第4回iSALE講習会 於 国立天文台

【時間割】

- 2019年 7月 30日(火)

  13:30 - 14:00 iSALEの解説
  14:00 - 14:30 iSALEを使った計算紹介
  14:45 - 15:45 計算サーバへのログイン / iSALE2Dの実行*
  16:00 - 17:00 iSALE2Dの初期設定ファイルの編集の仕方*

- 2019年 7月 31日(水)

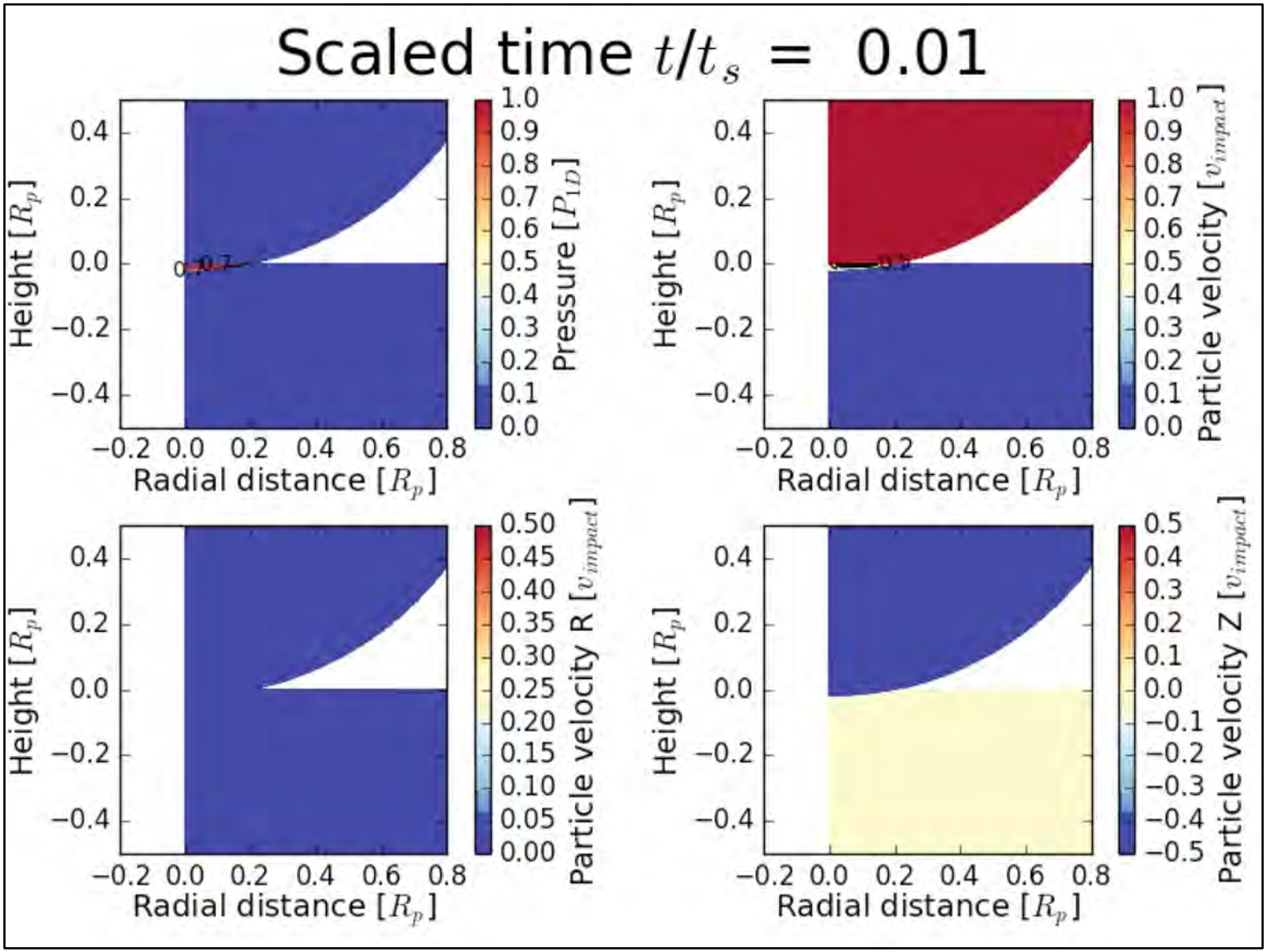
  10:00 - 12:00 初級課題 (pySALEPlotによる描画方法も含む)*
  14:00 - 15:30 初級課題 続き*
  15:30 - 16:00 計算サーバ見学
  16:00 - 17:00 pySALEPlotの使い方
  18:00 – 20:00(?) 懇親会 @ 吉祥寺あたり(参加希望の方は黒澤まで!)

- 2019年 8月 1日(木)

  10:00 - 11:30 中級課題
  11:30 - 15:00 残りの初級・中級課題 or 自分の課題
  15:00 - 15:30 参加者の成果発表
  15:30 - 16:00 計算サーバへの申請方法等

*慣れている方は自習時間. 手の空いている講師に自由にご質問ください.

iSALE Shock physics code概要



黒澤 耕介
千葉工業大学
PERC

iSALE shock physics codeとは？

iSALE: Impact-SALE (Simplified Arbitrary Lagrangian Eulerian)

歴史: SALE codeをもとに惑星科学に特化した仕様に改良.
>100報の査読付論文が出版されている.

特徴: 衝撃波を補足できる流体コード + 弾塑性体応答
(セミ・ラグランジュ法)
-> "Hydro code"でなく"Shock physics code"

- 状態方程式: Tillotson EOS or ANEOS
- 物質モデル: 降伏応力, 空隙, 音響流動, 熱弱化

操作: 2つの入力ファイルに初期条件を入力するのみ.
->初心者でも簡便に望み通りの計算を実行可能.

解析&描画: ”pySALEPlot" が同梱されている.

最重要利点: 現在も改良され続けている. [e.g., Collins & Melosh14]

iSALE-Dellenの特徴

☆最新のマニュアル [Collins+16, figshare]

☆解析&描画ツール pySALEPlotの実装

☆新しい物質モデルの導入

-Dilatancy [Collins, 2014, JGR]

-粘弾性レオロジー [Elbeshausen & Melosh18]

☆EOSモデルの改良

-ANEOS tableの作成(Entropyも出力可)

-固体-固体, 固体-液体相転移の導入

-Input file例の追加(forsterite, duniteなど)

-SESAME tableの読み込み機能

manual_iSALE_Dellen.pdf (1.12 MB) 1 / 100

Download (1.12 MB) Share Cite Embed + Collect (you need to log in first)

iSALE-Dellen manual

Version 2 09.07.2016, 00:03 by Gareth S. Collins, Dirk Elbeshausen, Thomas M. Davison, Kai Wünnemann, Boris Ivanov, H. Jay Melosh

Manual for the Dellen release of the iSALE shock physics code:

A multi-material, multi-rheology shock physics code for simulating impact phenomena in two and three dimensions.

