

iSALE shock physics codeによる 数値衝突計算

黒澤 耕介^{1*}, 千秋 博紀¹, 和田 浩二¹, 三上 峻², 平田 成³,
鎌田 俊一^{2,4}, 石原 吉明⁵, 玄田 英典⁶, 中村 昭子⁷, 高田 淑子⁸

(要旨) iSALE shock physics codeは惑星科学者に対して公開されている汎用性の高い衝突計算コードである。我々は日本の衝突コミュニティでもiSALEを自由に扱い、研究を進められる環境を整備するために「iSALE users group in Japan」というグループを立ち上げた。本稿ではiSALEについての簡単な解説を行い、幾つかの計算例を示す。衝突現象は惑星科学の至るところで重要になってくる素過程である。自らの手で数値衝突計算を行えるようになれば、研究の幅が大きく広がることが期待できる。本稿がiSALEでどんなことができるのか想像するための一助となれば幸いである。

1. はじめに-iSALE users group in Japan

近年「iSALE」という計算コードの名前を耳にする機会が増えてきたのではないだろうか？ iSALEはImpact-SALE (Simplified Arbitrary Lagrangian Eulerian)の略で、数値流体計算コードの一つであるSALE code[1]を元にして天体衝突現象を取り扱える様に、欧米の惑星科学者が改良、整備、提供しているShock physics codeの一つである[2-4]。主な開発メンバー(Core developers)はGareth Collins, Kai Wünnemann, Boris Ivanov, H. Jay Melosh, Dirk Elbeshausenの5人である。すでに多くの欧米の研究者が使用しており、50報を超える研究成果が査読付き論文として出版されている。iSALEの特徴は次章で詳述するが、CTHやAUTODYNといった他の衝突計算コードとの大きな違いはユーザの国籍を問わず、惑星科学者に対して無償で公開されているという点である。初心者にはま

ず二次元計算のみが可能なiSALE-2Dが提供される。これに習熟してコードの開発に協力するという意思表示をすると、三次元の計算を行うことができるiSALE-3Dの使用が許可される[5]。我々は日本の惑星科学/衝突研究コミュニティでもiSALEを自由に使えるユーザを増やすため、惑星科学会内のグループとして「iSALE users group in Japan」を立ち上げ、普及活動を行なっている。メーリングリストと情報を集約したwiki[6]の運用を開始している他、2月には勉強会も開催した(本号に掲載予定の報告記事[7]も参照)。本稿では計算コードの概要を解説し、読者の皆様にiSALE shock physics codeを紹介する。

2. iSALEとは？

本稿ではiSALE-2Dについてのみ解説する。現在のところ筆者らもiSALE-3Dのアカウントは手にしていない。本章ではiSALEの概略を以下のように項目分けして解説する。iSALEの1タイムステップ内での数値解法を2.1、状態方程式を2.2、物質モデルを2.3、計算条件設定に関して2.4、計算結果の描画に関して2.5でそれぞれ解説する。我々のwikiページ[6]ではさらに詳しい解説資料を公開している。そちらも合わせてご覧頂きたい。

1. 千葉工業大学 惑星探査研究センター
2. 北海道大学 大学院理学院宇宙物理学専攻
3. 会津大学 コンピュータ理工学部
4. Department of Earth and Planetary Sciences, University of California Santa Cruz
5. 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所
6. 東京工業大学 地球生命研究所
7. 神戸大学 大学院理学研究科
8. 宮城教育大学 理科教育講座
kosuke.kurosawa@perc.it-chiba.ac.jp

