

iSALE 講習会
配布テキスト
-座学講義編-

iSALE 講習会実行委員会

講師一覧

2021 年度

黒澤 耕介 千葉工業大学 惑星探査研究センター
末次 竜 大島商船高等専門学校
鳶生 有理 宇宙航空研究開発機構
伊藤 孝士 国立天文台天文シミュレーションプロジェクト

2020 年度

黒澤 耕介 千葉工業大学 惑星探査研究センター
末次 竜 大島商船高等専門学校
脇田 茂 Purdue University
伊藤 孝士 国立天文台天文シミュレーションプロジェクト

編集履歴

2020 5/21	第 1 版(2020 年度版)作成	黒澤耕介
2020 7/13	2020 年度版確定	黒澤耕介
2021 5/19	2021 年度版作成	黒澤耕介
2021 9/9	2021 年度版確定	黒澤耕介

まえがき

本テキスト初版は 2015 年度から行ってきた iSALE 講習会の講習内容をもとに 2020 年度に執筆されたものである。2020 年度は新型コロナウイルス感染症の蔓延により年度始めの 1 週間後には緊急事態宣言が発出され、人生初の在宅研究期間が始まった。実験研究はできないし、2015 年度から続いていた本講習会もオンライン開催を避けられない状況となったため、本テキストを執筆することにした。あのときは 1 年後には状況が好転していることに期待していたが、現在でも東京は 3 度目の緊急事態宣言発令中である。とはいえ、ワクチンの接種がはじまり、コロナ禍の折返し地点には来ているのかな?という空気感が感じられるようになってきた。来年度こそはこのような暗いまえがきを書かなくてよい日常に戻っていることを祈るばかりである。

iSALE には開発チームがまとめた iSALE-Dellen manual が用意されている[Collins et al., 2016]. 入力パラメータの詳細など iSALE 計算に必要な情報だけでなく, 実装されているモデルの理論背景と元論文への Reference list もまとめられている良書である. これから iSALE を使用しようとする読者には熟読を薦める. 本テキストは iSALE-Dellen manual の行間を埋めるという指針で執筆された 2020 年度版に若干の修正, 加筆を加えたものである. 筆者自身が理解するのに手間取った箇所や初学者が陥りがちな誤解などについて論理の流れを整理するように執筆したつもりである. 誤植など発見された場合は(isale-developers-jp@perc.it-chiba.ac.jp)まで連絡をいただくと幸いである.

2021 年 5 月 19 日

黒澤 耕介

目次

1. はじめに ~惑星科学と天体衝突現象~	5
2. iSALE の概要	10
2.1. iSALE の特徴	10
2.2. 使用規約及び注意	12
3. 衝突物理学と数値衝突計算	15
3.1. 衝突研究の基本指針	15
3.2. iSALE の数値解法概略	17
3.2.1. 流体方程式	18
3.2.2. 状態方程式	20
3.2.3. 人工粘性	27
3.2.4. 弾性体モデル	29
3.2.5. 塑性体モデル	30
4. iSALE に実装されている物質モデル	32
4.1. 降伏応力(物質強度)モデル	32
4.1.1. 完全流体(HYDRO)	32
4.1.2. 粉体(DRPR)	32
4.1.3. 岩石(ROCK)	33
4.1.4. 金属(JNCK)	34
4.2. 熱弱化モデル(THSOFT)	35
4.3. 微小空隙圧密モデル(WUNNEMA)	36
5. 数値流体計算研究を行う際の注意事項	40
5.1. iSALE で解ける量, 解けない量	40
5.2. 数値拡散	41
5.3. 物質境界面における非物理的挙動	42
5.4. 結果の空間解像度依存性	45
5.5. iSALE 計算を進めていく際のコツ	47
謝辞	49
参考になる websites	49
参考文献	50

1. はじめに ~惑星科学と天体衝突現象~

太陽系において、大気を持たない固体天体表面を支配する地形は衝突クレータである。この観測事実は太陽系天体がその歴史を通じて度々天体衝突に晒されてきたことを物語る。天体衝突速度は被衝突天体の脱出速度よりも速いので、惑星成長期において天体サイズが地球の月程度まで成長すると衝突速度は 2 km s^{-1} を超え、火星サイズでは 5 km s^{-1} 、地球サイズでは 10 km s^{-1} を超える。このときに達成されるエネルギー密度 e は衝突速度 v_{imp} を用いて

$$e = 50 \left(\frac{v_{\text{imp}}}{10 \text{ km s}^{-1}} \right)^2 (\text{MJ kg}^{-1}) \quad (1.1)$$

と表せる。このエネルギー密度に対応する圧力 P と温度 T はそれぞれ $P \sim \rho e$ 、 $T \sim e c_p^{-1}$ と大雑把には近似できる。ここで ρ は密度、 c_p は定圧比熱である。すなわち衝突速度 10 km s^{-1} では 150 GPa 、 $5,000 \text{ K}$ に達する¹。このような見積もりを行ってみると秒速数 km で起こる天体衝突の地質過程における特異性が見えてくる。(1.1) 式で計算されるエネルギー密度は天体中で起こる地震や火山活動といった内因的過程と比較して高い。そのため天体表層平均場では起こり得ない物理・化学過程が駆動されることが天体衝突の特徴である。図 1.1 に天体衝突で引き起こされる諸過程を模式的に示す。衝突点からの距離に対応するエネルギー密度分布も示してある。

惑星科学における諸問題において天体衝突が重要な役割を果たしている例は様々あるが、筆者が思いつくものを以下に挙げてみよう²。天体衝突現象をキーワードにすると惑星科学に多角的な切り口が観えてくることが伝われば幸いである。

(a) 衝突蒸発, 熔融

惑星が成長し衝突速度が 10 km s^{-1} に迫ってくると衝突点近傍の高エネルギー密度領域の温度は数 1000 K に達する。これは成長中の惑星表面への熱の埋め込みとして古くから検討されてきた [e.g., Hanks and Anderson, 1969; Mizutani et al.,

¹ 典型的な岩石の密度 $\rho = 3,000 \text{ kg m}^{-3}$ 、定圧比熱 $c_p = 1 \text{ kJ K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ を用いて概算しました。

² 調子に乗って書きすぎたので、適宜読み飛ばしてください。古いものから新しいものまでなるべく論文をたくさん参照しました。興味がありそうな内容があったら参考文献にあたってみる、という使い方をしてもらえたら幸いです。

