があると考え られ、粒子物質の音速以下が望ましい(ただし、ヘル ツ則は後述するように線形バネではないので、適用限 界速度は大きいかもしれない).また、粒子「間」の接 触振る舞いは記述できても粒子内を走る音速や衝撃波 は記述できず、粒子そのものが破壊されることは想定 されていない、したがって、衝突速度を考えるととも に,扱う粒子とは何か?ということを考える必要があ る。計算粒子のサイズとしてダストアグリゲイト構成 粒子やレゴリス粒子のサイズそのものをもってする場 合には、粒子が破壊されない限り堂々と計算粒子はそ れら現実の粒子に対応していると言えるが(球形かど

うかという「形」の問題は別として),例えば大きな砂 箱や小惑星といった計算領域を大きく取りたいがため に構成粒子を現実の粒子より大きく設定する、といっ た場合、その粒子は何を意味するか慎重に考えておく べきである.このような制約があるために、km/s以 上の高速で衝突するときのクレーター形成(クレータ ーも大きくなるのでより大きな計算領域を用意する必 要がある)には注意すべきであり、これが衝突クレー ター形成シミュレーションにあまり適用されない理由 である、総じて、軟体球モデルにおいては扱う粒子の サイズと速度の設定が適切であれば、粒子が密に詰ま った系の振る舞いをよくシミュレートできると考えら れ.惑星科学的分野でもシューメーカー・レヴィー第 9彗星の分裂[12]や衝突クレーター形成[13, 14], イジ ェクタ堆積[15], ラブルパイル(瓦礫)小惑星の衝突 [16]. 小惑星レゴリス層の状態[17]. ダストの衝突[18-281などの計算例がある.

離散要素法のその他の特徴としては、粒子のサイズ 分布や非球形粒子を扱い得ることが挙げられる. もち ろん現実の粒子は不規則形状が普通であろうから、真 球の粒子によるシミュレーション結果は現実を反映し ていないかもしれない. ただし、非球形粒子等を取り 入れた場合粒子の接触判定に時間が費やされ、計算コ ストが増す. そのため球形粒子でシミュレーションを 行うことが多いが、結果を解釈するうえでは注意が必 要である.

## 3. DEMを用いた衝突シミュレーション

軟体球モデルを用いる DEM の計算は、大まかには、 1)接触粒子の探索、2)粒子間相互作用の計算、3)粒子 の位置・速度の更新、4)時間の更新、のサイクルで進 んでいく.このうち最も計算コストを要するのは、1) の接触粒子の探索である.ある粒子ペアが接触してい るかどうかはその距離を計算して判定するしかなく、 N個の粒子を扱っているならば単純にはN<sup>2</sup>回(全ペア 数)の距離計算が必要となる.ただし、あらかじめ接 触粒子の探索を始める前に粒子ごとに近隣粒子のリス トを作成しておけば、探索候補粒子数が限定され探索 回数を減じることが可能である.そのために空間を格 子状に区切っておいて、粒子と格子番号との対応付け しておくという方策が良く用いられる[例えば、3.4、 13参照].

なお,粒子法全般に言えることであるが,接触粒子 の探索を毎時間ステップごとに行わなくてはならない ことから,並列計算とくにメモリ分散型の並列計算(例 えばMPI)とは相性が悪い.なぜなら,原理的には接 触粒子があらかじめ決まっていないために,全並列メ モリが全粒子の位置速度情報を保持しなくてならず, そのため毎時間ステップごとに全粒子情報を交換する 必要が生じるからである.もちろん様々に工夫すれば (近接粒子リストの作成頻度を減らす,計算の分担を 粒子番号ではなく空間領域で分割する,など)コスト 削減は可能であるがケースバイケースである.なお, メモリ共有型の並列計算(例えばOpenMP)であれば, 粒子情報の交換をせずに済み,並列化は容易である.

次に、2)粒子間相互作用について述べる。粒子同士 の接触時に生じる弾性力とエネルギー散逸を簡単に表 現する手段として、バネとダッシュポットが並列して つながったいわゆるフォークトモデル(Voigt model) が良く用いられる(もちろん、直列につないだり直列 と並列を組み合わせたり、とより複雑なモデルを構築 することも可能であるが、重なり距離の関数として力 が与えられるフォークトモデルが最も簡単である). すなわち、粒子に作用する力Fは、粒子間重なり距離 るおよびその速度  $\delta$ の関数として以下のように与え られる:

$$F = -k\delta - \eta\dot{\delta} \tag{2}$$

ここでkはバネ定数,  $\eta$ はダッシュポットの粘性係数<sup>1</sup>である.これを接触粒子の法線方向と接線方向の どちらにも作用させる.さらに接線方向にはクーロン の摩擦則を表現する摩擦スライダーを作用させ,接線 方向の力 $F_i$ が法線方向の力 $F_n$ の $\mu$ (摩擦係数)倍を超 えないようにする

$$|F_t| = \mu |F_n|$$
 when  $|F_t| > \mu |F_n|$ . (3)