2.1 数値解法

iSALE-2Dでは数値解法としてオイラー法のEuler mode, ラグランジュ法のLagrange mode, 両者を合わせたALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) modeのいずれかを選択することができる。これはiSALEの元になったSALE code[1]の最大の特徴であるが、現在のiSALEはもっとも安定に計算を行うことができるオイラー法に焦点を絞って整備が進んでいるようである。実際にiSALE-3Dではオイラー法のみが実装されている[5]。以降ではEuler modeについて解説する。Euler modeでは計算領域を格子に分割し、隣合った格子間の圧力勾配を計算し、流体方程式に従ってセル内の物質を移流させる。iSALEのEuler modeでは、1ステップだけ格子そのものを動かし、偏差応力、圧力勾配、人工粘性を計算し、移流後に格子を切り直すという処理を行なっている(セミラグランジュ法)。衝撃波通過に伴う不可逆加熱を取り扱い、かつ物理量の不連続面で起こる数値不安定を抑制するためにvon Neumann-Richtmyer型の人工粘性を採用している。人工粘性の強さは2つの入力パラメータで表され、ユーザが自分で変更することも可能である。

2.2 状態方程式

流体方程式は密度、エネルギーの2つのスカラー量と速度、圧力(勾配)の2つのベクトル量からなり、質量、運動量、エネルギーの保存式のみでは方程式系を解くことができない。そこで登場するのが状態方程式(EOS)である。EOSは一言で言えば圧力を密度とエネルギー(もしくは温度)の関数として表現したものであり、物質によって異なる。iSALEではEOS名を指定することで、解析解で求められるTillotson EOSとテーブル形式のANEOSのどちらかを選択することができる。どちらも衝突による相変化を表現できる特徴を持ち、数値衝突計算では頻繁に用いられている。iSALEパッケージの中には火成岩、堆積岩、水氷、金属鉄、プラスチックなど様々な物質に対するEOSの入力パラメータが用意されており、物質名を指定するだけで、それぞれの状態方程式を読み込むことができる。ANEOSは分子気体を取り扱うことができるように近年改良されたもの(M-ANEOSと呼ばれる[10])が整備されている。iSALEを用いると、これまで日本のコ

ミュニティで扱えるものがなかったANEOSを用いた数値衝突計算を行うことができることは特筆すべき点であろう。

2.3 物質モデル

iSALEがHydrocodeではなくShock physics codeと呼ばれているのは、物質の弾塑性体応答も同時に解くことができるからである。物質強度は塑性変形を起こす条件(降伏応力)として計算に取り込まれる。岩石物質に対しては応力を受けてダメージが蓄積し、物質強度が弱くなっていくような破壊の物理を反映したモデル[3]が、金属に対しては物質強度が応力及び歪速度に依存するという金属の物性を反映したモデル[11]が実装されている。物質モデルを計算に入れる場合は、2.2で解説したEOSから求まる圧力勾配とレオロジーモデルを使って、偏差応力テンソルを求め、保存則の方程式系を解き物質を移流させる。ダメージに依存した強度の低下だけでなく、融点に近づく物質が流動化して強度を失うことを表現したThermal softening model[12]も実装されている。温度-圧力平面上の熔融曲線は多項式の形(Simon equation)で与えることができる。それぞれの物質の入力パラメータは自由に変更することができ、そのパラメータが結果に与える影響を調べるといったことも簡単に行うことができる。

ミクロな空隙を持った物質を扱う際には ϵ - a compaction model[4]を使用する。このモデルは実験で決定可能な入力パラメータのみで微小空隙の圧密を表現することができる。また空隙がない物質に対する状態方程式を微小空隙を持つ同一物質にそのまま適用可能であるため汎用性が高い。

大規模クレータの崩壊・修正過程を扱うためにAcoustic fluidization modelが実装されている。このモデルではある閾値を超える応力を受けた際に物質の強度が下がり、流動化することを表現したモデルとなっている[例えば13]。これは衝突に伴う衝撃波伝播によって衝突点の遠方まで弾性波が励起され、その“音響”が物質を流動化させ、クレータ崩壊に寄与するのではないか?という仮説に基づいたモデルである。残念ながら入力パラメータはフリーパラメータとなっており、実験的に決定できるような値ではないものの、パラメータの設定により複雑クレータの特徴である小さい深さ/直径比を再現することが可能である[13]。