REFERENCES

- http://isale-code.de/redmine/projects/isale/wiki/ISALE

FUNDING

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) and Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren (HGF), Germany, and the Natural Environment Research Council (NERC) and Science and Technology Facilities Council (STFC), UK

iSALE-Dellenの特徴

☆最新のマニュアル [Collins+16, figshare]

☆解析&描画ツール pySALEPlotの実装

☆新しい物質モデルの導入

-Dilatancy [Collins, 2014, JGR]

-粘弾性レオロジー [Elbeshausen & Melosh18]

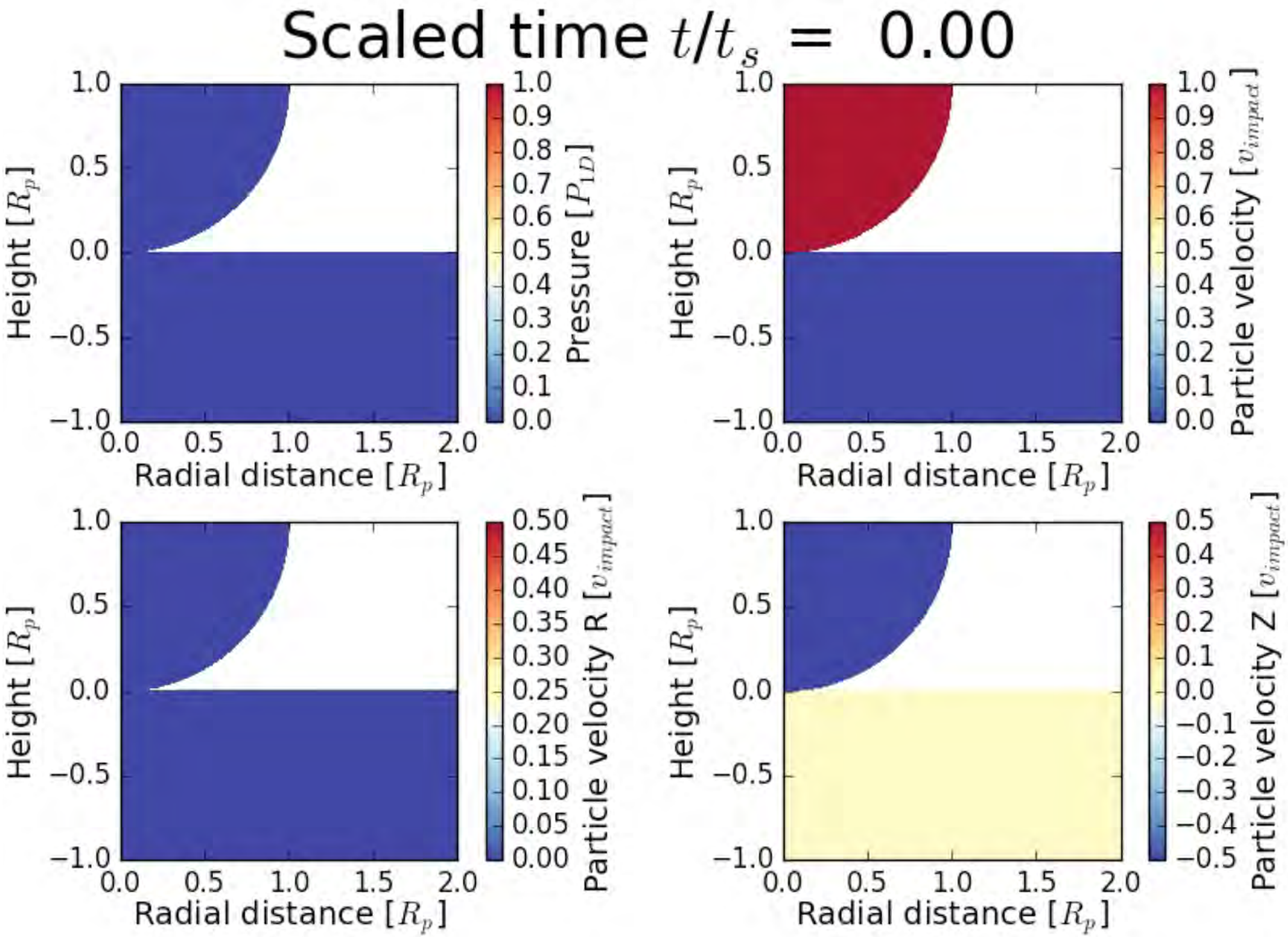
☆EOSモデルの改良

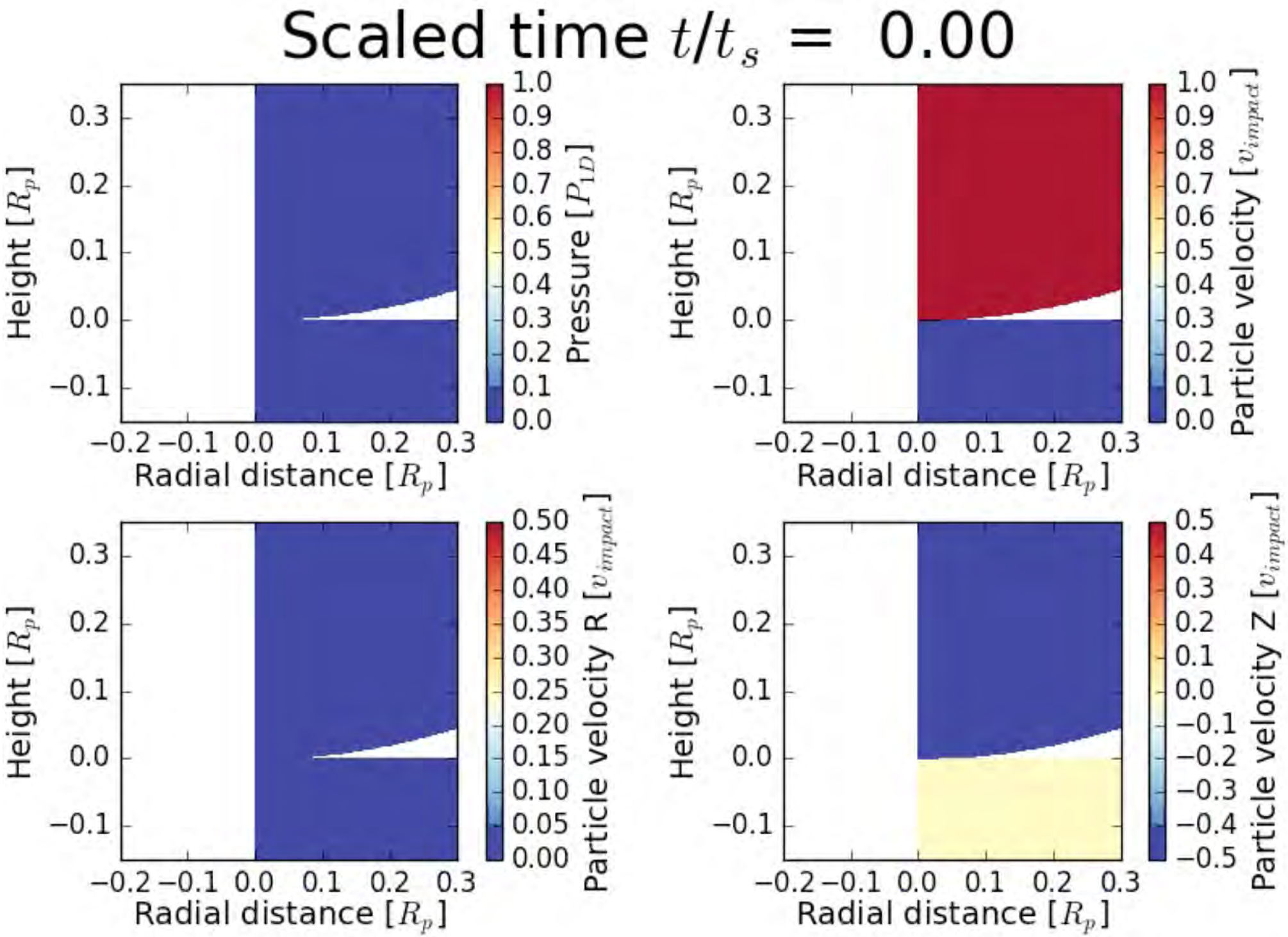
-ANEOS tableの作成(Entropyも出力可)