筆者のこれまでの計算例においてもフォークトモデル を用いている. さらに2球が接触した時の法線方向弾 性力*F<sub>Hert</sub>*を解析的に求めたヘルツ則[11]

$$F_{Hertz} = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R} \delta^{3/2} \tag{4}$$

をバネモデルに用い、与えた粒子間反発係数 ε を実 現するようなエネルギー散逸をもたらすダッシュポッ トの粘性係数

$$\eta = 2 \sqrt{\frac{Mk}{1 + (\pi/\ln\varepsilon)^2}} \tag{5}$$

を用いることで、粒子物質の計測可能な物性値(密度、 ヤング率、ボアソン比、反発係数、摩擦係数)で構成 することが可能である[3, 13](ここで $E^*$ は $1/E^* \equiv (1 - v_1^2)/E_1 + (1 - v_2^2)/E_2$ と定義され、 $v_{12}$ および $E_{12}$ はそ れぞれ接触粒子1と2のポアソン比及びヤング率であ る.またRは換算半径、Mは2球の換算質量、kはヘ ルツ則を用いると $\delta$ の関数となって $k=4/3E^*\sqrt{R}$  $\delta^{1/2}$ ).なお、ダストアグリゲイトの衝突計算におい ては、ヘルツ則に付着力の効果が加わったJKR理論 に基づいたモデル化を行っており、それについては後 述する.

粒子にかかる力が計算されれば、あとは並進と回転 の運動方程式を数値的に解くことで、時間ステップ分、 粒子を移動・回転させ、時間を進める. それでは、実 際の計算例を幾つか示そう.

### 3.1 粉体層への衝突クレーター形成シミュレー ション

室内実験において砂層への衝突実験は良く行われて おり[例えば29],レゴリス層への衝突の模擬の他,砂



図1:DEMシミュレーションによって形成された衝突クレー ターの断面図(トランジェントクレーター形成時).軸の単 位はcm.粒子は初期状態の深さに応じて色付けしてある. 中央左に見える黄色い丸は弾丸粒子を示す.

ここでいう「ダッシュボットの粘性係数」は、通常の「粘性係数」 と次元が違うので注意、変位速度に比例する抵抗力を与える ための係数のことを便宜上「ダッシュボットの粘性係数」と呼 ぶことにする。



図2: DEM衝突シミュレーションで得られたイジェクタ速度– 体積分布. 横軸は重力加速度gおよびクレーター半径R。を 用いて規格化したイジェクタ速度V。縦軸は速度V。以上の イジェクタの累積体積Vol.をR。で規格化したものを示す. 粒子間反発係数 ε および摩擦係数μを変化させても、衝突 点付近から放出される高速イジェクタについては差が見ら れるが、衝突点から離れた中低速度のイジェクタの速度分 布には差が見られない.

層自体の強度は小さいことから標的強度が重力に比べ 無視できるような大規模衝突(重力支配領域の衝突)過 程を理解する手段となっている。Wada et al.[13]は、 この砂層すなわち粉体層への衝突過程をDEMでシミ ュレートすることを試みた.砂層への衝突シミュレー ションに際しては、標的となる粉体層の準備段階から 個別粒子法による計算を行う. これは砂層のランダム 堆積状態(空隙率約40%)を解析的に作成することが 困難であり、標的作成の段階から数値計算が必要とな ってくるためである.具体的には3次元の箱を用意し そこヘランダムに粒子を自由落下させて堆積させる. とくに粒子間付着力や大きな粒子間摩擦がなければ、 砂粒のランダム堆積時の空隙率約40%が再現される (逆に粒子間付着力や摩擦力をコントロールすること で高空隙のターゲットを作成することも可能である). Wada et al. [13]のシミュレーションにおいては、半径 1 mmの石英粒子38万個を底面が20 cm四方の箱に堆 積させた結果,高さ約7 cmの堆積層が形成され,空 隙率は約43%であった。この堆積層に半径3mmの 弾丸粒子300 m/sで衝突させると、図1にみられるよ うなきれいなお椀型のクレーターが形成される、この 図だけでも、イジェクタとして飛び出す粒子は表面付



図3: 粉体層への貫入のDEMシミュレーション(断面スナップ ショット). 粒子は蓄積されている弾性エネルギーに応じ て赤色に着色されている.

近にあるものだけであるなど、イジェクタ放出の簡易 モデルであるZモデル[30]に調和的な結果を見ること ができる[31].また、イジェクタ粒子の速度-量分布 について実験と調和的となった[13].さらに特筆すべ きは、このイジェクタ粒子の速度-量分布は、粒子間 の反発係数や摩擦係数にほとんど依らないことである (図2).粒子間反発係数や摩擦係数はエネルギー散逸 のパラメータであり、それらに非依存であることは後 述する他のシミュレーション例でも見られ、DEMシ ミュレーションを行うに際して重要な示唆を与えるも のと考えられる.