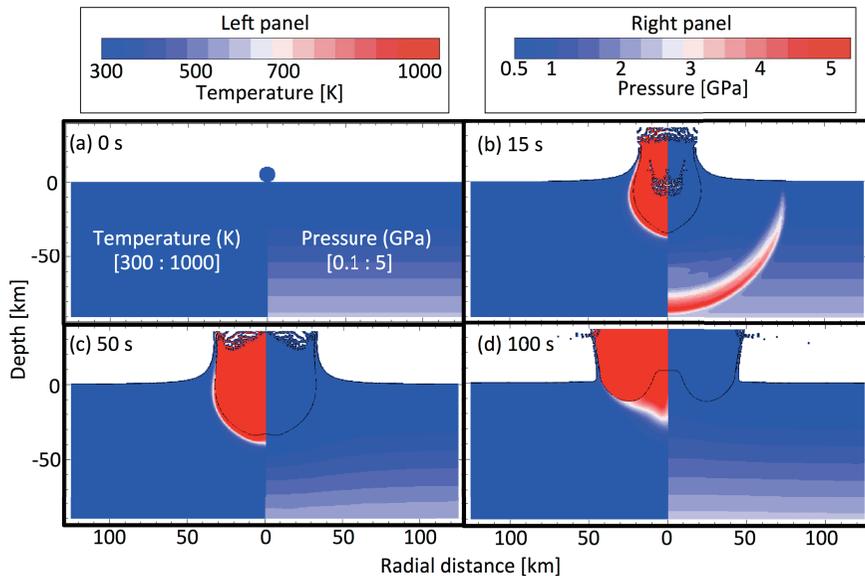


図1：直径10 kmの天体が20 km/sで衝突した場合の時系列。衝突天体と地面の状態方程式には共に花崗岩のANEOSを用いた。(a) 静水圧平衡の初期圧力分布が自動的に計算され、与えられる。ここでは地球と同じ重力加速度を与えている。(b) 衝撃波が球殻状に伝播して、衝突点近傍は非常に強く加熱されている。(c) クレータの深さ方向の成長が停止。クレータ内部は高温の衝突蒸気雲が満たしている。(d) リバウンドによってクレータの底が盛り上がっている。

2.4 計算条件設定

本節では実際にiSALEで計算を行う際にユーザが設定する計算条件について解説する。iSALEでは3種類の異なる物質を同時に扱うことができる。この場合は3種類の異なる物質に任意の名前をつけ、それぞれに状態方程式、物質モデルを割り振る。

ユーザが変更可能な計算条件の中で代表的なものを列挙すると、計算座標系、計算格子の配置、タイムステップ、計算終了時間、境界条件、人工粘性の強さ、出力する物理量、重力の向き、大きさ、プロジェクトルの数、形状、層状ターゲットの層数、プロジェクトル及びターゲット内の温度分布、トレーサ粒子の配置などがある。

計算座標系はデカルト座標系と円柱座標系を選ぶことができる。iSALE-2Dでも軸対称性が担保されている場合は、円柱座標系を用いることで衝突実験結果と計算結果を直接比較することができる。衝突計算の難しいところは、周期境界条件を用いることができず、計算境界からの反射波の影響を受けやすい点である。反射波の影響を排除するためには見たい領域(例えばクレータ)に対して過剰に広い計算領域をとる必要が

あり、計算コストが高くなってしまふ。iSALEでは計算コストを軽減するために“High-resolution zone”と“Extension zone”を設定することができる。前者は均等に格子を分割するが、後者は境界に向かって格子サイズを等比数列で大きくしていく様に設定することができる。“Extension zone”では衝撃波が人工的になまってしまうことになるが、少ない格子数で広い計算領域を確保することで、見たい領域に反射波が干渉してしまうことを避けることができる。衝撃圧縮を受けた物質の音速は状態方程式から自動的に計算され、それに合わせてCourant-Friedrichs-Lewy条件(CFL条件、 $C_s dt/dx < 1$ 、ここで C_s , dt , dx はそれぞれ音速、タイムステップ、格子サイズを表す)を満たすようにタイムステップが自動的に更新される。もちろんユーザがそれ以下のタイムステップの値を入力することも可能である。