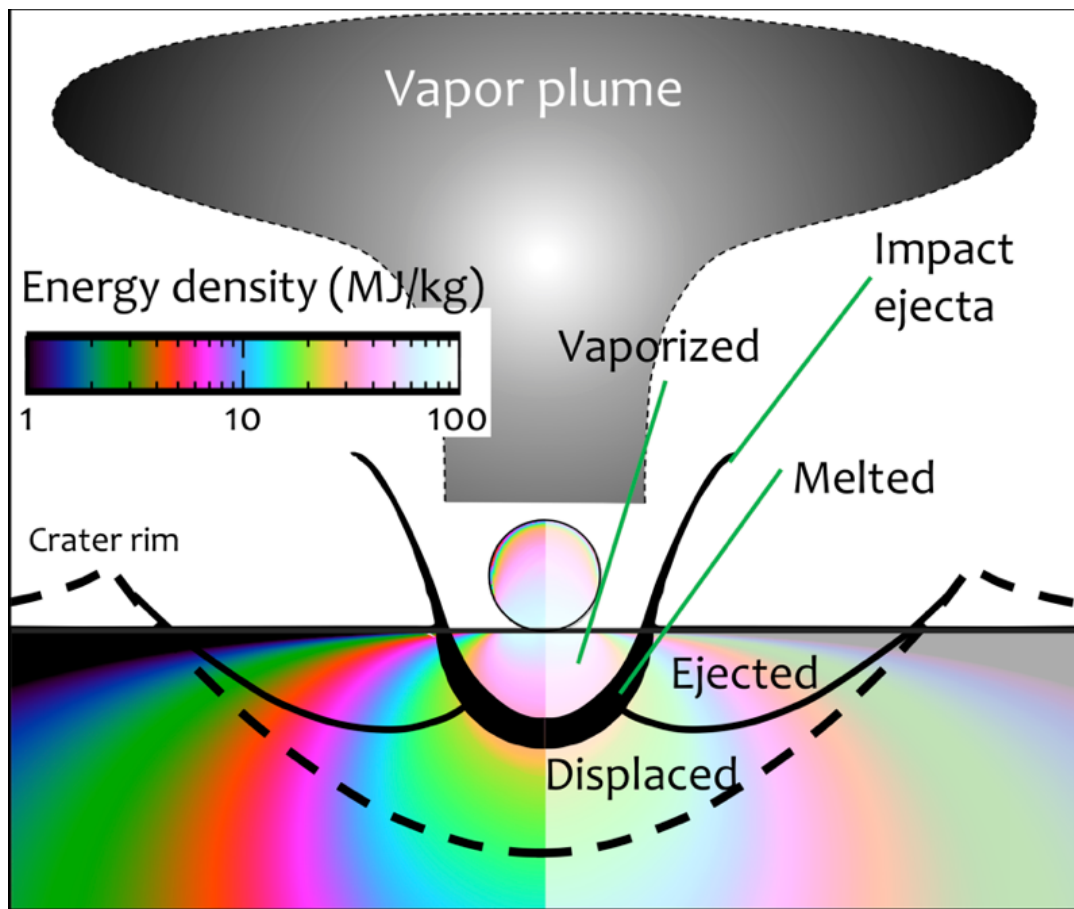


図 1.1. 天体衝突で引き起こされる物理過程. 色はエネルギー密度を表す. Salge, (2007) の Fig.1-3 を元に作成.

1972; Safronov, 1978; Senshu et al., 2002]. 成長後の惑星の進化の主な駆動力が天体中心から表面への熱輸送であることを考えるとその初期条件を与える過程として重要であることは疑いがないであろう。

このような高温では造岩鉱物も熔融、蒸発といった相変化を起こす[e.g., Ahrens & O'Keefe, 1972]. 発生した蒸気は「衝突蒸気雲」を形成する。衝突天体が炭素質コンドライトや彗星のように有機物に富む天体の場合には衝突蒸気雲内でいわゆる CHONPS の化学反応が進行する。蒸気雲は急激に膨張するため、ある時点で化学凍結を起こし惑星表層平均場では生じ得ない化学種が惑星、衛星表層に残される。衝突蒸気雲内で温室効果ガス[e.g., Kress and McKay, 2004; Hashimoto et al., 2007], 生命前駆物質[e.g., Mukhin et al., 1989]が生成される可能性が指摘されている。また氷衛星上ではクレータ周辺に生成された炭素系ガスが沈着し、観測可能な反射スペクトルの変化をもたらすとする研究もある [e.g., Nna-Mvondo et al., 2010; Ishimaru et al., 2010].

大気を持つ惑星への天体衝突では、急激に膨張する衝突蒸気雲によって既存の惑星大気が吹き飛ばされる [e.g., Melosh and Vickery, 1989; Svetsov, 2007; Shuvalov, 2009; Hamano and Abe, 2010]. これは Impact erosion と呼ばれ、特に天体重爆撃期においては惑星の大気全圧と組成を支配する重要過程である[e.g., de Niem et al., 2012; Kurokawa et al., 2018].

過去の天体衝突で一度熔融した後に固化した物質は、衝突熔融物(Impact melt)と呼ばれる。隕石中や地層から発見されれば重要な地質試料となる。これは衝突熔融物の存在がある時期に秒速数 km 以上の天体衝突が起こったことの証拠に他ならず、発生頻度が太陽系天体の軌道進化史への制約することに繋がることによる。代表的な例ではコンドライト隕石中の Chondrules [e.g., Kieffer, 1977; Johnson et al., 2015]や地球の古地層から発見される球粒(Impact spherules) [Johnson and Melosh, 2012a, b, 2013]などがある。

衝突に伴う昇温の際には加熱された物質の鉱物組織中で元素拡散が起こる。これを利用したのが隕石の ^{40}Ar - ^{39}Ar 年代計測による初期太陽系衝突史の復元 [e.g., Marchi et al., 2013]である。

(b)衝突放出物

よく知られているように天体衝突が起こると被衝突天体表層が掘削、放出される。太陽系初期には相互衝突する微惑星の質量欠損に寄与し、放出物は無数の小天体となる[e.g., Kobayashi and Tanaka, 2010].

衝突点近傍からの高速度物質放出は「衝突剥離現象(Impact spallation)」と呼ばれ、火星サイズ以上(脱出速度 $> 5 \text{ km s}^{-1}$)に成長した天体から固体物質を放出させることができる唯一の力学過程である [e.g., Melosh, 1984]. これにより惑星間物質輸送及び交換が引き起こされる(Litho-Panspermia と呼ばれる) [e.g., Melosh, 1988; Vickery and Melosh, 1987; Head et al., 2002; Artemieva and Ivanov, 2004; Kurosawa et al., 2018, 2019; Hyodo et al., 2019]. 近年では TRRAPIST-1 のような狭い軌道長半径の領域に複数の惑星を持つ系外惑星系が発見されている。Litho-Panspermia は宇宙生物学の観点から再び注目が集まっている [e.g., Krijt et al., 2017; Veras et al., 2018].

被衝突天体上空に放出された物質の大部分はその天体の脱出速度を超えない。そのような大質量の低速放出物はその天体上に落下し、着地点近傍の物質と混合する [e.g., Melosh, 1989]. これは物質の水平輸送及び混合過程であるとみな

すことができる [e.g., Knauth et al., 2005]. 月の光条クレータの大きなものに代表されるように天体表層を縦断するような大規模物質輸送が引き起こされる. 米国の Apollo 計画で回収された月試料には Imbrium 盆地を形成した衝突の際に放出された物質が混合している(汚染されている)ことが近年確かめられた [e.g., Norman et al., 2010]. 現存する月試料の分析, データ解釈, 及び将来月探査の着陸地点検討などを行う上で衝突放出過程の理解は不可欠であろう.

天体重爆撃期には天体表層すべてが掘り返され, 広範に攪拌されていたことが推測される[e.g., Marchi et al., 2014]. 発生した甚大な量の放出物が惑星大気と反応することによって, 大気組成や量が変化したのではないか?という説もある [Sleep and Zahnle, 1998; Kurosawa, 2015].

(c)クレータ形成

(b)で述べた衝突放出の帰結として, 被衝突天体表層には孔が残される. これは衝突クレータと呼ばれる. その重要性として最初に述べるべきなのは「クレータ年代学」[e.g., Hartmann, 1970, 1984, 2005; Neukum et al., 1975; Neukum and Ivanov, 1994]であろう. これはある天体の異なる地質ユニット³を比較した場合に, 単位面積あたりのクレータ個数(=クレータ面密度)が多い方が古い, ということを利用している. 月面で採取された試料は絶対年代が計測されている[e.g., Tera et al., 1974]. 絶対年代が計測された月試料とその採取地域のクレータ面密度を対応させたものがクレータ年代関数として得られている⁴. 地球, 月以外の天体の地質ユニットの新旧は基本的にはクレータ年代学をもとに議論される. つまりクレータ(群)は太陽系の時計として活用されているのである.

クレータ形成に伴い, 天体の地形は変化していく. 高低差や地形の規模⁵の頻度分布からはその天体がその歴史を通じて経験した天体衝突の総数の情報を抽出できる [e.g., Sugita and Matsui, 1992; Araki et al., 2009; Minton et al., 2019].

衝突物理の知見からあるクレータを作った衝突天体の素性(サイズ, 速度, 角度)が推定できると, クレータのサイズ頻度分布から衝突天体群が太陽系のどこから来たのか?という推定ができる. 金星, 火星, 月のクレータサイズ頻度分布

³ 反射スペクトル, 鉄含有量など様々な指標で判断して区別がつかない1つの領域, もしくはクレータの内外など地質的に明確な境界で区分された領域などのことを指しています.

⁴ クレータ年代関数の求め方として日本語で書かれた解説文に諸田, 平田(2015)があります. 一見の価値ありの良文です.

⁵ 地形図の高低差を球面調和関数展開したときの各次数の係数として定義されます.

から2つの異なる衝突天体群があり、それぞれが Near Earth Asteroids, Main Belt Asteroids に対応することが見いだされている [e.g., Strom et al., 2005, 2008].