#### 3.2 レゴリス層への衝突貫入シミュレーション

次に示す計算例は、粉体層への衝突貫入のシミュレ ーションである[32]. レゴリスで覆われた小惑星の表 面には大小さまざまな岩(ボルダ)が存在する. ほとん どのボルダの起源はその小惑星自体のクレーターから 放出されたイジェクタと考えられるが、そのようなボ ルダがレゴリス層へ低速で衝突した場合にレゴリス層 へどれぐらい貫入するのか、その貫入過程を探ること が小惑星の表面混合進化を考えるうえで重要となる. このシミュレーションでは実験との比較を主眼に置い



図4: 粉体層への貫入抵抗F(縦軸)を貫入速度v(横軸)に対してプロットしたもの. 貫入速度は貫入とともに減じていくため, 各パ ネルにおいて右から左へと時間が経過する. 各パネルは粒子間反発係数および摩擦係数を変えた結果を示す(比較のため真 ん中の上下は同じ図である). また3本の線は慣性抵抗則F=<sup>1</sup>/<sub>2</sub>C<sub>D</sub>ρ<sub>i</sub>Sv<sup>2</sup>において抵抗係数C<sub>D</sub>=0.5, 1, 2のものを示す(ρ<sub>i</sub>は標的 のバルク密度, Sは弾丸断面積).

て計算状況を設定した。すなわち、3.1節と同様に直 径420 µmの石英粒子を38万個堆積させた粉体層に, 直径6 mmのプラスティック球を弾丸として70 m/s の速度で打ち込む.粉体層粒子に比べ弾丸粒子が一桁 以上大きいため、弾丸は粉体層を貫入していく(図3)。 貫入中の内部の様子を探ることは数値シミュレーショ ンの利点の一つであるが、粉体中の不均一な応力分布 や粉体特有の孤立波(detached wave)の進行がみられ た[32]. さらに、貫入抵抗を直接算出してみると、不 均一な応力分布にもかかわらず、流体力学的な貫入速 度の2乗に比例する抵抗力が発生しその抵抗係数もお よそ1程度であることが示された。また、粘性散逸力 と類似の、速度に比例する項の存在も明らかになった. 得られた貫入抵抗力は実験結果と調和的であり. DEMによるシミュレーションの有用性を示すもので ある. また、貫入抵抗は、粒子間の反発係数および摩 擦係数にほとんど依らないことも明らかとなり(図4). ここでも散逸パラメータ非依存性という性質が浮かび 上がってきた.

# 3.3 はやぶさサンプラーホーンのシミュレーション

DEMの有用性を示す例として、最近筆者が行った 「はやぶさ2」搭載サンプラーホーン内の粒子挙動につ いてのシミュレーションを紹介する。日本の小惑星探 査機である「はやぶさ」および「はやぶさ2」では、小 惑星にタッチダウンして試料を採取するための機構と して、サンプラーホーンを搭載している[33].サンプ ラーホーン内で小惑星表面に向けて速度300 m/sで弾 丸を発射し、発生したイジェクタ粒子をサンプラーホ ーン上端に位置する捕集室へ回収するという仕組みで ある、この際、イジェクタ粒子がどれくらい回収され るのかが問題であり、実験とともにシミュレーション でもその挙動を探ることが重要となった(本特集号別) 記事[34]も参照). 直接の衝突シミュレーションは Schwartz et al. [14]が試みているが、衝突から回収ま でを計算することは大変時間がかかるため,筆者のシ ミュレーションにおいては衝突過程を省いた. すなわ ち、イジェクタ粒子として例えば半径1 mmの粒子を



図5:はやぶさ2サンプラーホーン回収量推定シミュレーション による相対回収量.壁との反発係数(横軸)および摩擦係数 (各線)に応じて回収量は変化する.

ホーンの底面に敷き詰め、速度分布則[35]に基づいて 射出し、以後のホーン内の粒子の挙動をDEMで計算 していくというものである. 小惑星上の微小重力環境 を模擬することは室内実験ではなかなか難しいが、シ ミュレーションでは可能であり、小惑星表面で回収さ れる試料量について示唆が得られる。行ったシミュレ ーションによると、回収量は粒子と壁との反発係数お よび摩擦係数に大きく依存することが明らかとなった (図5). 例えば反発係数や摩擦係数を大きくすると. ホーン内の壁に衝突した粒子は壁面に沿って上昇でき ず、回収量が大幅に低下する、このような散逸パラメ ータ依存性は3.1節および3.2節で示した散逸パラメー タ非依存な結果とは真逆であるが、この計算において は粒子間衝突がほとんど見られず、エネルギーが散逸 しにくい系であることが原因と推察される.3.1節お よび3.2節の例では粒子は集団として密に存在し、そ れら多数の粒子間相互作用の結果として反発係数や摩 擦係数がいくつであっても容易にエネルギーが散逸す る. その結果, 散逸パラメータに非依存な結果が得ら れたと考えられる.