重力の向きは一軸方向と自己重力を選択することができる。Projectile及びTarget内の初期圧力分布は与えた重力場に対して静水圧平衡を満たすように自動的に計算される。標的中の温度分布はConstant, Conductive profile, Conductive/convective profileの3種類から選択できる。iSALEでは各ステップで熱伝

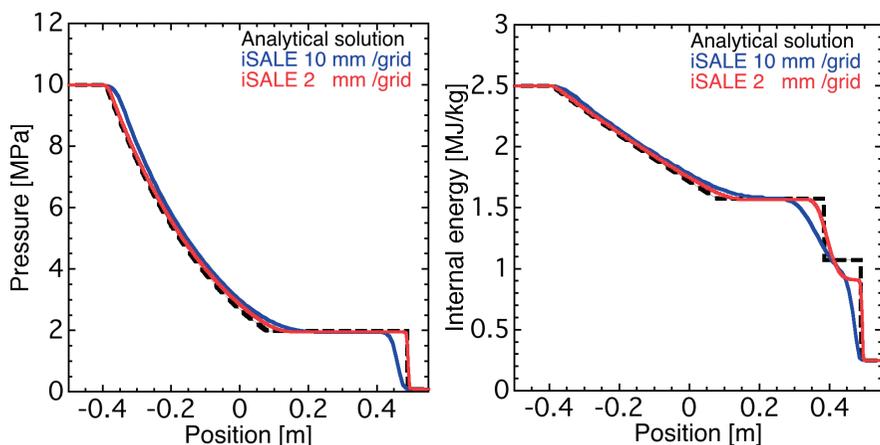


図2: iSALE計算と一次元衝撃波管問題の解析解との比較. iSALEでは空間解像度の異なる2例を示す. 解析解は点線で示した. 状態方程式には理想気体のEOSを用いた.

導や対流を解いているわけではないが、表面温度、表面付近の地温勾配、惑星半径、地殻厚を指定するとそれに即した初期温度分布が設定される。2.1で述べたようにiSALEではEuler modeが最もよく整備されているが、必要に応じてラグランジアントレーサ粒子を挿入し、物質の移動を追跡し、温度・圧力・空隙率の時間発展を記録することができる。

2.5 計算結果の描画

iSALEのパッケージの中には“iSALE plot”と“VIMoD”という描画ソフトが含まれており、任意のタイムステップの物理量を画像データとして出力することが可能である。数値計算初心者でも容易に解析を行うことができるように整備されている点もiSALEが爆発的に広まった一因であろう。図1にiSALE plotによる出力の一例を示す。直径10 kmの天体が20 km/sで垂直衝突した場合を円柱座標系で計算した。このように同時に2つの物理量(この図では左が温度、右が圧力)を同時に表示することができる。衝撃波伝播による衝撃加熱、衝突蒸気雲の発生/クレータの成長、地面のリバウンドなどが起こっていることが見て取れる。図1のようなコンターマップでは定量的な解析は困難であるが、任意の平面で切った物理量をテキストデータとして出力することも可能である。またiSALE plotを使うと任意のトレーサ粒子に対して時刻、位置、設定した2種類の物理量をテキストデータとして出力することができる¹。例えば個々の粒子が

温度-圧力平面上でどんな経路をたどっているかを調べるといった使い方も可能である。

3. 計算例

本章ではこれまでに我々が行った計算例をいくつか紹介する。計算結果の詳しい解析は本稿の目的を超えているのでここでは行わないが、比較的簡単に多種多様な計算を行うことができることを示す。なお、Core developersによる豊富なサンプルプログラムとその計算出力も公開されている[14]。そちらも合わせてご覧頂きたい。実際に計算条件を設定する際には、行いたい計算に最も近いサンプルプログラムをベースにして変更を加えるという方法がよいようである。