衝突掘削によって形成した衝突クレータは、形成直後には地殻不均衡状態にある。これを解消するため直下のマントルが隆起し、地殻均衡へ向けて緩和する。このとき緩和時間は地殻物質やマントル物質の粘性率の関数となる。岩石物質の粘性率は温度に対して極めて強い依存性(指数関数)を持つため、緩和が完了している衝突盆地が発見された場合には形成当時の天体がまだ高温であったことを示すことができる。月探査衛星かぐや[Namiki et al., 2009]及びGRAIL[Wieczorek et al., 2013]による月重力場探査によって、月面の衝突盆地は緩和しきっているものと、緩和途中であるものに2分されることがわかった。これは月への大規模天体衝突が長期間継続したことを示唆する結果である [Kamata et al., 2015; Conrad et al., 2018].

月サイズを超える天体への衝突の場合、静水圧が無視できなくなる。深部ほど高い圧力になっているため、衝突による圧縮波が伝播すると動的反跳(Dynamic rebound)を起こす。これは被衝突天体の深部の物質を天体表層に向けて輸送する過程と見ることができる。巨大衝突段階や天体重爆撃期においては大規模な天体衝突が頻発するため、天体衝突によって天体表層に対流が駆動されることと等価(衝突誘起対流)になる。重要な点は硬くて対流が起きない岩石圏(Lithosphere)において対流熱輸送が引き起こされるという点である。つまり逆説的であるが、天体衝突が惑星の冷却に寄与する[e.g., Senshu et al., 2002; Peneva et al., 2018].

ここで挙げた例はほんの一部に過ぎないが、天体衝突は、惑星の起源、進化と密接に関わり、その痕跡が地質試料として検出される可能性がある、興味深い研究対象である、ということが理解されれば幸いである。iSALE は汎用性の高い数値衝突計算コードである。上記の研究例はもちろん、読者の興味に合わせた衝突計算を実施できるだろう。

2. iSALE の概要

本章では(2.1)iSALE の特徴と, (2.2)使用規約及び注意について述べる. なお, より詳細な情報は iSALE 開発チームが作成している website に集約されている. そちらも合わせて参考にしてほしい. なお本講習会で言及する内容は特に断らない限りは 2次元計算用の iSALE(iSALE-2D)を指す⁶.

iSALE web page

<http://www.isale-code.de/>

2.1. iSALE の特徴

iSALE とは Impact-SALE (Simplified Arbitrary Lagrangian Eulerian)のことである. 開発チーム(iSALE developers)の表現を借り, 一言で表現すると「A multi-material, multi-rheology shock physics code」である[Collins et al., 2016]. この中身を日本語で簡易的に書くならば, 「物質の構成方程式と流体方程式を無矛盾に解き, かつ衝撃波を補足可能な流体計算コード」ということになるだろう. 構成方程式を取り入れることにより, 物質の弾塑性体応答をも扱うことができることから hydrocode ではなく shock physics code と呼ばれている [e.g., Pierazzo et al., 2008]. iSALE の名を筆者が頻繁に聞くようになったのはおおよそ 2010 年以降⁷くらいであろうか. 現在では 100 報を超える論文が国際誌に掲載 [<https://isale-code.github.io/publications.html>]されており, 近年急激に広まったといえる. iSALE の開発経緯については iSALE-Dellen manual [Collins et al., 2016, https://figshare.com/articles/iSALE-Dellen_manual/3473690]にまとめられているので, ここでは以下に iSALE の重要と思われる特徴を箇条書きにする.

⁶ 3次元計算用の iSALE-3D も開発されていますが, その利用は iSALE developers に限られます. iSALE developers への加入要件は iSALE-2D を用いた計算に習熟し, iSALE 開発に協力の意思を示すこと, となっています. 詳しくは以下のページをご参照ください. <https://isale-code.github.io/terms-of-use.html>

⁷ 筆者は 2006 年から 2019 年まで連続で毎年 3 月に米国ヒューストンで開催される Lunar and Planetary Science Conference(LPSC)に参加していました(残念ながら 2020 年はコロナ禍で中止). 近年では衝突研究関連セッションにおいて当たり前のように iSALE という名を聞くようになっています.

- (a). 科学利用目的の惑星科学者に無償で開放
- (b). 格子法の 2 次元流体計算コード⁸ [Amsden et al., 1980]
人工粘性の導入による衝撃波補足
- (c). 幅広い P-V-T(圧力-体積-温度)を表現する状態方程式モデル
(Tillotson EOS [Tillotson, 1962] or ANEOS [Thomson and Lauson, 1972])
- (d). 天然物質を表現するための物質モデル
 - 弾塑性体応答を表現する温度, 圧力依存降伏応力
[e.g., Ivanov et al., 1997; Collins et al., 2004]
 - 微小空隙圧密モデル [Wünnemann et al., 2006; Collins et al., 2011]
- (e). よく練られた User Interface
 - ユーザは 2 つの入力ファイルの編集作業のみで数値計算を実施できる.
(i.e.,ソースコードを編集しなくてよい.)
- (f). 計算データを読み込み, Python へ受け渡す pySALEPlot の実装
 - Numpy, Matplotlib といった module を利用した演算, 描画が可能
- (g). 若手-中堅層(30-50 代)の開発チーム

他の数値衝突計算との大きな違いは(a)で, ユーザの国籍を問わず, 非商用目的であれば無償で利用可能である点が画期的であると思われる. 惑星科学における衝突研究で使われる数値衝突計算コードはいくつもあるが, ユーザの国籍制限 (CTH, SOVA など)があるもの, 高価な商用コード(AUTODYN など)が多く, 初学者が使用できるものではなかった. それに加えて(e)ユーザがよく整理された 2 つの入力ファイルを編集するだけで自分好みの計算を走らせることができること, (f)出力データが煩雑になりがちな流体計算コードの出力をユーザ好みの

⁸ Lagrangian mesh mode も実装されていますが, 現在はほとんど使われていないようです. iSALE の開発, 改良は主に Euler mesh mode に対して行われています. ただし, Lagrangian mesh の方が適している場合もある[e.g., Elliott & Melosh, 2018]ので, ユーザは問題設定に適しているかどうか熟考する必要があることに注意してください.

フィルタを掛けて読み出すソフトウェアが同梱されており、初学者でも比較的簡便に計算出力の解析を実施できること、が iSALE が広く使われるようになった理由ではないかと思われる。また(g)は End users にとっては得難い利点である。これは今後 20 年あまりに渡って現役であると思われる研究者らによって保守され、開発が継続されていくであろうことが予想されるからである⁹。

2.2. 使用規約及び注意

2.1 節で解説したように iSALE は汎用性が高く、研究をすすめる上で強力な道具である。しかし、その開発には開発チームが莫大な時間を費やしていることを心に留めておかなければならないことを注意しておく。現在 iSALE は完全なオープンソースコードになっておらず、長期的な展望を持ち、かつ衝突物理と数値衝突計算に習熟した研究者、もしくはそのような研究者によって指導を受けている、研究者志望の学生に限って配布されることになっている。現在、日本国内では国立天文台天文シミュレーションプロジェクト(Center for Computational Astrophysics, 以下では CfCA と略記する)の協力を得て、短期利用希望者(学位論文研究, 単発テーマの研究など)でも CfCA の共同利用計算機(計算サーバ)上で iSALE-Dellen¹⁰を利用することが可能になっている¹¹。これは iSALE 開発チームの好意と CfCA の協力によって成り立っている措置であることを理解しておいて頂きたい。

iSALE の利用においては Terms of Use (<https://isale-code.github.io/terms-of-use.html>)に署名し、提出することが義務付けられている。講習会参加者は講習会への応募時に署名し提出しているはずである。署名入りの書類は iSALE 開発チームに提出している。たとえ教育目的であっても商用利用は不可である(例えば YouTube などの動画コンテンツに利用し収益を得ることは不可)。

以下に CfCA の共同利用計算機(計算サーバ, 解析サーバ)上で iSALE を利用することで得られた研究成果を公表(学会, 研究会などでの発表や邦文誌への投稿なども含む)する際の規約を述べておく。

⁹ 筆者の希望的推測です。開発チームが保証しているわけではありません。

¹⁰ 2020 年時点での iSALE-2D の stable version を利用することができます。iSALE-3D の利用はできません。

¹¹ 利用申請書の提出と審査があります。

(a). iSALE 開発チームへの謝辞を述べる.