# 4. ダスト衝突シミュレーションとその 歴史

原始惑星系円盤を構成する固体成分である塵すなわ ちダストは,惑星の原材料であり,その衝突成長合体

過程が惑星形成論において重要な役割を果たす、この ダスト,もとは星間塵として1µm以下のサイズの粒 子であったものが、円盤内で衝突付着した結果、多数 の粒子からなる「アグリゲイト」の形態で存在すると 考えられている(図6).しかも成長初期の衝突速度が 小さい間は、同じサイズのアグリゲイト同士が付着し ていく結果. いわゆるBallistic Cluster-Cluster Aggregation(BCCA)という高空隙かつフラクタル次 元がおよそ2という構造を保持する[36]. 成長が進み 衝突速度が大きくなると、BCCAアグリゲイトは圧縮 された構造になると考えられている。このようなダス トアグリゲイト同士が円盤内でどんどん衝突付着して 成長し、やがてkmサイズの微惑星となり、その微惑 星も集積して原始惑星へと成長していく、というのが 現在の惑星形成シナリオである.しかしながら、ダス トが衝突付着して微惑星にまで成長する過程には様々 な障壁(例えば数10 m/sという高速衝突による破壊問 題)が存在し、容易ではない[6]. そこで、ダストアグ リゲイト同士が衝突する過程を数値シミュレーション によって調べることで、その構造進化や成長の可能性 を検討する、という研究が盛んに行われてきた、ダス トアグリゲイトは多数の粒子からなり、かつ衝突速度 も高々100 m/sのオーダーに過ぎない(とはいえダス トにとっては十分高速である)というわけで、その衝 突シミュレーションはまさに軟体球モデルを用いた離 散要素法すなわちDEMが得意とするところである. ダストアグリゲイトを構成する粒子は半径0.1 µmと 小さいため、それらの相互作用は分子間力等の付着力 (表面エネルギー)をも考慮した緻密なモデルが要求さ れる. この仕事のパイオニアであるDominik & Tielens [18]では、後述する JKR 理論[11, 37]に基づい て粒子間相互作用をモデル化し、それをシミュレーシ ョンに適用した.彼らの扱った粒子数は高々数十であ ることや2次元面内に限ったことから、信頼性のある 結果が得られたかどうか疑問であった(とはいえ衝突 エネルギーによる結果の分類則は本質を突くものであ った). また, Sirono [38]では同様の2次元シミュレー ションで粒子間焼結の影響を論じている. 最近では, 筆者らのグループをはじめいくつかの研究グループが, 粒子数を増やしアグリゲイト構造や衝突速度、粒子物 性などを振って、ダストアグリゲイト同士の衝突シミ ュレーションに精力的に取り組んでいる.以下では、



図6: 衝突シミュレーションによるBCCAアグリゲイトの形成と進化過程(衝突圧縮・破壊). Wada et al. [20, 22]より改変.

そのシミュレーション手法および得られた結果につい て解説する(遊星人論文[39,40]も参照されたい).

## 5. ダスト衝突シミュレーションの特徴

ダストアグリゲイトの衝突シミュレーション手法も, 個々の構成粒子の運動を接触粒子間の相互作用を考慮 しながら計算していくという点で離散要素法に分類さ れる(あまり離散要素法という単語は使われないが). 2節や3節で言及したDEMとの違いは,粒子間相互作 用モデルにある.ダストシミュレーションにおいても DEMと同様粒子は弾性体として扱うが,分子間力等 に起因する表面エネルギーすなわち付着力を考慮した モデルが採用されている.表面エネルギーを考慮した 弾性球の衝突接触問題は,Johnson,Kendall,& Roberts [37]が最初にモデル化したため,その著者の 頭文字をとってJKR理論とよばれる(以下で触れる表 式の詳細な導出は[11, 18, 19]などを参照されたい).

その要点は、弾性球の衝突接触モデルであるヘルツ理 論に表面エネルギー y による付着の効果を取り入れ たもので、接触2球の法線方向相互作用力*F<sub>JKR</sub>*は以下 のように与えられる.

$$F_{JKR} = \frac{4}{3}E^* \frac{a^3}{R} - \sqrt{16\pi\gamma E^* a^3}$$
(6)



図7: JKR理論における2球間重なり距離δ/δ<sub>0</sub>に対して2球間に 働く力F<sub>JKR</sub>/F<sub>c</sub>および接触面半径a/a<sub>0</sub>をプロットしたもの. 重なり距離が負の方向は粒子が離れていく方向を意味し, 力が正の値は反発力を,負の値は付着力を意味する.破線 部分は不安定解であり,付着粒子を引き離していった場合 には実線に沿って変化し,その左端で接触が不連続に断た れることになる.

ここで、aは接触面の半径である( $E^*$ 、およびRはヘ ルツ理論と同定義の量).右辺第一項は弾性反発力で ありヘルツ理論で得られる項に相当する。第二項が表 面エネルギーによる付着力による項である。接触2粒 子が平衡状態(反発力と付着力が釣り合った状態)にあ るとき(すなわち $F_{IKR}=0$ )、aは上の式から $a_0 = (9\pi\gamma)$   $R^2/E^*$ )<sup>1/3</sup>となる.なお、aと接触重なり距離 $\delta$ との関係は

$$\delta = \frac{a^2}{R} \left\{ 1 - \frac{2}{3} \left( \frac{a}{a_0} \right)^{-3/2} \right\}$$
(7)

で与えられる.(6) 式と(7) 式において $\gamma = 0$ とすると ヘルツ理論の反発力に帰着することが確かめられよう. さらに最大付着力 $F_c = 3\pi\gamma R$ および平衡状態時の重な り距離 $\delta_0 = a_0^2/(3R)$ を用いて規格化すると以下の関 係式が得られる.