-固体-固体, 固体-液体相転移の導入

-Input file例の追加(forsterite, duniteなど)

-SESAME tableの読み込み機能


Scaled time t/t_s = 0.00
Height [R_p]
Radial distance [R_p]
Pressure [P_{1D}]
Particle velocity [v_{impact}]
Particle velocity R [v_{impact}]
Particle velocity Z [v_{impact}]


Scaled time t/t_s = 0.00
Height [R_p]
Radial distance [R_p]
Pressure [P_{1D}]
Particle velocity [v_{impact}]
Particle velocity R [v_{impact}]
Particle velocity Z [v_{impact}]

iSALE-Dellenの特徴

☆最新のマニュアル [Collins+16, figshare]

☆解析&描画ツール pySALEPlotの実装

☆新しい物質モデルの導入

-Dilatancy [Collins, 2014, JGR]

-粘弾性レオロジー [Elbeshausen & Melosh18]

☆EOSモデルの改良

-ANEOS tableの作成(Entropyも出力可)

-固体-固体, 固体-液体相転移の導入

-Input file例の追加(forsterite, duniteなど)

-SESAME tableの読み込み機能

iSALE活用術

思いついたことをすぐに計算できる.

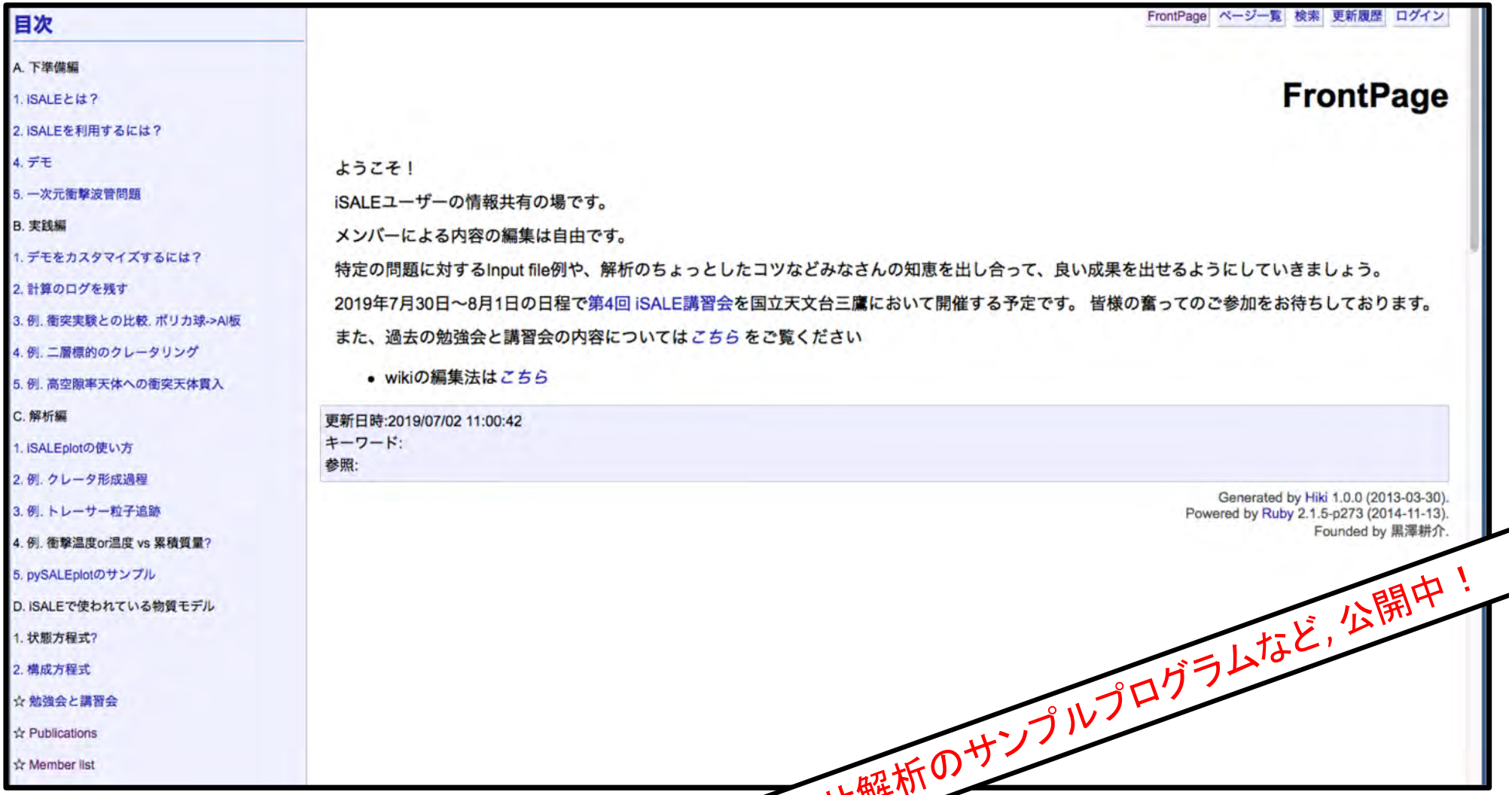
- 月の表裏の地温勾配の影響 [Mijikovic+, 2013, *Science*]
- 月のマスコンの起源 [Melosh+, 2013, *Science*]
- Vestaの核の物性の影響 [Bowling+, 2013, *JGR*]
- 微惑星の衝突熱埋め込み [Davison+, 2010, *Icarus*; 2012, *GCA*]
- クレータ回収試料の微細分析の解釈 [Davison+, 2013, *GRL*]
- 衝突凝縮物生成過程の素過程 [Johnson & Melosh, 2013, *Icarus*]
- Impact jettingの素過程 [Johnson+, 2014, *Icarus*]
- 斜め衝突による掘削素過程 [Elbeshausen+, 2009, 2013, *JGR*]
- 原始地球の衝突生成メルト量 [Marchi+, 2014, *Nature*]