例文

We thank the developers of iSALE, including G. Collins, K. Wünnemann, B. Ivanov, J. Melosh, and D. Elbeshausen.

(b). 解析に pySALEPlot を利用した場合, 開発者の Tom Davison 博士への謝辞を述べる.

例文

We used pySALEPlot to analyze the output file of iSALE. We thank Tom Davison for the development of pySALEPlot.

(c). 本文中で iSALE についての参考文献を挙げて記述する.

例文

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), a porosity compaction model (Wünnemann et al., 2006; Collins et al., 2011) and a dilatancy model (Collins, 2014).

Conference abstract などスペースがない場合でも最低限重要な 3 報を引用しつつ以下のような文で iSALE を紹介する.

例文

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

上記(a), (b)についての参考 website: iSALE Terms of Use
<https://isale-code.github.io/terms-of-use.html>

(d). CfCA 共同利用への謝辞を述べる.

計算サーバ利用時の例文

Numerical computations were [in part] carried out on the general-purpose PC cluster at Center for Computational Astrophysics, National Astronomical Observatory of Japan.

解析サーバ利用時の例文

Numerical analyses were [in part] carried out on the analysis servers at Center for Computational Astrophysics, National Astronomical Observatory of Japan.

(d)についての参考 website

<https://www.cfca.nao.ac.jp/node/46>

3. 衝突物理学と数値衝突計算

本章では最初に(3.1)衝突現象の基本的な考え方を説明する。続いて(3.2)iSALEの数値解法について簡単に説明する。より詳細な解説は iSALE-Dellen manual にあるので、そちらも参照してほしい。

3.1. 衝突研究の基本指針

天体衝突で引き起こされるすべての物理・化学現象は衝突天体がもたらす質量、運動量、エネルギーに起因する。衝突直下点で達成されるエネルギー密度は(1.1)式で与えられる。自分の研究対象の物理・化学現象(例えば衝撃熔融など)を起こすのに必要なエネルギー密度と比較して、(1.1)式の計算値が十分に大きくない限りはそのような現象が天体衝突で引き起こされることはないであろう。

ここで天体衝突研究でよく使われる言葉の定義をしておこう。物質が圧密される縦波を「圧縮波」、物質のバルク音速を超える速度で伝播する「圧縮波」を衝撃波と呼ぶ。一般に数値衝突計算では衝突天体と被衝突天体の表面は自由表面(=圧力ゼロ条件)である。この自由表面の情報を伝える波を「希薄波」、圧縮波もしくは衝撃波によって高圧に晒された物質が自由表面へ向かって膨張する包絡面を「膨張波」と呼ぶ。ここで述べた波の伝播速度はすべて位相速度であることに注意しよう。これらに対して実際の物質が移動する速度(群速度)は「粒子速度」である。衝突天体が標的天体地表に接すると、両天体の内部に向かって圧縮波が励起される。このとき圧縮波の伝播速度がバルク音速に比べて十分に速い条件であれば、衝撃波面進行方向に平行な方向によく知られた Rankine-Hugoniot 関係式 [e.g., Melosh, 1989]が成立する。

$$\rho_H(V_s - u_p) = \rho_0 V_s \quad (3.1.1)$$

$$P_H - P_0 = \rho_0 V_s u_p \quad (3.1.2)$$

$$E_H - E_0 = \frac{1}{2}(P_H + P_0) \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_H} \right) \quad (3.1.3)$$

ここで ρ, V_s, u_p, P, E はそれぞれ密度、衝撃波速度、粒子速度、圧力、内部エネルギーである。添字 H, o はそれぞれ衝撃波通過後、通過前の物理量であることを示す。これらの関係式は衝撃波面前後に対する3つの保存則(質量、運動量、エネルギー)

ギー)である。なお、衝撃波通過前の物質は停止していることを仮定している。これらの式はある速度 v_s で衝撃波が通過したときの状態 o から状態 H への不連続な跳躍条件を示しており、相図上では標準状態から衝撃圧縮状態に遷移する。異なる衝撃波速度の場合は相図上の別の点に遷移する。この操作を繰り返すと、相図上の点の集合が曲線になる。この曲線を Hugoniot 曲線¹²と呼ぶ。図 3.1.1 に密度-圧力平面における種々の物質の Hugoniot 曲線を示す。ここで横軸は標準密度で規格化している。物質によって異なる衝撃圧縮曲線となることがわかる。

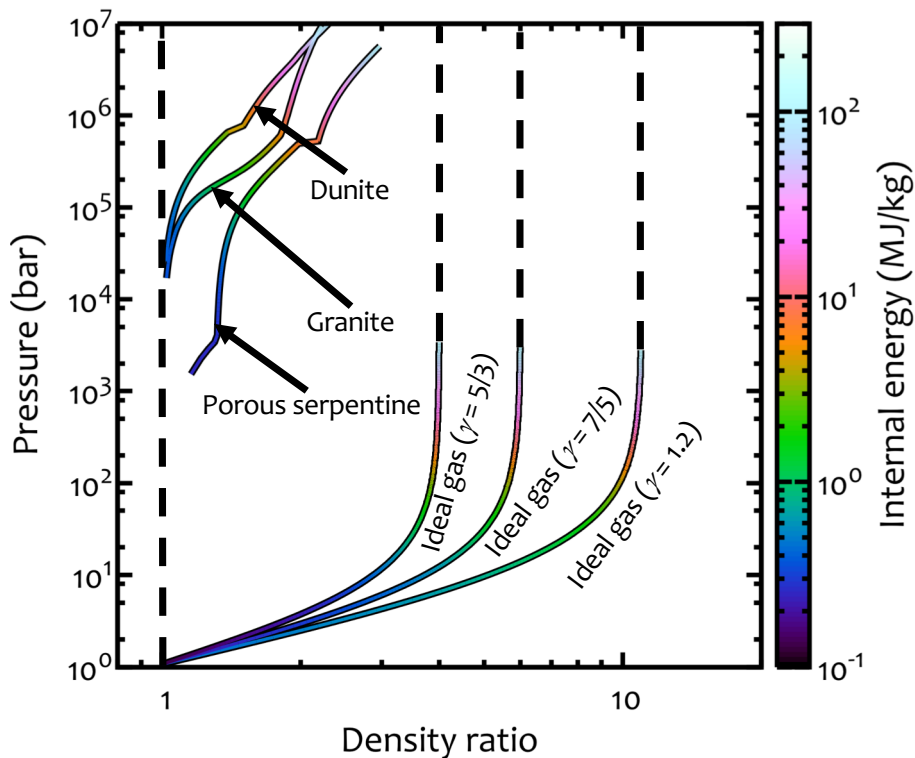


図 3.1.1. 種々の物質の規格化密度-圧力平面における Hugoniot 曲線. $1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$.

一般に天体衝突現象は空間 2 次元以上で記述される。図 3.1.2 に球形状天体が半無限平面に衝突した際¹³の衝撃波と膨張波の伝播の様子を模式的に示す。圧縮波、膨張波の伝播の様子を定性的に理解するにはホイヘンスの素元波を考えるとよい。衝突点から同心円状に圧縮波が伝播すると、標的天体表面からは希薄波の素元波が発生し、衝撃波を追従する(図 3.1.2 a)。希薄波の伝播速度は圧縮された物質のバルク音速である。希薄波はすでに圧縮波が通過し、粒子速度を持

¹² 衝撃波が伝播した際に Hugoniot 曲線を経路として衝撃圧縮状態に至るわけではないことに注意しましょう。

¹³ サイズ比(標的天体直径/衝突天体直径) $\gg 1$ の場合に相当します。

って動いている物質中を音速で伝わる。一般にその合成速度(粒子速度+バルク音速)は衝撃波速度よりも速いので、希薄波はある時点で衝撃波に追いつく。こうなると圧縮された物質は自由表面に向かう圧力勾配に従って加速される。これは衝撃波伝播によって標的天体に受け渡された運動量が、自由表面に向かって逃げていくことと等価である(図 3.1.2 b)。従って衝撃波は次第に減衰し、標的中で音波となる。ここまでは衝突現象の比較的初期の段階で完了する。その後は圧縮波/衝撃波の伝播で獲得した質量、運動量、エネルギーに従って物質が流動する、というのが衝突現象の概略である。