$$\frac{F_{JKR}}{F_c} = 4\left\{ \left(\frac{a}{a_0}\right)^3 - \left(\frac{a}{a_0}\right)^{3/2} \right\}$$
(8)

$$\frac{\delta}{\delta_0} = 3\left(\frac{a}{a_0}\right)^2 - 2\left(\frac{a}{a_0}\right)^{1/2} \tag{9}$$

この2式から $F_{JKR}$ と $\delta$ の関係を図にしたものが図7で ある(反発力は正,付着力は負となる).図からわかる ように, $\delta < 0$ (つまり粒子の中心間距離が粒径の和以 上に離れている状態)であっても接触面が維持され接 触している.これは付着力が原因で接触前には存在し なかった「首(ネック)」が接触粒子間に生じ引き伸ば されている状態に対応している.引き伸ばされる最大 の距離 $\delta_c = 0.825 \delta_0$ は平衡状態の重なり距離 $\delta_0$ と同程 度であり,結構な距離を引き伸ばさなければ接触2球 を引き剥がすことができない.引き剥がすのに要する エネルギー  $E_{break}$ は、ポテンシャル計算から

$$E_{break} = 1.54 F_c \delta_c \tag{10}$$

と得られる.接触している2粒子に $E_{break}$ 以上のエネ ルギーが与えられるとその2粒子は剥がされ、 $E_{break}$ の 分だけエネルギーが散逸することになる.

接触2粒子の接線方向については、「滑り」、「転がり」 および「捩れ」という各モードにおいて、働く力とモ ーメントを弾性接触理論[11, 18]に基づいて与えられ る. このとき各モードの弾性限界変位を設定し、粒子 間でエネルギー散逸が生じるようにする[18, 19]. 滑 りや捩れを弾性限界変位以上に変形させるのに要する エネルギーはEbreakと同程度である一方、転がりを引 き起こすのに必要なエネルギーは小さくて済む(なぜ なら、滑りや捩れは接触面全体の変形が必要であるの に対して、転がりは接触面の端を引き剥がすだけで済 むため). 接触2粒子を互いの周りにころころと90度 も転がすのに必要なエネルギー Erall は

$$E_{roll} = 12\pi^2 \gamma R \xi_{crit} \tag{11}$$

で与えられるが、これでようやく $E_{breat}$ と同程度の大 きさとなる[19]. ここで $\xi_{crit}$ は転がり限界変位で原理 的には原子間距離程度(~2 Å)で良いはずであるが、 実験的に計測された値は32 Åとされ[41], モデルの修 正を要することが指摘されている[42]. これまで行わ れてきた数値シミュレーションでは多くの場合およそ 10 Å程度に設定している.

以上がダスト衝突シミュレーションにおいて採用さ れている IKR 理論に基づく粒子間相互作用の概略で ある、衝突シミュレーションにおいては、3節で述べ た過程と同様の過程(接触粒子の探索→粒子間相互作 用の計算→粒子の位置・速度の更新→時間の更新)を 経て進行する、ダストアグリゲイトを圧縮させたり破 壊したりするのに必要なエネルギーを議論する際には. ErollやEbreakが基準として用いられる. なお、ここで もDEMと同じく扱う粒子は「真球」としているが、現 実的には粒子の生成過程や結晶形状を考えたとき真球 とは限らない. 粒子形状が球から外れることは、例え ば転がり相互作用・エネルギー散逸過程などに影響が あると考えられる[例えば43].ただし、粒子間相互作 用をMD計算によって評価した研究[44]によれば、粒 子表面の原子数層スケールの凹凸は接触時につぶれて しまい粒子のマクロな振る舞いにはほとんど影響しな いことが示唆されている.したがって、粒子表面の原 子スケールのミクロな凹凸を除いては, 現実粒子が真 球でないことを考慮すべきであり、今後の課題である.

## 6. ダスト衝突シミュレーション

以下ではダスト衝突シミュレーション研究の動向と 計算例を紹介する.シミュレーションに基づいた最初 の研究は,先に述べたとおり1997年に出版された Dominik & Tielens [18]であったが,以後10年間シミ ュレーションによる研究に進展は見られなかった.一 方で実際にミクロンサイズの粒子を用いた実験的研究 が進み,シミュレーション及び解析によって得られた 理論との整合性が論じられてきた[例えば45].そうし てDominik & Tielensから10年後,筆者らのグループ によるWada et al. [19]によって本格的なシミュレー ション研究の幕が開けた.以後は,筆者らのグループ の他,オランダのグループ[23]やドイツの複数のグル ープ[26,27]もシミュレーション研究を行うようにな り,実験結果と相互比較しつつ成果を挙げつつある.

#### 6.1 ダストの圧縮

ダストの成長過程は、衝突速度の増大に伴って「変 形なし付着」「圧縮」、(「跳ね返り」)、「破壊」という 段階に分けられる(跳ね返りを括弧付で表記した理由 は後述).ダストは初期には円盤ガス中でのブラウン 運動程度の速度で付着していくが、衝突の運動エネル ギー Eimpが十分小さいために、構造が変形すること なく付着成長し、BCCAアグリゲイトを形成する.そ のBCCAアグリゲイト同士が衝突していくと質量の 増加に伴って運動エネルギーが増大し、やがて変形・ 圧縮される.