などなど

※他にも例えばK/Pg衝突への適用した論文多数 [e.g., Collins+, 2008, *EPSL*]

iSALE wiki

本家　http://www.isale-code.de/redmine/projects/isale
日本版 https://www.wakusei.jp/~impact/wiki/iSALE/

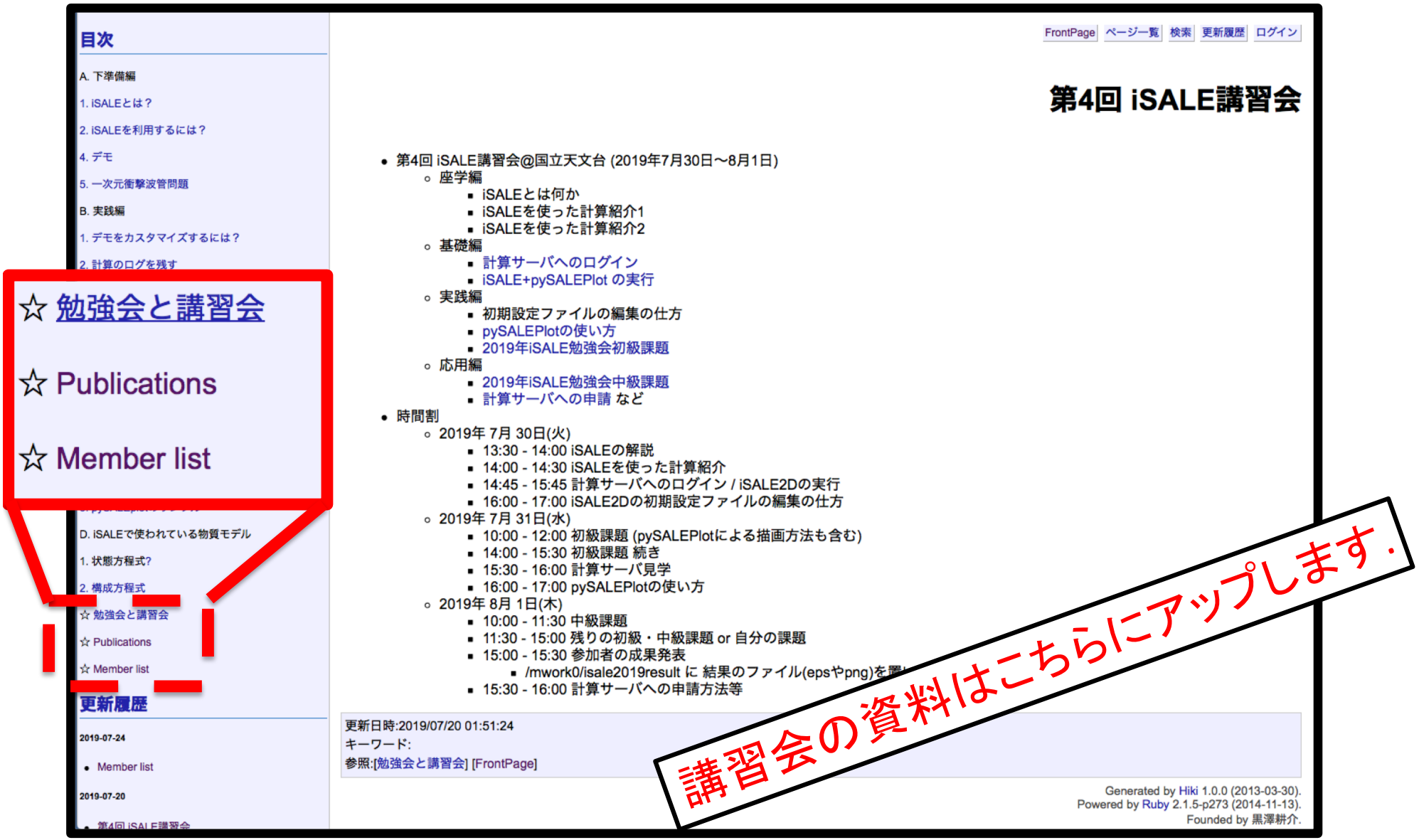


トレーサ解析のサンプルプログラムなど，公開中！

iSALE wiki

本家　http://www.isale-code.de/redmine/projects/isale

日本版 https://www.wakusei.jp/~impact/wiki/iSALE/



引用の注意

iSALEを用いた成果を公表する場合 (マニュアル P7-8)

本文中

In this work we use the iSALE shock physics code (Wünnemann et al., 2006), which is an extension of the SALE hydrocode (Amsden et al., 1980). To simulate hypervelocity impact processes in solid materials SALE was modified to include an elasto-plastic constitutive model, fragmentation models, various equations of state (EoS), and multiple materials (Melosh et al., 1992; Ivanov et al., 1997). More recent improvements include a modified strength model (Collins et al., 2004) and a porosity compaction model (Wünnemann et al., 2006).

A shorter description, appropriate for conference abstracts should still include all key references.

In this work we use the iSALE shock physics code (Amsden et al., 1980; Ivanov et al., 1997; Wünnemann et al., 2006).

Referencesに最低限上記の3論文を加えるべし。

Acknowledgements

We gratefully acknowledge the developers of iSALE, including Gareth Collins, Kai Wünnemann, Boris Ivanov, Jay Melosh and Dirk Elbeshausen.

Some plots in this work were created with the pySALEPlot tool written by Tom Davison

iSALEの数値解法と理論背景

基礎方程式（完全流体）

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋

１次元の場合

$$\frac{\partial Q}{\partial t}+\frac{\partial E}{\partial x}=0$$

$$Q=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\\ e\end{pmatrix}\qquad E=\begin{pmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\\ eu+pu\end{pmatrix}$$

連続の式
（質量保存則）

運動方程式
（運動量保存則）

エネルギー方程式
（エネルギー保存則）

未知変数４つ（u,ρ,p,e）

4つ目の方程式が必須 -> 状態方程式(EOS)

圧力と密度&エネルギー(温度)の間の関係式

$P = P(\rho, E) = P(\rho, T)$

例: 理想気体のEOS $P = \rho RT = (\gamma\text{-}1)\rho E$

EOS in iSALE-Dellen package

・「examples」の一つ上にある「EOS」にデータあり.
物質に合わせてEOSを選択可能.
–.tillo:　Tillotson EOSの入力パラメータ
–.aneos: ANEOSのテーブルデータ
–.input: ANEOSの入力パラメータ

・ Tillotson EOSとANEOSを選択可能.
Tillotson EOSであればファイルを編集することで
新たな物質を追加することも可能.