3.1 妥当性検証

図2に一次元衝撃波管問題の解析解とiSALEの計算結果の比較を示す。円柱座標系で動径方向に一樣な高圧気体と低圧気体を配置し、一次的に衝撃波が伝播するように計算条件を設定した。人工粘性の入力パラメータはCore developersによる推奨値をそのまま使用した。エネルギー分布は衝撃波面前後で多少のズレがみられるが、圧力分布は非常に良く再現していることがわかる。このエネルギー分布のズレはどんな数値解

1. iSALE plotは描画ソフトとして利用されるだけでなく、出力ファイルから特定のデータを抽出するためのフィルタプログラムとしても利用される。

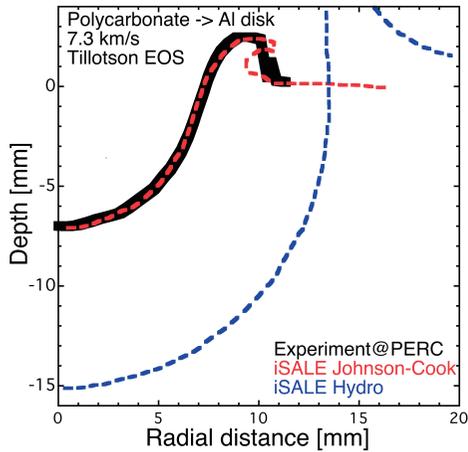


図3：千葉工大惑星探査研で行った衝突実験結果との比較。クレータ形成後のプロファイルと比較した。iSALE計算結果としてはアルミニウムの強度モデルをいれた場合と完全流体として扱った場合の2例を示す。iSALE計算では強度入りモデルでクレータの成長がほぼ止まった衝突後20 μ s後のプロファイルをプロットしている。

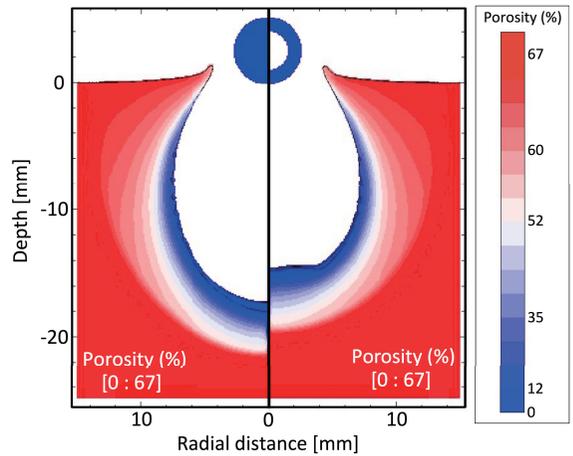


図4：高空隙率標的への衝突計算例。衝突体形状の影響を調べた。左が完全球、右が球殻。

法であっても多かれ少なかれ発生するものであり、iSALEでは衝撃波面の前後で $\sim 20\%$ ほどのアンダershootが生じ得るということを念頭において計算を行う必要があるということである。また空間解像度によらず、衝撃波面を10セル(半値幅は3セル程度)ほどで表現していることがわかる。この結果は例えば衝突後の衝撃圧力分布を見積もりたい場合、衝突天体サイズを 10×10 以上の格子で分割しなければいけないことを示している。

続いて千葉工業大学惑星探査研究センターで行った衝突実験との比較を試みた。直径4.8 mmのポリカーボネイト球を7.3 km/sで厚さ2 cmのアルミ板に衝突させ、生成したクレータのプロファイルを計測した。この場合は視線軸に対して現象が対称的であることが期待できるので2.4で述べた通り、実験結果とiSALE-2Dの計算結果を直接的に比較できる。状態方程式にはポリカーボネイト及びアルミニウムに対応するTillotson EOSを用いた。アルミ板の強度モデルには金属の強度を表現したJohnson-Cook model[11]を使用した。比較のためにアルミ板が完全流体として振る舞う場合(強度なし)の計算も実施した。ポリカーボネイト弾は全体がHugoniot elastic limitを超える衝撃圧を受け、衝突後の振る舞いは物質強度によらないと期待できるため、完全流体であると仮定した。図3にクレー