Wada et al. [19, 20]およびSuyama et al. [21, 25]で は、BCCAアグリゲイト同士の衝突シミュレーション を行うことで,変形圧縮の開始条件とその圧縮度合を 明らかにした、シミュレーションにおいては、原始惑 星系円盤において主要固体物質である氷あるいはシリ ケイトの粒子(半径0.1 µm)数千個からなるBCCAア グリゲイトを用意する.シリケイトと氷のヤング率は それぞれ56 GPa.7 GPa. 表面エネルギーは0.025 I/m<sup>2</sup>. 0.1 J/m<sup>2</sup>を採用する. これらの物性値は, 氷はシリケ イトに比べ柔らかく付着しやすいことを示しており (*E*break にして約30倍の差が生じる), 半径0.1 µm 粒子 同士の衝突付着限界速度は氷の場合約4 m/s, シリケ イトの場合約0.4 m/sとなる. そのようなBCCAアグ リゲイトを数cm/sから数10 m/sで衝突させることで、 無変形付着から最大変形圧縮までシミュレートするこ とが可能となる(図6). 結果として、変形圧縮の開始 条件は、Diminik & Tielens [18]でも指摘されている ように, *E*<sub>imp</sub> ≈(0.1-1) *E*<sub>roll</sub>で与えられることが示さ れた、これは、二つのアグリゲイトが衝突したとき、 その衝突地点の2粒子が互いに十分な角度を転がるこ とができて初めて顕著な変形が生じるということを意 味し, 妥当な結果である. ただし, その変形圧縮度合 は予想外であった. それは、BCCAアグリゲイトはフ ラクタル次元がおよそ2であるのに対し、変形圧縮さ れたアグリゲイトのフラクタル次元は2.5に留まる, というものである.フラクタル次元が3(通常の物体 はたいてい3である)であれば、そのバルク密度はア

グリゲイトのサイズによらず一定であるが、3を下回 るということは、バルク密度はアグリゲイトが大きく なるにつれどんどん低下することが意味する。言い換 えればダストアグリゲイトは衝突によって十分に圧縮 されず、そのまま成長すると軽くなるばかりでついに は「空気より軽い」ダストが形成されることになって しまう[21].そこまでの低密度化は、円盤ガスや自己 重力による圧縮によって回避されることが後に示され たが[46]、低密度で成長するダストという描像の提示 は、ダストの直接合体成長による微惑星形成というシ ナリオ[46, 47]を前進させる転機となった。

#### 6.2 ダストの成長と破壊

原始惑星系円盤中で変形圧縮されたダストは成長し、 乱流も相まってその衝突速度も数10 m/sに達する [21]. そのような高速衝突においてダストは完全に合 体することなく破壊によって破片が生じるようになる. このとき一部は破壊されながらも衝突前後で正味成長 できるかどうかが問題となる.この高速衝突によるダ ストの破壊・成長過程を明らかにすべく、筆者らのグ ループはBCCAより詰まった構造であるBallistic Particle-Cluster Aggregation(BPCA)構造のダストア グリゲイト同士の衝突シミュレーションを行ってきた [22, 27](図6右下参照). 例えば[28]では, 質量(粒子 数)の異なるアグリゲイト同士(最大粒子数512000)の 高速衝突シミュレーションを行った. その結果, 成長 限界速度ucolerit(=衝突後に残った最大アグリゲイトが 衝突前に比べて成長しているかどうかの境界となる速 度)はEbreakおよび1粒子の質量mを用いて次のように 表すことができ

$$u_{col,crit} = 20\sqrt{E_{break}/m} \tag{12}$$

アグリゲイトサイズに依らないことが明らかとなった (衝突方向のオフセット度合を示す衝突パラメータを 振って計算した結果を平均している). ucolerit は半径 0.1 µmの氷粒子からなるアグリゲイトの場合80 m/s にも達することになり,原始惑星系円盤中(最大衝突 速度は数10 m/s)で氷ダストならば十分成長が可能で あることが示唆された.しかしながら、シリケイト粒 子からなるアグリゲイトに適用すると,ucolerit は8 m/ sに過ぎず、シリケイトダストの成長は困難であるこ とを示す結果となった.シリケイトダストの成長を可 能にする機構を探ることが大きな課題として残されて いる.

#### 6.3 ダストの跳ね返り

ダストの付着成長問題において、些細な現象と捉え られがちではあるがしかし重要な問題としてダストの 「跳ね返り」がある、これは文字通りダストが衝突し ても跳ね返ってしまい付着できないというもので、 室 内衝突実験において報告され、ダストの成長が阻害さ れる可能性が指摘された[48]. これに対して筆者らの グループは、様々な充填率をもつアグリゲイト同士の 衝突シミュレーションを行い、跳ね返りが生じる条件 を明らかにした[24]. それによると、アグリゲイトの 充填率が30%以上(あるいは1粒子に接触している粒 子数が6以上)であれば跳ね返るというものである。 原始惑星系円盤中で成長するダストはこれまでのシミ ユレーション研究から示唆されるように低密度であり 充填率は10%以下であることが想定されるため、実 際には「跳ね返り」は生じないことになる(6.1の冒頭 で「跳ね返り」を括弧付きで記述したのは、円盤中で は跳ね返らないだろうという予想のためである). 「跳 ね返り」は生じないという結果は、別の衝突シミュレ ーション[49]によっても支持され、実験結果と相容れ ない状況となっているが、最近の実験研究において付 着が可能であることも次第に確認されつつある[50].