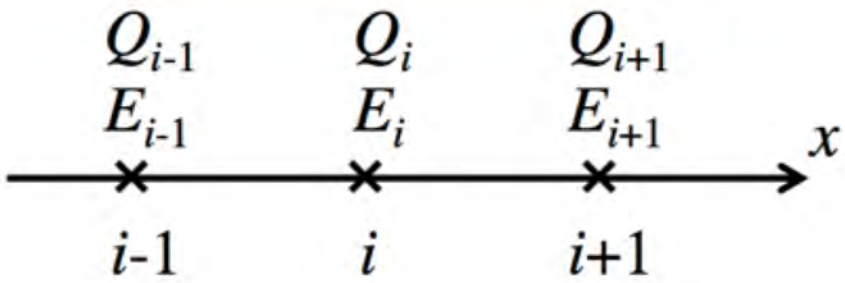
※それぞれのEOSの特性, Tillotson parametersの決定法に
ついてはiSALE wiki中の黒澤の資料をご参照ください.

aluminu.tillo
basalt_.aneos
basalt_.input
basalt_.tillo
basaltm.input
calcite.aneos
calcite.input
dry_air.tillo
drytuff.tillo
dunite_.aneos
dunite_.input
fayaltm.input
forstrm.input
fuseqtz.tillo
gabbro1.tillo
granit1.aneos
granit2.aneos
granite.input
granite.tillo
granitm.input
h2o_ice.aneos
ice___.input
ice___.tillo
iceb___.tillo
iron___.aneos
iron___.tillo
limesto.tillo
Makefile
Makefile.am
Makefile.in
miesand.tillo
perfgas.tillo
polyeth.tillo
pyrex__.tillo
quartz_.input
quartzm.input
quarzit.aneos
water__.aneos
water__.tillo
wettuff.tillo

数値解法（オイラー的解法）

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} = 0$$



時間微分に対して前進差分

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{Q_i^{n+1} - Q_i^n}{\Delta t}$$

空間微分に対して中央差分

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{E_{i+1}^n - E_{i-1}^n}{2\Delta x}$$

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \left(\frac{E_{i+1}^n - E_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) \Delta t$$

FTCS Scheme
(Forward in Time and
Central difference in Space)

※iSALEで採用されている数値解法は空間一次精度.
　数値解法としては現状のState-of-the-artではないことに留意すべし.

人工粘性

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋

衝撃波（超音速の波）を捕捉するのに必要

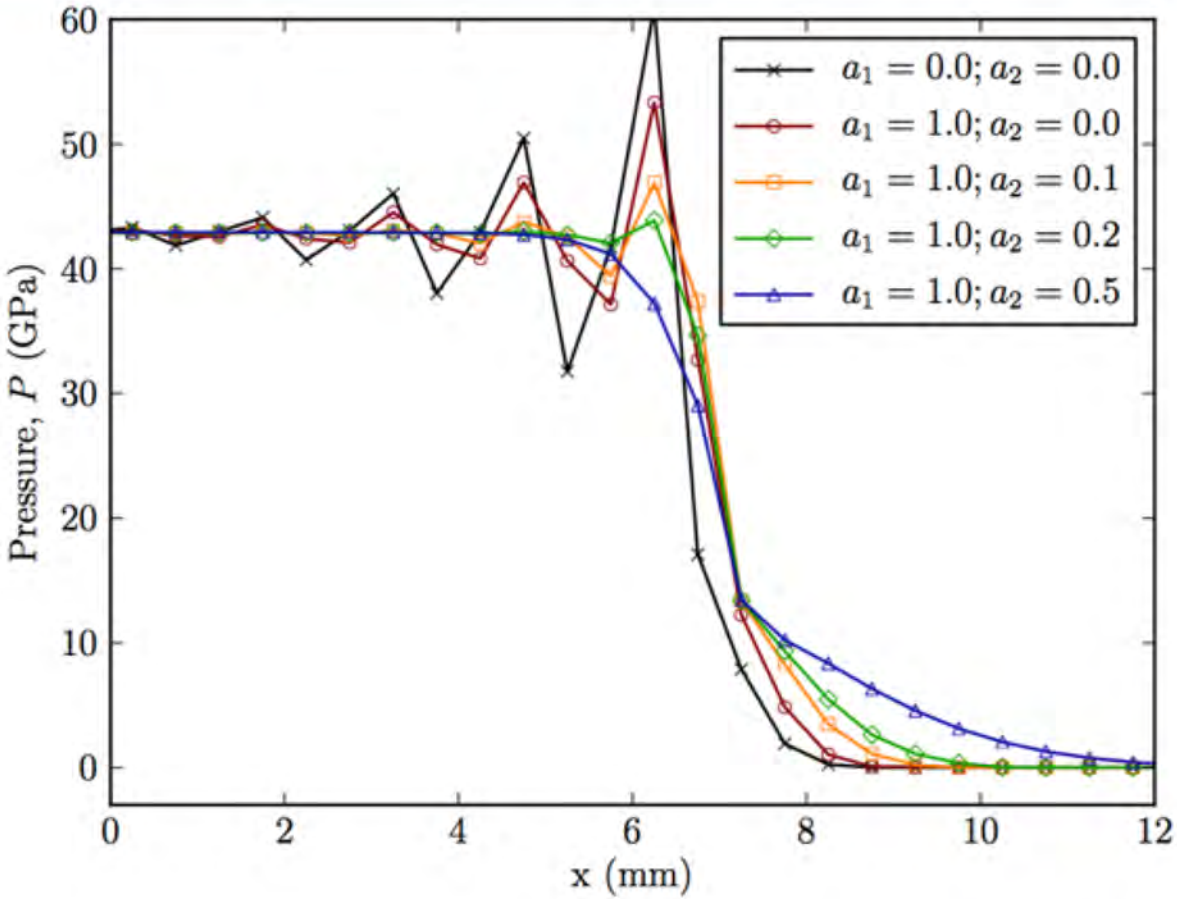
運動方程式 $$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial (p+q)}{\partial x}$$

von Neumann-Richtmyer型の人工粘性

$$q = \begin{cases} -a\rho C_s \dfrac{\partial u}{\partial x}\Delta x + b\rho\left(\dfrac{\partial u}{\partial x}\right)\Delta x^2 & \text{if} \quad \dfrac{\partial u}{\partial x} < 0 \\ 0 & \text{if} \quad \dfrac{\partial u}{\partial x} \geq 0 \end{cases}$$

人工粘性

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋



From Davison (PhD thesis)

※差分法の数値流体計算で衝撃波を補足するために絶対不可欠.
->衝撃波面が“なまる”. (iSALEではおよそ~5 cellで衝撃波面を表現する.)