タプロファイルの比較結果を示す。アルミ板を完全流体であると仮定した場合はクレータの大きさを大幅に過大評価してしまうが、アルミニウムの物質モデルを用いると実験結果を非常に良く再現できることがわかる。Core developersが行った検証ではiSALEでクレータの最終形状だけでなく、その直径及び深さの時間進化まで含めて実験結果をよく再現できることが示されている[15]。これを持って実際の天体上の複雑クレータの形成過程を完全に再現できると言える訳ではないということには注意しなければならないが、実験結果と計算結果の一致は、iSALEが衝突による衝撃波伝播、物質の流動化、希薄波との干渉による掘削流の形成といった素過程を正しく取り扱えているということの傍証となるだろう。

3.2 高空隙率標的への中空弾丸衝突

近年、小惑星表面に弾丸を撃ち込み、その深部物質を露出させる能動的探査が計画されるようになってきた。計画段階でどんな規模の衝突であれば小惑星の深部をどのくらい掘削できるのか調べる必要があるのだが、その予測には2つの大きな困難がある。まず第一に小惑星の表面状態がわからないことである。もし仮に空隙率が数10%に及ぶような表面であったなら弾丸が小惑星の奥深く貫入してしまい、物質の放出が起

こらず目的を達成できないかもしれない。2つ目は、弾丸が完全な球形状とは限らないことである。実際に Deep Impact[16]やSMART-1[17]といった衝突型探査では中空弾丸が用いられており、現在計画中のはやぶさ2のSmall Carry-on Impactor(SCI)は半球殻形状[18]である。このような不規則形状弾丸を用いた際に駆動される掘削流がどのような流線を描くのかは十分に理解されていない。このような状況を踏まえて本節ではiSALEで高空隙率標的への中空弾丸が衝突する計算を行えることを示す。2.3で述べた通りiSALEで

は空隙を取り扱える $\epsilon - a$ compaction modelが実装されており、無限小空隙が掘削過程に与える影響を調べることができる。また円(楕円も含む)や長方形を組み合わせて描けるような図形であれば、衝突体形状を簡単に変更することができる。ここでは直径5 mm、厚みが1 mmの花崗岩球殻が、7 km/sで空隙率67%の花崗岩に衝突した場合を計算した。比較のために自身のつまった花崗岩弾丸が同じ高空隙花崗岩に衝突した場合も計算した。図4に比較計算結果を示す。同じ時刻でのクレータ断面図である。中空弾丸の場合はク

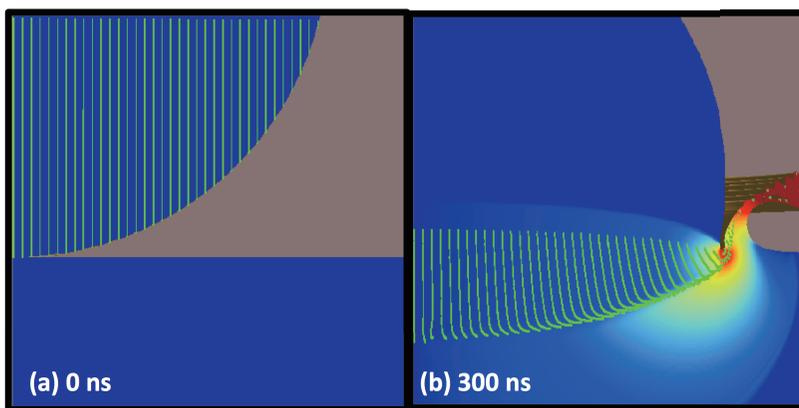


図5：VIMoDによる弾丸中流線の可視化例。弾丸のサイズは直径4.8 mmとして計算した。弾丸と標的の境界に沿って弾丸が変形していることがわかる。図中の色の違いは動径方向の粒子速度を示している。Jetが衝突速度よりも速く放出されている(オンライン版では赤色)。VIMoDは軸の値を描画してくれなかったり、複数のバグがあったりと不便なところも多いのだが、計算結果を直感的にいじって観察できるところがiSALE plotよりも優れている。