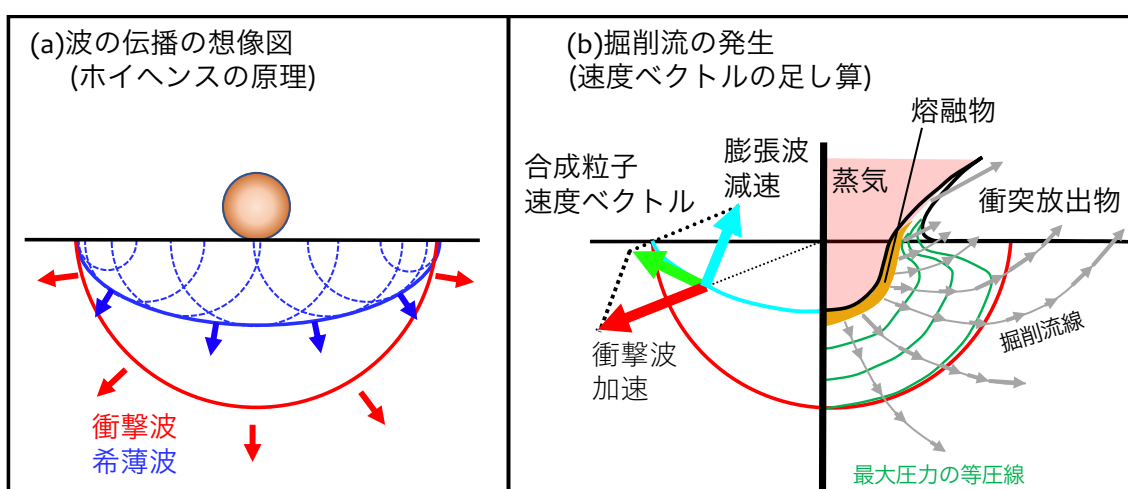


図 3.1.2. (a) 衝撃波を追いかける希薄波発生の様式図。青点線は自由表面から発生したホイヘンスの素元波。(b) 衝撃波加速と膨張波減速による粒子速度変化の様式図。クレータの科学, 図 3.1 と 3.4, [水谷, 1980]と Impact cratering, Fig.5.9 [Melosh, 1989]を参考にした。

3.2. iSALE の数値解法概略

3.1 節で衝突現象で何が起こるかについて定性的に解説した。空間 2 次元以上の現象に対して解析的な計算(いわゆる手計算)のみで定量的な値を求めること(例えば衝撃波の減衰率など)は容易ではない¹⁴。ここで登場するのが数値衝突計算である。以下では iSALE の Euler mode 利用を前提に iSALE の数値解法について簡単に解説する。3.2.1 項では連続体の流体方程式とその差分化, 3.2.2 項で状態方程式, 3.2.3 項で人工粘性の導入について解説する。3.2.1-3.2.3 項の内容は iSALE

¹⁴ 困難であるが不可能ではないことに注意しましょう。数値計算が発達する以前(概ね 80 年代以前)は解析モデルがいくつも作られ衝突現象の理解を深めました [e.g., Melosh, 1989]。

に限らず流体計算を行う際の必要事項である。iSALE の特徴は物質の弾塑性体応答を扱えることであり、読者の多くもそれを期待していることであろう。3.2.4 項で iSALE で採用されている弾性体モデルについて、3.2.5 項で塑性体モデルについて簡単に解説する。より詳細な解説は iSALE-Dellen manual [Collins et al., 2016], Ivanov et al. (1997), Collins et al. (2004)などを参照して欲しい。

3.2.1. 流体方程式

以下では簡単のため1次元の完全流体方程式について解説する。質量, 運動量, エネルギーの3つの保存則は

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} = 0, \quad (3.2.1.1)$$

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \frac{1}{2}\rho u^2 + e \end{pmatrix}, \quad (3.2.1.2)$$

$$E = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \frac{1}{2}\rho u^3 + \rho e u + P u \end{pmatrix} \quad (3.2.1.3)$$

となる。ここで t, x は時間, 原点からの距離, 4つの未知数 ρ, u, e, P はそれぞれ密度, 粒子速度, 内部エネルギー, 圧力である。運動量保存則(=運動方程式)を書き下してみると,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} \quad (3.2.1.4)$$

となる。左辺第一項はある固定点における粒子速度の時間変化, 第二項はその固定点での単位時間での移流を表しており, 左辺全体で流体素片の加速度¹⁵を表す。運動方程式(3.2.1.4)から, 流体運動を駆動するのは圧力そのものでなく圧力勾配であるであることがわかる。

4つの未知数に対して式が3つしかないので, 式(3.2.1.1)-(3.2.1.3)だけでは方程

¹⁵ ラグランジュ微分 $\frac{D}{Dt}$ と表現されることもあります。

式系が閉じず、解くことができない。そこで登場するのが状態方程式である。流体計算に登場する¹⁶状態方程式(Equations of state, EOS)は一言で言えば圧力 P を密度 ρ と温度 T , もしくは内部エネルギー E の関数 $P = f(\rho, T)$ or $g(\rho, E)$ として表現したものである。状態方程式については次項(3.2.2 項)で扱うことにする。

iSALE では計算領域空間を有限の大きさを持つ格子で区切る。このとき格子内部は一様であると仮定する。従って、格子の大きさは空間分解能に対応することになる。式(3.2.1.1)–(3.2.1.3)は連続物体に対する式である。数値計算では時間微分, 空間微分を以下のように差分式で近似する。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} \sim \frac{Q_i^{n+1} - Q_i^n}{\Delta t} \quad (3.2.1.5)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} \sim \frac{E_{i+1}^n - E_{i-1}^n}{2\Delta x} \quad (3.2.1.6)$$

添字 i, n はそれぞれ i 番目の格子, 時刻 n ステップ目を表す¹⁷。式(3.2.1.5), (3.2.1.6) は時間に対して前進差分, 空間に対して中央差分をとっていることから Forward in time and central difference in space (FTCS) scheme と呼ばれる。(3.2.1.1) 式に(3.2.1.5), (3.2.1.6)式を入れると質量, 運動量, 内部エネルギーの時間発展(時刻 $n+1$ ステップ目の値)は一つ前のタイムステップ(時刻 n ステップ目)の値を用いて

$$Q_i^{n+1} = Q_i^n - \left(\frac{E_{i+1}^n - E_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) \Delta t \quad (3.2.1.7)$$

として与えられる。初期条件(時刻 0 ステップ目)を与え, 式(3.2.1.7)を逐次計算することによって各格子点における ρ, u, e, P の時間発展を得る, というのが数値流体計算の概略である。

¹⁶ ここで「流体計算に登場する」と書いたのは流体計算を解く際の論理の流れは ρ, T から P を計算することに適しているからです。言うまでもないですが $P = f(\rho, T)$ or $g(\rho, e)$ に限らず未知の状態量と他の状態量を結びつけていれば状態方程式と呼ばれます。

¹⁷ n ステップ目の時刻 t, i 番目の格子の原点からの距離 x はそれぞれ $t = n\Delta t, x = i\Delta x$ です。

3.2.2. 状態方程式

iSALE では状態方程式モデルとして Tillotson EOS [Tillotson, 1962], もしくは ANalytical Equations Of State (ANEOS) [e.g., Thompson and Lauson, 1972; Melosh, 2007]を選択することができる. 2 つの EOS に対して惑星科学で興味ある物質の入力パラメータセットが同梱されている. ここでの EOS の選択によって物性が計算に反映される.

iSALE で選択されている 2 つの EOS の共通の特徴は,

(a). Thermal pressure(熱圧力)と Cold pressure(冷たい圧力)の線形重ね合わせ

$$P(\rho, T) = P_{\text{thermal}}(\rho, T) + P_{\text{cold}}(\rho) \quad (3.2.2.1)$$

(b). 圧縮限界(Thomas-Fermi limit)から理想気体まで幅広い P - V - T 領域を記述可能

である. (a)は内部エネルギーが小さい場合でも有限の圧力を持つことを意味する. 理想気体の状態方程式は

$$P = \rho \frac{R}{\mu} T \quad (3.2.2.2)$$

であった. ここで, R は気体定数, μ は平均分子量である. 式の形から理想気体は周辺物質に Thermal pressure しか及ぼさないことがわかる. Cold pressure の存在は固体物性を表す重要な特徴である.