[Johnson+14, Kurosawa+18]

弾性体モデル

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋

運動方程式（弾性体）

$$\frac{Du_i}{Dt} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i}$$

応力テンソル

運動方程式（完全流体）

$$\frac{Du}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x}$$

構成方程式

$$\sigma_{ij} = K\varepsilon_{kk}\delta_{ij} + 2G\left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3}\varepsilon_{kk}\delta_{ij}\right)$$

体積弾性率　せん断弾性率

ε_{ij}：ひずみ

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial s_i}{\partial x_j} + \frac{\partial s_j}{\partial x_i}\right)$$

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + s_{ij}$$

圧力は状態方程式から計算

iSALEではポアソン比を
入力パラメータとして与える

$$G = 3K\frac{1-2\nu}{2(1+\nu)}$$

※体積弾性率$K = \rho_0 C_0^2$
ρ_0: 標準密度
C_0: バルク音速

弾性体モデル

運動方程式（弾性体）

$$\frac{Du_i}{Dt} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i}$$

構成方程式

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + s_{ij}$$

偏差応力テンソル

$$s_{ij} = 2G\left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3}\varepsilon_{kk}\delta_{ij}\right)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial s_i}{\partial x_j} + \frac{\partial s_j}{\partial x_i}\right)$$

$$s_{ij}^{n+1} = s_{ij}^{n} + \frac{ds_{ij}^{n}}{dt}\Delta t$$

s_{ij}の時間微分を使う

$$\frac{ds_{ij}}{dt} = 2G\left(\dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{1}{3}\dot{\varepsilon}_{kk}\delta_{ij}\right)$$

$$\boxed{\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)}$$

計算の毎Stepで計算されている値

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋

塑性体モデル

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋

応力不変量(J_2)がある値（降伏応力Yの２乗）以上になったら塑性的に振る舞う

$$J_2 = -(s_{xx}s_{yy} + s_{yy}s_{zz} + s_{zz}s_{xx}) + s_{xy}^2 + s_{yz}^2 + s_{zx}^2 \quad (4.9)$$

$$J_2 = \frac{1}{2}(s_{xx}^2 + s_{yy}^2 + s_{zz}^2) + s_{xy}^2 + s_{yz}^2 + s_{zx}^2 \quad (4.10)$$

$$J_2 = \frac{1}{6}((s_{xx} - s_{yy})^2 + (s_{yy} - s_{zz})^2 + (s_{zz} - s_{xx})^2) + s_{xy}^2 + s_{yz}^2 + s_{zx}^2 \quad (4.11)$$

$$J_2 = \frac{1}{6}((s_1 - s_2)^2 + (s_2 - s_3)^2 + (s_3 - s_1)^2) \quad (4.12)$$

$$J_2 = \frac{1}{2}(s_1^2 + s_2^2 + s_3^2) \quad (4.13)$$

$$J_2 = \frac{1}{6}((\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2) \quad (4.14)$$

$$J_2 = \frac{1}{6}((\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2) + \sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{zx}^2 \quad (4.15)$$

$$J_2 = \frac{1}{6}((s_{xx} - s_{yy})^2 + (s_{yy} - s_\theta)^2 + (s_\theta - s_{xx})^2) + s_{xy}^2 \quad (4.16)$$

$\sqrt{J_2} > Y$ の時、 $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + s_{ij} \times \dfrac{Y}{\sqrt{J_2}}$

※1　偏差応力テンソルに上限を設けることに相当する.
※2　第一項が第二項に対して卓越する場合は完全流体.

iSALEの物質強度モデル

Manual P75~

弾性・
塑性体

破壊モデル（ダメージパラメータ）

ROCK Pressure- and damage-dependent strength model for rock-like materials.
DRPR Drucker-Prager Linear pressure-dependent strength model for granular material.
LUNDI Ludborg intact: Non-linear pressure-dependent strength model for intact rock.
LUNDD Lundborg damaged: Non-linear pressure-dependent strength model for intact rock.
VNMS Von Mises: Constant yield-strength model for ductile materials.
JNCK Johnson and Cook: Strain and strain-rate dependent strength model for metals.
LIQU Liquid: Newtonian fluid model 粘性流体
HYDRO Hydrodynamic: Inviscid fluid model 完全流体

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋

降伏応力モデル

iSALE wiki
玄田英典さんの
講義資料より抜粋

Manual P75~

ROCK Pressure- and damage-dependent strength model for rock-like materials.

降伏応力(Y)のダメージパラメータ依存性

$$Y = Y_d D + Y_i(1-D)$$

DRPR Drucker-Prager Linear pressure-dependent strength model for granular material.

降伏応力(Y)の圧力依存性(線形)

LUNDI Ludborg intact: Non-linear pressure-dependent strength model for intact rock.

降伏応力(Y)の圧力依存性(非線形)

LUNDD Lundborg damaged: Non-linear pressure-dependent strength model for intact rock.

降伏応力(Y)の圧力依存性(非線形)

VNMS Von Mises: Constant yield-strength model for ductile materials.

降伏応力(Y)一定モデル

JNCK Johnson and Cook: Strain and strain-rate dependent strength model for metals.

降伏応力(Y)のひずみ・ひずみ速度依存性

個々人の問題設定に合わせて適切なモデルを選択すべし.
各モデルの解説がiSALE wikiの中村昭子さんの資料にあります.

iSALEの物質モデル 1

Manual P75~ & 中村さんの解説資料

物質モデルの組み合わせ

STRMOD	DAMMOD	ACFL	THSOFT	LDWEAK
ROCK	NONE, SIMPLE, COLLINS, IVANOV	NONE, BLOCK	NONE, OHNAKA	NONE, POLY
DRPR	NONE	NONE, BLOCK	NONE, OHNAKA	NONE, POLY
LUNDI	NONE	NONE, BLOCK	NONE, OHNAKA	NONE, POLY
LUNDD	NONE	NONE, BLOCK	NONE, OHNAKA	NONE, POLY
VNMS	NONE	NONE	NONE, OHNAKA	NONE, POLY
JNCK	NONE	NONE	NONE, JNCK	NONE
LIQU	NONE	NONE	NONE	NONE
HYDRO	NONE	NONE	NONE	NONE

強度 ↑ ダメージ

音響流動 ↑ 熱弱化

低密度弱化

問題設定に合わせて適切なモデルを組み合わせ,
パラメータセットを精査すべし.

iSALEの物質モデル 2 –空隙-
ε - α compaction model

P-α modelと本質的には同じ．計算コストが劇的に減る.