#### 6.4 イジェクタ量のスケーリング則

ダストが衝突によって破壊されると破片が大量に放 出される.この破片をイジェクタと定義すると,一回 の衝突によって生じるイジェクタ量は, 微惑星形成モ デルにとって重要なパラメータとなる[51].そこでイ ジェクタ量に注目してダスト衝突シミュレーションの 結果を整理すると,イジェクタ量は衝突するダストの 小さい方の運動量に比例することが明らかになった [28].すなわち,質量の異なるアグリゲイト同士の衝 突において,小さい方を弾丸ダスト,大きい方を標的 ダストと定義すると,イジェクタ量M<sub>ej</sub>は弾丸ダスト の質量M<sub>broj</sub>および衝突速度 u<sub>col</sub>を用いて

$$M_{ej} = M_{proj} u_{col} / u_{col,crit} \tag{13}$$

と表すことができた.イジェクタ量が弾丸の運動エネ ルギーではなく運動量で決定されることは、衝突クレ ーター形成過程においても運動量スケーリングとして 砂層への衝突などの場合に見られる現象である.アグ リゲイトのような多数の粒子が関わっている系では, 多数引き起こされる粒子間相互作用によって初期の運 動エネルギーは十分散逸し,結果として放出されるイ ジェクタ破片は運動量によって駆動される,と解釈さ れる.

#### 6.5 二粒子の衝突付着問題

ダスト衝突シミュレーションはIKR理論に基づい て接触粒子間相互作用を与えているが、実はIKR理 論に基づく2粒子の衝突付着限界速度は、実験で得ら れたそれと比較して1桁も小さいことが指摘されてい る[52]. このことは、JKR理論では見落とされている エネルギー散逸機構の存在を示唆するものである。理 論と実験結果との乖離を説明するために、最近では、 表面エネルギーの見直し[53,54]や粘弾性散逸項の導 入[55]が提案されている.ところが、粒子間相互作用 の法線成分に提案されている粘弾性散逸項を導入した ところ、アグリゲイト同士の衝突において成長限界速 度などに変化は見られなかったという報告がある[田 中秀和、私信]、このことの解釈としては、多数の粒 子の結合切断や滑りによる散逸が頻発する現象におい て、粘性散逸項が突出して寄与することはなかったた めであると考えられる(アグリゲイトの破壊において は粒子間結合を切断する必要があるため, Ebreak 依存 性は残る). もし導入した粘弾性散逸項が極端に大き な場合(例えば高速衝突でも粒子間の反発係数が0に なってしまうような場合)には、振る舞いは異なって くるだろう.しかしそのような極端な場合でない限り, 多数の粒子が相互作用することでエネルギーが十分に 散逸する系では、2粒子衝突にとって大きな散逸項で あってもさほど結果に影響を与えないのであろう、し たがって、これまで述べてきたシミュレーションでは 理論と実験の差を埋めるような2粒子間のエネルギー 散逸項を考慮していないが、得られた結果はダスト衝 突過程に対して相変わらず適用可能と考えられる.

## 7. まとめと展望

本論文では,離散要素法を用いた衝突の数値シミュ レーションの方法と具体的な計算例を紹介した.離散 要素法は多数の粒子からなる系におけるシミュレーシ ョンにおいて有効な手段であり、レゴリス層への衝突 クレーター形成過程や衝突貫入過程、またダストアグ リゲイトの衝突による構造進化や破壊過程など、その 応用範囲は幅広い.粒子間相互作用の検討や粒子形状 など課題も多いが、その分さらなる発展が期待される シミュレーション手法であると言えよう.

また、これまでの研究の成果からある共通の物理が 明らかになってきた. それは、粒子間相互作用におい てエネルギー散逸が生じる場合には、多数の粒子間衝 突が生じることで衝突エネルギーが十分に散逸するた めに、個々の粒子間での散逸量の効果が薄れ、結果と して衝突の運動量によって系の振る舞いが決定される, というものである。言い方を変えれば、粒子数が「十 分に」あれば、系全体の振る舞いは、粒子間相互作用 においてエネルギー散逸量を決めるパラメータにはほ とんど依存しない、ということである、多数の粒子が 関与する衝突現象は、エネルギー散逸量の影響を無視 してより簡単に理解し得るだろう、では、どれぐらい の粒子数があれば、エネルギーが十分散逸する系であ ると言えるだろうか?これを一般的に定義することは 困難であろうが、今後の粒子系衝突過程研究を行う際 の興味深い着眼点の一つであることを提起したい.