実は重力の影響が無視できないようなある程度大きい天体を想定した数値流体計算を行う際には Cold pressure を導入しなければならないことを以下に示そう. 岩石物質の定積比熱の典型的な値である $c_v \sim 1 \text{ kJ K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ を用いると, 岩石物質の室温($\sim 300 \text{ K}$)における内部エネルギーは $E = c_v T \sim 0.3 \text{ MJ kg}^{-1}$ 程度となる. 典型的な岩石の密度 $\rho \sim 3 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$ をかけると, 換算圧力 $10^9 \text{ J m}^{-3} = 1 \text{ GPa}$ となる. 固体の Thermal pressure はこれに気体における比熱比に相当する係数, つまりオーダー1 の定数をかけることでおおよそ近似できる. g がそれなりに大きい天体では静水圧 ρgh (g は重力加速度, h は静水圧がかかる面に対して, その上になっている物質の厚み)が 1 GPa を超える場合がある. Cold pressure を含まない EOS

を使って重力入りの計算を行うと静水圧平衡の初期条件を成立させることができず、計算開始直後に自重でつぶれてしまうという非現実的な挙動になってしまう。

ここで余談ではあるのだが、数値流体計算に固体物性を導入することがいかに難しいのか、ということを書いておきたい。式(3.2.1.4)でみたように流体の運動は圧力勾配で支配されるため、圧力を精度良く計算することが肝要である。固体と気体の EOS の式(3.2.2.1)と(3.2.2.2)から圧力の変化率 dP/P を調べてみよう。誤差伝播の考え方を参考にすると、 dP/P は

$$\frac{dP}{P} = \sqrt{\left[\frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_{T} d\rho \right]^2 + \left[\frac{1}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho} dT \right]^2} \quad (3.2.2.3)$$

と書けるであろう。理想気体の EOS(3.2.2.2)を用いて右辺の偏微分を計算すると、気体の場合は

$$\frac{dP}{P} = \sqrt{\left(\frac{d\rho}{\rho} \right)^2 + \left(\frac{dT}{T} \right)^2} \quad (3.2.2.4)$$

となり、密度や温度の変化に対して圧力が線形に追従することがわかる。固体の場合は $P_{\text{thermal}}(\rho, T)$ と $P_{\text{cold}}(\rho)$ の関数形が定まらなると計算を実行できないが近似的な値を求めることは可能である。(3.2.2.3)の平方根の第一項目中の偏微分は等温体積弾性率 K_T を用いて置き換える¹⁸。

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_T = \frac{K_T}{\rho} \quad (3.2.2.5)$$

密度一定条件であるので第二項目の Cold pressure の寄与は消える。 $P_{\text{thermal}}(\rho, T)$ は定積比熱 c_v と Grüneisen parameter Γ を使って

¹⁸ $K_T = -V \left. \frac{\partial P}{\partial V} \right|_T = \rho \left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_T$, $\rho = V^{-1}$ であることを使って式変形しました。

$$P_{\text{thermal}}(\rho, T) \sim \Gamma \rho C_v T \quad (3.2.2.6)$$

と近似できることを使うと第二項目の偏微分を計算できる。結局、固体の圧力の変化率 dP/P は

$$\frac{dP}{P} = \sqrt{\left(\frac{K_T}{P} \frac{d\rho}{\rho}\right)^2 + \left(\frac{dT}{T}\right)^2} \quad (3.2.2.7)$$

となる。これは固体の密度変化に対して圧力変化は K_T/P 倍に増幅されることを意味している¹⁹。岩石物質の K_T は典型的には~100 GPa に達する。例えば地球重力場で地表面から測って 10 km の地下にある物質の体積変化を考えてみよう。この物質にかかる静水圧 ρgh は~0.3 GPa である。このとき 1%の密度増加は~3 倍 (~300%)の圧力増加を引き起こすことになる。従って密度の僅かな振幅の数値振動が大きな圧力の数値振動を生む。これが流体計算中で固体を扱う際の難しさである。

話を戻そう。iSALE では Tillotson EOS と ANEOS の 2 つの EOS model を選択できるのであった。それぞれの EOS についての詳細な解説は上記の参考文献を参照してほしい²⁰。以下ではそれぞれの特徴を簡単に説明する。

Tillotson EOS は物質の相図を簡略化することで圧力 P を密度 ρ と内部エネルギー E の関数として解析的に表現する状態方程式である。Tillotson EOS を使った場合の物質の相図を図 3.2.2.1 に示す。

¹⁹ 理想気体の等温体積弾性率は圧力 P そのものです。これは定義から容易に導かれます。

²⁰ Melosh, 1989 の Appendix II にも各種 EOS の簡単な解説があります。

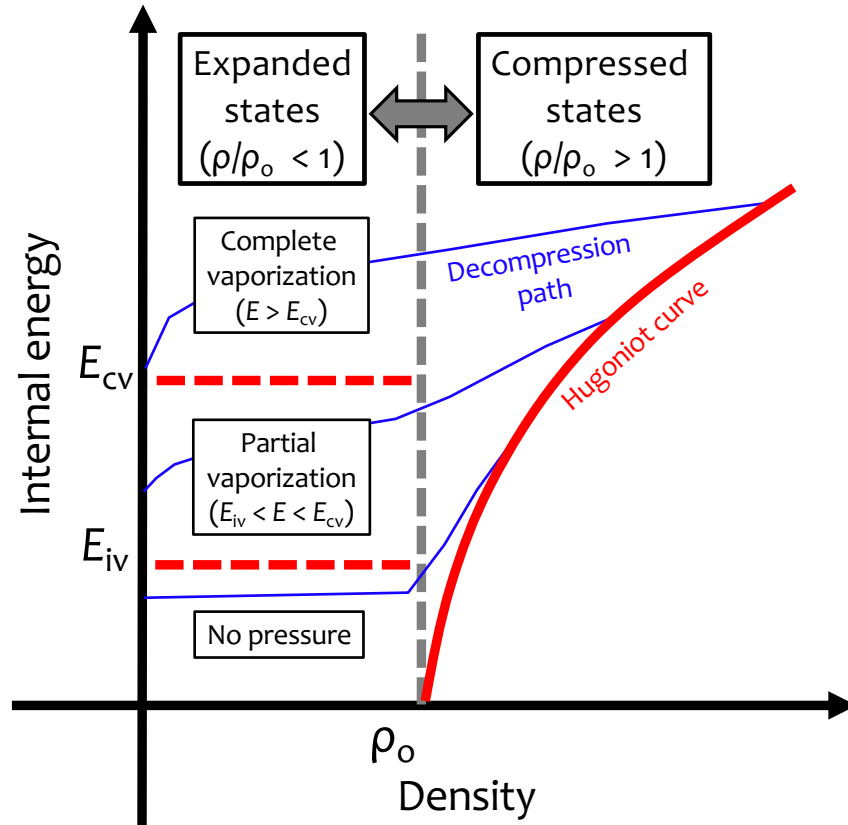


図 3.2.2.1. Tillotson EOS による物質の相図. Sugita and Schultz (2003b)の Fig.1 を参考にした。

このように Tillotson EOS では物質を圧縮状態($\rho \geq \rho_0$)と膨張状態($\rho < \rho_0$)に分ける。 ρ_0 は標準密度である。膨張状態では内部エネルギーに応じて 3 つの状態を考える。Tillotson EOS は密度と内部エネルギーの値によって以下の 2 つの解析表現をとる。

$$P = \left[a + \frac{b}{\left(\frac{E}{E_0 \eta^2} + 1 \right)} \right] \rho E + A\mu + B\mu^2 \quad (\rho \geq \rho_0 \text{ or } \rho < \rho_0 \ \& \ E < E_{iv}) \quad (3.2.2.8)$$

$$P = a\rho E + \left\{ \frac{b\rho E}{\left(\frac{E}{E_0 \eta^2} + 1 \right)} + A\mu \exp \left[-\beta \left(\frac{\mu}{\eta} \right) \right] \right\} \exp \left[-\alpha \left(\frac{\mu}{\eta} \right)^2 \right] \quad (\rho < \rho_0 \ \& \ E > E_{cv}) \quad (3.2.2.9)$$