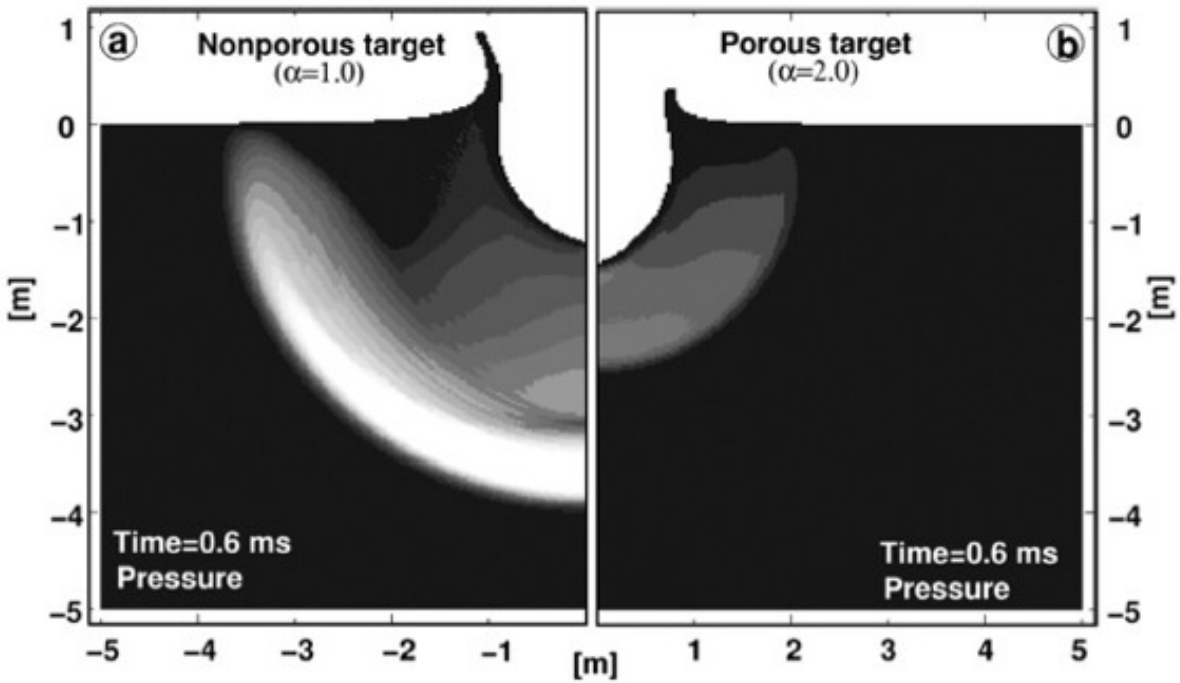
[e.g., Kerley, 1992]

[Wunnemann+06, *Icarus*]

$$P = f(\rho, E, \alpha) = \frac{1}{\alpha} P_s(\alpha\rho, E) = \frac{1}{\alpha} P_s(\rho_s, E)$$

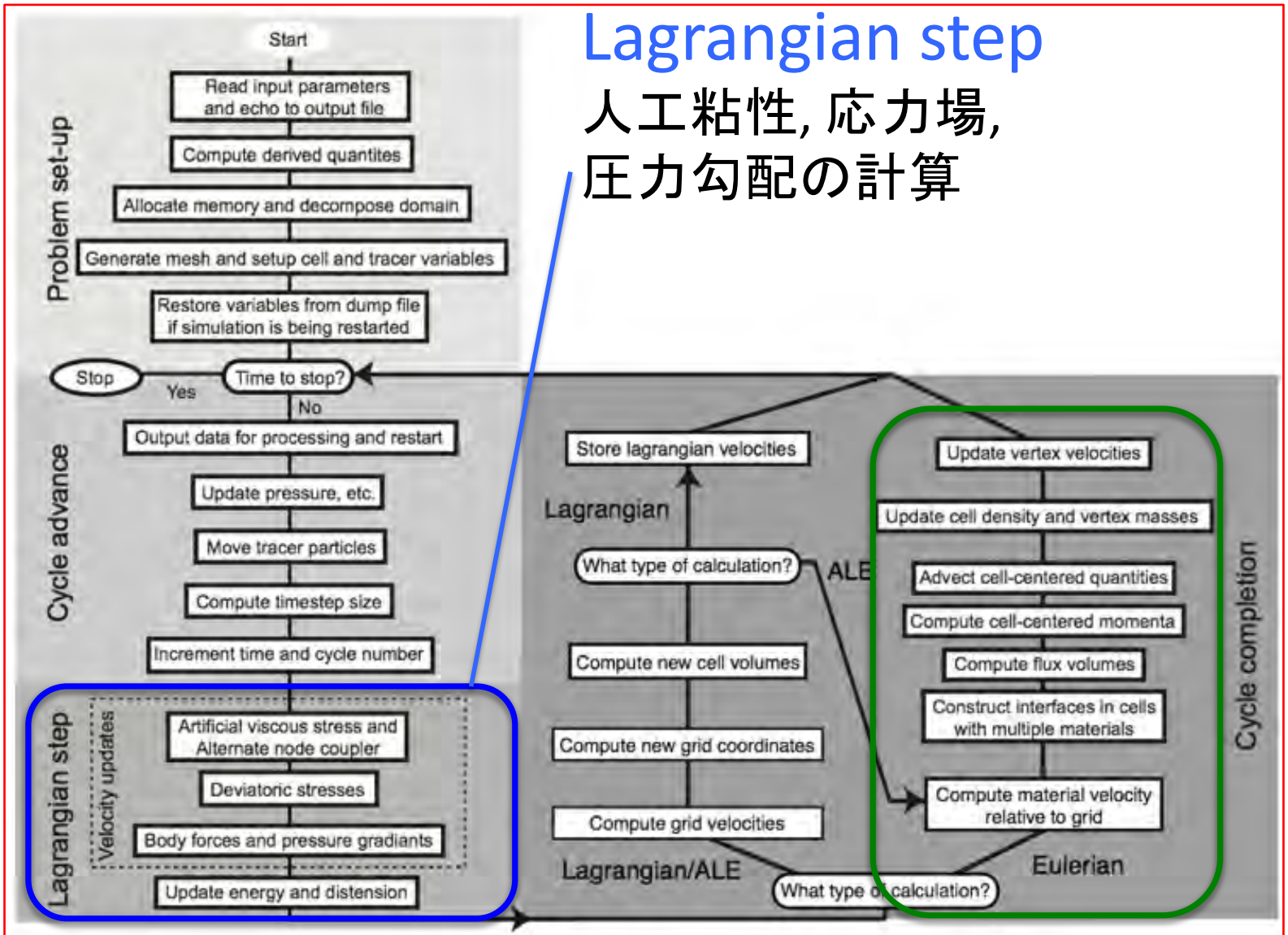
熱力学的証明はHolsapple08を参照

※ $\alpha = 1/(1-\phi) = \rho_{solid}/\rho$



[Wünnemann+06]