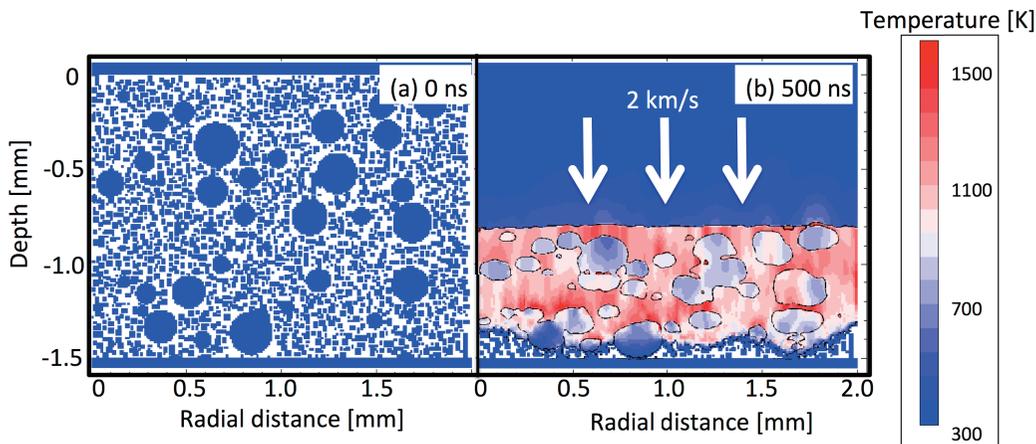


図6：“Mesoscale”計算例。コンドリュール様の球粒とマトリックス様の組織をランダムに配置し、バルク空隙率を50%とした。計算領域上部からはドライバプレートが2 km/sで流入してくるように設定している。ここではドライバプレート、コンドリュール、マトリックスの全ての物質の状態方程式に石英のANEOSを用いた。3種類の物質に同一のEOSを用いているにも関わらず著しい温度の不均質が生じていることがわかる。(b)の図中の黒線は物質境界線である。

レータが浅くなっているが、動径方向はあまり変化がないようである。今後盛んに行われるようになるであろう中空弾丸の衝突実験と合わせて、このような計算を行っておくと衝突型探査の結果の解釈を行う際に有用であると思われる。なお示した計算例は球殻の厚みを10セルとしているために球殻が受ける衝撃圧分布は正しくないのかもしれないことに注意しておく。空間解像度を変化させた計算を行なって結果の収束性を調べる必要がある。計算を走らせれば答えが出てくるが、計算設定が妥当かどうかには常に気を配る必要がある。

3.3 弾丸変形の可視化

本節では衝突する弾丸の変形過程を詳細に調べるための計算例を示す。このような計算によって、球弾丸衝突時のImpact jettingの数値解析が可能になってきている[19]。図5はポリカーボネイト球をアルミ板に垂直衝突させた計算のVIMoDの出力である。ここでは先行研究[19]に習って弾丸を1600×1600セルという高解像度格子で分割して計算し、弾丸中物質の流線をトレーサ粒子で可視化した。弾丸と標的の境界に沿って弾丸が変形し、最終的にいわゆる“Impact jetting”が生成していることがわかる。衝突実験で詳細に観察できればよいのだが、実際にはカメラの時間分解能が足りない、弾丸の表面しか観察できない、強烈な熱輻射(連続光のためにフィルタでカットすることも難しい)によって見たい領域が見えないなどの様々な障害があつて難しい。このようにiSALE計算でトレーサ粒子をうまく配置することで流線を可視化して、何が起きているのかを理解すると、実験結果を解釈する際の助けとなるだろう。