ここで $\rho_0, a, b, E_0, A, B, \alpha, \beta, E_{iv}, E_{cv}$ はそれぞれ Tillotson EOS への入力パラメータ (合計 10 個) である。また $\eta = \rho/\rho_0, \mu = \eta - 1$ である。ここでの μ は平均分子量では

ないことに注意しよう。(3.2.2.8)式の条件は Compressed states もしくは cold expanded states, (3.2.2.9)式の条件は hot expanded states と呼ばれる。(3.2.2.8)式の第一項目は Thermal pressure, 第二, 第三項目が Cold pressure を表す。 $\rho < \rho_0$ かつ $E < E_{iv}$ の cold expanded states は蒸発していないことになるので, 凝縮相(固相 or 液相)を表している。このとき標準密度より大幅に密度が低下することは考えにくい。現実的には固体が破碎, もしくは液体が分裂し, 単位体積あたりの質量が低下している状況と考えられる²¹。このような状況では周辺物質に圧力を及ぼすことは考えられないので, 適当な密度で圧力を 0 にするという処理をする [Melosh, 1989].

衝撃圧縮条件では一般的に 10 GPa 以上で Thermal pressure が卓越する [e.g., Kurosawa et al., 2018; Kurosawa and Takada, 2019]. (3.2.2.8), (3.2.2.9)式はどちらも高エネルギー極限($E \gg E_0$)で

$$P \sim a\rho E \quad (3.2.2.10)$$

に漸近する。これは理想気体の EOS と同じ²²である。つまり $a = \gamma - 1$, γ は比熱比である。 $E \ll E_0 \eta^2$ かつ $\rho \sim \rho_0$ では

$$P \sim (a+b)\rho E + A\mu \quad (3.2.2.11)$$

に漸近する。これは Mie-Grüneisen EOS [e.g., Melosh, 1989, pp.231]と同じである。従って標準密度 ρ_0 における Grüneisen parameter Γ_0 ²³ を使って $a + b = \Gamma_0$ とすればよいことがわかる。ここで,

$$\Gamma_0 = \frac{\alpha K_0}{\rho_0 C_p} \quad (3.2.2.12)$$

で与えられる。 α , K_0 , C_p はそれぞれ熱膨張係数, 断熱体積弾性率, 定圧比熱である。

²¹ このような現象は iSALE では取り扱うことができないことに注意しましょう。

²² Compressed states の表式である(3.2.2.8)式が理想気体の状態方程式に漸近するので不思議に思われるかもしれません。理想気体は分子間ポテンシャルを無視できるほどに熱エネルギーが大きい状態を表現しているため, 高密度条件においても化学結合に比べて十分高いエネルギー密度の状態であれば同様に記述できます。

²³ Grüneisen parameter の重要性については土屋, 2004 の解説が参考になります。

ここでの α は熱膨張係数であり, Tillotson parameter の α とは異なることに注意されたい. Grüneisen 定数は「固体の熱弾性的情報を包含する物理量」[土屋, 2004] である. $E \ll 1$ かつ $\rho \sim \rho_0$ では

$$P \sim A\mu \quad (3.2.2.13)$$

に漸近する. これは Thermal pressure が無視できるときの理想液体の EOS と同じである. 従って Tillotson parameter A は断熱体積弾性率 K_0 に対応することがわかる.

ここまでみてきたように Tillotson EOS は様々な EOS を組み合わせることによって構成されている. その間の ρ - E 空間は状態量とその微分値がなめらかに接続するように内挿しているのである. 10 個の入力パラメータを入力する必要があるが, 標準密度 ρ_0 , バルク音速 c_0 (もしくは断熱体積弾性率 K_0), 蒸発開始内部エネルギー E_{iv} , 完全蒸発内部エネルギー E_{cv} , Fitting parameter E_0 と経験式から導かれる 5 つのパラメータとなっている. E_0 はエネルギーの次元を持つこととその表記から標準状態における内部エネルギーと誤解しやすいが, Shock Hugoniot data^{24,25}を再現するための Fitting parameter である. その値は経験的に蒸発に必要な内部エネルギーに近いが物質によって大幅に異なる. E_0 を適切に決定することで Hugoniot 曲線を精度よく再現することができる. 最後に Tillotson EOS の惑星科学応用上の 2 つの弱点を述べておこう. 1 つ目は Tillotson EOS はその枠組の中で内部エネルギー E と温度 T の関係を顕に予測することができない²⁶ ことである. すなわち Tillotson EOS を使った流体計算では温度を定量的に見積もることができない. 2 つ目は相図を単純化しすぎているために膨張状態 ($\rho < \rho_0$, Expanded states)における信頼性に乏しいことである. 従って蒸発過程を正確に扱わなければいけない問題には向かない.

ANEOS は熱統計力学の第一原理から導く状態方程式である. 統計力学から物

²⁴ ここでは 1 次元平板衝突実験から求められた衝撃波速度 V_s と粒子速度 u_p の関係のことを指しています. 経験的に $V_s = C_0 + s u_p$ という線形関係式が成立するため, 多くの場合 C_0, s が報告されています[e.g., Marsh, 1980; Trunin et al., 2001]. ここで C_0 はバルク音速, s は定数です.

²⁵ 余談ではありますが, 線形関係式と Rankine-Hugoniot 関係式(3.1.1)–(3.1.3)を連立すると, 4 つの未知数 ρ, u, e, P がすべて求まります. 従って線形関係式は Hugoniot 曲線上でのみ成立する状態方程式であると言えます.

²⁶ iSALE には内部エネルギーと比熱(定数)から近似的に温度 T を計算する機能が実装されており, 温度 T も出力されますが, 概算値であると考えたほうがよいでしょう.

質の Helmholtz free energy F は

$$F = -k_b T \ln Z \quad (3.2.2.14)$$

と定義される。ここで k_b はボルツマン定数、 Z は分配関数、すなわちとりえる状態数の総和である。Helmholtz free energy F の全微分は

$$dF = -SdT + \left(\frac{P}{\rho^2}\right)d\rho \quad (3.2.2.15)$$

である。ここで S はエントロピーである。このように Helmholtz free energy F は ρ, T の関数であるため流体計算と親和性が高い。ある ρ, T における F が既知であるならばその他の状態量は

$$S = - \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{\rho} \quad (3.2.2.16)$$

$$P = \rho^2 \left. \frac{\partial F}{\partial \rho} \right|_T \quad (3.2.2.17)$$

$$E = F + TS = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right) \quad (3.2.2.18)$$

$$C_v = \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_{\rho} = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \quad (3.2.2.19)$$

のように熱統計力学演算によって計算することができる。これだけ聞くと ANEOS は万能のように思えるが、実在物質の状態数を足し上げ Helmholtz free energy F を精確に計算することは現実的には不可能である。結局 Tillotson EOS と同様に ρ, T の値に応じた場合分けをしながら仮定をおいて計算することになる。ANEOS では Helmholtz free energy F を

$$F(\rho, T) = F_{\text{cold}}(\rho) + F_{\text{thermal}}(\rho, T) + F_{\text{electronic}}(\rho, T) \quad (3.2.2.20)$$

の 3 項に分けてそれぞれを計算する。熱力学の定義 $F = E + TS$ に従うと、温度に依

存しない $F_{\text{cold}}(\rho)$ は実は内部エネルギー $E_{\text{cold}}(\rho)$ と等しい。つまり(3.2.2.17)式が

$$P_{\text{cold}} = \rho^2 \left. \frac{\partial E_{\text{cold}}}{\partial \rho} \right|_T \quad (3.2.2.21)$$

となる。(3.2.2.21)を積分形にし $E_c(\rho)$ について表すと、

$$E_{\text{cold}} = \frac{1}{\rho_0} \int_1^\eta P_{\text{cold}}(\rho) \eta^{-2} d\eta \quad (3.2.2.22)$$