iSALE2Dの計算の流れ



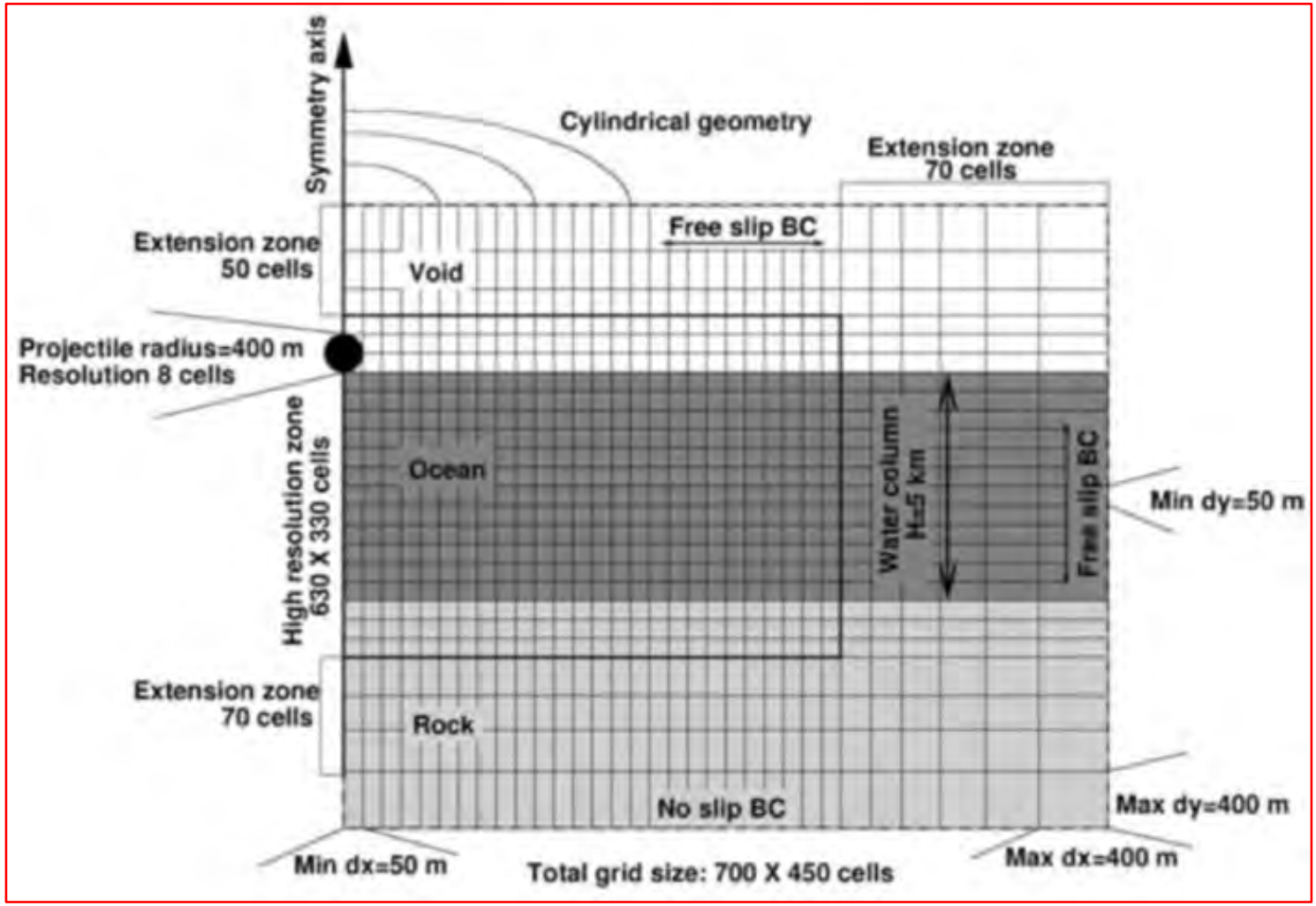
Lagrangian step

人工粘性, 応力場,
圧力勾配の計算

Figure 5.1: Flow diagram for iSALE2D as implemented in main.

iSALE2Dの計算座標例

マニュアル P21



High-resolution zoneの外側にExtension zoneを配置可能.
(境界からの反射波の影響を小さくできる.)

iSALEの説明書

1. iSALE-Manual: https://figshare.com/articles/iSALE-Dellen_manual/3473690

iSALE:
A multi-material, multi-rheology shock physics code for simulating impact phenomena in two and three dimensions.

Gareth S. Collins, Dirk Elbeshausen, Kai Wünnemann,
Thomas M. Davison, Boris Ivanov, H. Jay Melosh

iSALE-Dellen release, July 8, 2016

2. parameters.db:各サンプルプログラムと同じフォルダ

```
<PARAM>
ABBREV : GRAD_TYPE : STR
DESC : Lithostatic gradient
<INFO>
Several different options are available to pre-compress the target/planet
as a consequence of the ambient gravitational field...

\begin{description}
\item[NONE] -- No gravity field; constant initial material properties

\item[DEFAULT] -- Spatially and temporally constant gravity field; initial material
            properties change with depth in target.

\item[CENTRAL] -- Spatially varying gravity field, but constant in time. For
            use in S\_TYPE == PLANET mode. Initial material properties change
            with distance from planet centre.

\item[SELF] -- Spatially and temporally varying gravity field, calculated
            from mutual gravitational attraction of all mass in domain.
            Initial material properties change according to gravity field.
            (Not currently available in iSALE-3D).
\end{description}
</INFO>
<CODE>
DIM : 2
OPTIONAL : YES
DEFVAL : DEFAULT
VALUES : DEFAULT : NONE : CENTRAL : SELF
</CODE>
```

計算を進めるコツ1

1. iSALEに慣れる.

☆見栄えのいい動画を作成. 一晩で終わる程度の計算がよい.
　計算にかかる時間の推定にはoutput.txt0を活用.

2. iSALEを使った再現計算

☆興味ある現象について自分の入力ファイルを作成(3日目).
　–「examples」内の入力ファイルを参考に.
　–人に聞く. まずはiSALE-users-jpまでご一報ください.
　–先行研究の文献調査を行う.

3. iSALEを使った研究

☆どうしてもBlack boxになる部分がでてくる.
　– 物理的に正しいかどうかで判断するしかない.
　　パラメータに対する依存性は妥当か？
　– 先行研究の実験データ/数値計算結果を再現するか否か.

計算を進めるコツ2

4. iSALEの必要性をよく考える.

☆論文公表に耐える計算をするには時間がかかる.
->必要な計算のみをピンポイントで実施する.

衝突現象については50年来の豊富な研究例がある [e.g., Melosh89].
たいていの現象のオーダー推定程度の議論は可能.

e.g., クレータ形成 [Holsapple93; Kurosawa & Takada19]
衝突放出 [Kieffer77; Housen+83; Melosh84; Kurosawa & Takada19]
多孔質物体への貫入 [Kadono99]
衝撃波伝播 [Pierazzo+97]
衝撃温度 [Ahrens & O'Keefe72; Sugita+12]
衝突誘起相変化 [Ahrens & O'Keefe72; Ivanov & Deutsch02; Melosh07; Kurosawa+12]

衝突現象の先行研究についてお困りの際は講師陣にお気軽にお尋ねください.