3.4 不均質標的への衝突

最後にiSALEが隕石の組織分析、あるいははやぶさ2で回収予定の試料の微細分析の解釈にも役立つことを示す。iSALEには“Mesoscale modeling”を簡易的に行うことができる機能が実装されており[20]、マクロ空隙を含んだ不均質標的に一次的に衝撃波が伝播するような状況を計算することができる。図6に結果の一例を示す。コンドリュールを模した大きめの球粒と、マトリックスを模した四角い組織をランダムに配置し、バルク空隙率が50%になるようにしてある。

計算領域の上部から一枚岩が2 km/sで衝突してくる設定になっている。この計算例では一枚岩同士が2 km/sで衝突した場合の衝撃温度は430 K程度であるが、空隙の効果で全体的にそれより高い温度に達している。そして1500 Kにも達する加熱を受ける領域もあることがわかる。隕石の薄片分析から母天体体の衝突履歴を解釈する際の助けになるだろう。

4. まとめ

ここまで紹介してきたようにiSALEは非常にユーザフレンドリな設計がなされており、初心者でも比較的簡便に望み通りの計算を走らせ、解析を行うことができる。またCore developersは現在でもiSALEの改良、整備を続けている。近年の珪酸塩に対するレーザーショック実験の結果は最新のANEOSに修正を迫るものである[21, 22]が、そういった最新の知見を取り入れた改良も進んでいるようである[23]。iSALEでは境界条件や空間解像度の計算設定に問題がなければ、計算に入れている物理過程のみを反映した結果が返ってくる。衝突実験、惑星探査、物質分析の結果を解釈するときだけでなく、どんな計測を行うと成果を最大限にできるか計画を立案する際にも役立つであろう。ご興味を持たれてiSALEを使い始めたいという方は「iSALE users group in Japan」にご参加頂ければ幸いです(連絡先: isale-workshop@perc.it-chiba.ac.jp)。

謝辞

iSALEの開発者であるGareth Collins, Kai Wünnemann, Boris Ivanov, H. Jay Melosh, Dirk Elbeshausenの各氏とクレータのプロファイル計測を行なって頂いた株式会社キーエンスの大木重美氏に感謝致します。

参考文献

- [1] Amsden, A. et al., 1980, Los Alamos National Laboratories Report, LA-8095:101p.
- [2] Ivanov, B. A. et al., 1997, International Journal of Impact Engineering 20, 411.

- [3] Collins, G. et al., 2004, MAPS 39, 217.
- [4] Wünnemann, K. et al., 2006, Icarus 180, 514.
- [5] <http://www.isale-code.de/projects/isale/wiki/ISALE>
- [6] <https://www.wakusei.jp/~impact/wiki/iSALE/>
- [7] 常昱, 2014, 遊星人 23 (本号).
- [8] Tillotson, J. H., 1962, Technical Report GA-3216, General Atomic Report.
- [9] Thompson, S. and Lauson, H., 1972, Sandia National Laboratory Report, SC-RR-71 0714:113p.
- [10] Melosh, H. J., 2007, MAPS 42, 2079.
- [11] Johnson, G. R. and Cook, W. H., 1983, Proc. 7th International Symposium on Ballistics.
- [12] Ohnaka, M., 1995, GRL 22, 25.
- [13] Wünnemann, K. and Ivanov, B. A., 2003, P&SS 51, 831.
- [14] http://www.isale-code.de/projects/isale/wiki/Example_problems
- [15] Pierazzo, E. et al., 2008, MAPS 43, 1917.
- [16] A'Hearn, M. F. et al., 2005, Science 310, 258.
- [17] Foing, B. H. et al., 2001, Earth, Moon, Planets 85/86, 523.
- [18] Wada, K. et al., 2014, 45th LPSC, 1768.
- [19] Johnson, B. C. et al., 2014, Icarus, in press.
- [20] Davison, T. et al., 2014, 45th LPSC, 2718.
- [21] Kurosawa, K. et al., 2012, JGR 117, E04007.
- [22] Kraus, R. G. et al., 2012, JGR 117, E09009.
- [23] Collins, G. and Melosh, H. J., 2014, 45th LPSC, 2664.