## 謝 辞

本稿執筆にあたり引用した筆者の研究の共同研究者 である松井孝典,千秋博紀,中村昭子,黒澤耕介,岡 本千里,山本哲生,田中秀和,陶山徹,木村宏,奥住 聡,小林浩,片岡章雅,Olivier S. Barnouinの各博士, および執筆機会を与えてくださった宇宙科学研究所の 長谷川直博士に感謝申し上げます.また,有益な査読 意見を頂きました城野信一博士にも感謝いたします.

# 参考文献

- [1] 黒澤耕介ほか, 2014, 遊星人 23, 103.
- [2] 玄田英典, 2014, 遊星人 24(本号).
- [3] 粉体工学会編, 1998, 粉体シミュレーション入門 (産業図書).
- [4] O'Sullivan, C.(鈴木輝一訳), 2014, 粒子個別要素 法(森北出版).

- [5] 遊星人特集「小惑星レゴリスの起源と進化」, 2000, 遊星人 9, 172.
- [6] 奥住聡, 2014, 遊星人 23, 371.
- [7] Cundall, P. A. and Strack, O. D. L., 1979, Géotechnique 29, 47.
- [8] Richardson, D. C., 1994, MNRAS 269, 493.
- [9] Richardson, D. C. et al., 2009, PSS 57, 183.
- [10] Leinhardt, Z. M. and Stewart, S. T., 2012, ApJ 745, 79.
- [11] Johnson, K. L., 1987, Contact Mechanics (Cambridge: Cambridge Univ. Press).
- [12] Asphaug, E. and Benz, W., 1994, Nature 370, 120.
- [13] Wada, K. et al., 2006, Icarus 180, 528.
- [14] Schwartz, S. R. et al., 2014, PSS 103, 174.
- [15] Wada, K. and Barnouin-Jha, O. S., 2006, Meteoritics and Planetary Science 41, 1551.
- [16] Takeda, T. and Ohtsuki, K., 2007, Icarus 189, 256.
- [17] Sánchez, P. and Scheeres, D. J., 2011, ApJ 727, 120.
- [18] Dominik, C. and Tielens, A. G. G. M., 1997, ApJ 480, 647.
- [19] Wada, K. et al., 2007, ApJ 661, 320.
- [20] Wada, K. et al., 2008, ApJ 677, 1296.
- [21] Suyama, T. et al., 2008, ApJ 684, 1310.
- [22] Wada, K. et al., 2009, ApJ 702, 1490.
- [23] Paszun, D. and Dominik, C., 2009, A&A 507, 1023.
- [24] Wada, K. et al., 2011, ApJ 737, 36.
- [25] Suyama, T. et al., 2012, ApJ 753, 115.
- [26] Seizinger et al., 2013, A&A 560, A45.
- [27] Ringl, C. et al., 2012, ApJ 752, 151.
- [28] Wada, K. et al., 2013, A&A 559, A62.
- [29] Yamamoto, S. et al., 2006, Icarus 183, 215.
- [30] Croft, S. K., 1980, Proc. Lunar Planet. Sci. Conf. 11th, 2347.
- [31] Wada, K. et al., 2003, Proc. 36th ISAS Lunar and Planetary Symposium, 53.
- [32] Nakamura, A. M. et al., 2013, Icarus 223, 222.
- [33] 渡邊誠一郎, はやぶさ2プロジェクトチーム,2013, 遊星人 22, 23.
- [34] 岡本千里ほか, 遊星人 24(本号).
- [35] Housen, K. R. and Holsapple, K. A., 2011, Icarus 211, 856.
- [36] Mukai, T. et al., 1992, A&A 262, 315.
- [37] Johnson, K. L. et al., 1971, Proc. R. Soc. London A

324, 301.

- [38] Sirono, S., 1999, A&A 347, 720.
- [39] 陶山徹ほか, 2008, 遊星人 17, 177.
- [40] 和田浩二, 2009, 遊星人 18, 216.
- [41] Heim, L.-O. et al., 1999, Phys. Rev. Lett. 83, 3328.
- [42] Krijt, S. et al., 2014, J. Phys. D: Appl. Phys. 47, 175302.
- [43] Poppe, T. et al., 2000, ApJ 533, 454.
- [44] Tanaka, H. et al., 2012, Prog. Theor. Phys. Suppl. 195, 101.
- [45] Blum, J. and Wurm, G., 2000, Icarus 143, 138.
- [46] Kataoka, A. et al., 2013, A&A 557, L4.
- [47] Okuzumi, S. et al., 2012, ApJ 752, 106.
- [48] Blum, J. and Wurm, G., 2008, ARA&A 46, 21.
- [49] Seizinger, A. and Kley, W., 2013, A&A 551, A65.
- [50] Kothe, S. et al., 2013, Icarus 225, 75.
- [51] Kobayashi, H. and Tanaka, H., 2010, Icarus 206, 735.
- [52] Poppe, T. et al., 2000, ApJ 533, 454.
- [53] Yamamoto, T. et al., 2014, ApJL 783, L36.
- [54] Kimura, H. et al., 2015, ApJ, in press.
- [55] Krijt, S. et al., 2013, J. Phys. D: Appl. Phys. 46, 435303.