となる。ここで $\eta = \rho/\rho_0$ である。従って P_{cold} から E_{cold} を計算することで F_{cold} を求めたことと等価になる。強圧縮条件 ($\eta > 20$) においては物性が失われる²⁷ため Thomas-Fermi 統計モデルから P_{cold} を計算する。惑星科学的に興味のある領域の圧縮条件 ($\eta > 1$ かつ $\eta \sim 1$ のオーダー) では実験から求められた $P_{\text{cold}}-\rho$ 関係を用いる。中間領域の圧縮状態では内挿式を利用する。膨張条件 ($\eta < 1$) では原子間ポテンシャルを仮定することで P_{cold} を計算する。

$F_{\text{thermal}}(\rho, T)$ は高温低密度で理想気体、低温高密度で Debye-Grüneisen solid²⁸ と仮定することで(3.2.2.14)式の分配関数 Z の計算を実行して求める。中間領域は特殊な内挿式を用いて求める²⁹[Melosh, 2007]。

$F_{\text{electronic}}(\rho, T)$ は電離した電子が担う Helmholtz free energy F である。Saha ionization model を用いて電離度を計算し、自由電子の分配関数から F を計算する。高温で電離が起こる場合には重要になるが、惑星科学で興味ある程度のエネルギー密度では重要でないことが多い[e.g., Melosh, 2007]。

3.2.3. 人工粘性

一般的な岩石のバルク音速は $3\text{--}6 \text{ km s}^{-1}$ 程度である[e.g., Melosh, 1989, Table AII.2]。それに対して小惑星帯における最頻衝突速度は 4.4 km s^{-1} である[Bottke et al., 1994]ので、天体衝突現象で励起される圧縮波の伝播速度は多くの場合バル

²⁷ 全てのバンドギャップが潰れ、物質の個性を失った状態になります。

²⁸ 物質をあるシステムサイズに閉じ込めたフォノンの集合であると仮定するモデル。格子振動エネルギーをフォノンが持つ量子エネルギーとして扱うことで状態数を計算します。

²⁹ Jay Melosh 教授が「ANEOS uses a clever scheme (originally invented by the Russians!) to interpolate between these limits. 」と評しています。

ク音速を超える。従って少なくとも衝突点近傍の物質には衝撃波が伝播することになる。月や火星のような天体への衝突速度はさらに速い[e.g., Ito and Malhotra, 2006]. 衝撃波を補足可能であること、は天体衝突研究に使用する数値流体計算コードの必須条件といえる。しかし式(3.2.1.1)–(3.2.1.3)でみたように流体方程式は連続変化を前提にしており、衝撃波のような不連続面は原理的に扱うことができない。これは階段関数をフーリエ級数展開した場合に有限個の周期関数では表現できないことを思い出すと理解できるであろう。何も工夫なしに衝撃波伝播を式(3.2.1.1)–(3.2.1.3)で解くことは、階段関数をフーリエ級数展開し、格子サイズ Δx 程度の波長を下限とする次数で打ち切って近似することと同様になり、不連続面近傍で著しい数値振動を生むことになる。数値振動している状況を想定すると、圧力勾配によって圧力の「谷」に質量、運動量、エネルギーが流れ込み、次のタイムステップでは圧力の「山」を形成する。このように数値振動が一度起こってしまうと周辺格子へ伝播していつてしまう。また数値振動により密度や内部エネルギーが負の値を取ると、圧力を正常に計算することができずに計算が破綻する(NaN³⁰が発生する)。

この困難を解決するために iSALE では von Neumann & Richtmyer (1950)で提案された人工粘性項を導入³¹することで数値振動を減少させる [e.g., Davison, 2010]. 人工粘性(圧力の次元を持つ)は以下のように運動方程式に加えられる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial(P+q)}{\partial x} \quad (3.2.3.1)$$

$$q = \begin{cases} -a_1 \rho C_s \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + a_2 \rho \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \Delta x^2 & \left(\frac{\partial u}{\partial x} < 0\right) \\ 0 & \left(\frac{\partial u}{\partial x} > 0\right) \end{cases} \quad (3.2.3.2)^{32}$$

ここで a_1, a_2 は人工粘性係数である。(3.2.3.2)式の場合分けにより、物質が圧縮される場合に人工粘性が働き、人工的に昇圧させることがわかる。先に述べた圧力の「谷」へ物質へ流れ込もうとするのを抑制するので結果として数値振動を抑

³⁰ NaN = Not a Number, ああ...見たくない...

³¹ 人工粘性の導入は衝撃波補足の唯一の方法ではありません。隣接格子間のリーマン問題を解くことによって衝撃波を扱う方法(Riemann solver)もあります。

³² $\frac{\partial u}{\partial x}$ が負なので第一項目に負の符号をつけて q が正の値をとるようにしています。

える効果がある。(3.2.3.2)式は速度の空間微分に対して対称でないため流体運動を非可逆にする。この人工粘性の導入には物理的な意味がある。Rankine-Hugoniot 関係式(3.1.1)–(3.1.3)は衝撃波面前後の質量, 運動量, エネルギーの保存側であることを述べた。熱力学の定義に従って計算すると実は衝撃波面の前後でエントロピーは保存せず, 衝撃圧縮によって上昇する[e.g., Ahrens and O’Keefe, 1972]. (3.2.3.2)式の非可逆性はこのエントロピー上昇を表現していることに対応するのである。

人工粘性を導入することによって数値振動を抑えることはできるが, 衝撃波面は鈍ってしまうことに注意しよう。人工粘性係数の大きさによるが, iSALE 開発チームの推奨値を使った場合は衝撃波面をおよそ 5–10 格子(半値幅で 3 格子程度)で表現する [Johnson et al., 2014; Kurosawa et al., 2018]. この特徴は格子サイズを設定する際に重要となるので覚えておこう。

3.2.4. 弾性体モデル

流体計算に弾性体挙動を取り込むためには運動方程式の圧力 P を応力テンソル σ_{ij} で以下のように置き換える。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x} \quad (3.2.4.1)$$

物質の構成方程式(Constitutive equations)を思い出すと, 応力テンソル σ_{ij} は

$$\sigma_{ij} = K_0 \varepsilon_{kk} \delta_{ij} + S_{ij} \quad (3.2.4.2)$$

$$S_{ij} = 2G \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (3.2.4.3)$$

である。ここで K_0 , G , ε_{ij} , S_{ij} はそれぞれ断熱体積弾性率, 剪断弾性率, 歪み(もとの長さに変形後の長さの比), 偏差応力テンソルである。また δ_{ij} はクロネッカーデルタである。応力テンソル σ_{ij} の対角項 σ_{ii} の大きさは圧力 P であるので式(3.2.4.2)は,

$$\sigma_{ij} = -P \delta_{ij} + S_{ij} \quad (3.2.4.4)$$

と置き換えられる. 3.2.2 項でみたように圧力 P は EOS から計算可能である. 以下では偏差応力テンソルの計算方法をみていこう. iSALE では等方性物質を仮定しており断熱体積弾性率と剪断弾性率をポワソン比 ν で

$$G = 3K_0 \frac{1-2\nu}{2(1+\nu)} \quad (3.2.4.5)$$

と結びつける. Euler 法で歪み ε_{ij} そのものを直接計算することは難しい. そこで偏差応力テンソルの時間微分を考えると

$$\frac{\partial s_{ij}}{\partial t} = 2G \left(\dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{1}{3} \dot{\varepsilon}_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (3.2.4.6)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.2.4.7)$$

となる. ここで $\dot{\varepsilon}_{ij}$ は歪速度である. $\dot{\varepsilon}_{ij}$ はタイムステップ毎に計算可能な量である. 従ってタイムステップ $n+1$ における偏差応力テンソルは式(3.2.4.6)を使って 1 つ前のタイムステップ n の値から

$$s_{ij}^{n+1} = s_{ij}^n + \frac{\partial s_{ij}^n}{\partial t} \Delta t \quad (3.2.4.8)$$

のように更新することで計算することができる.

3.2.5. 塑性体モデル

式(3.2.4.4)から偏差応力テンソルは圧力に抗する弾性力(復元力)を与えることがわかる. このままでは歪みの大きさに比例して弾性力が働くことになるが, 実際の物質はある応力の閾値を超えると塑性変形を起こし, 復元力は失われる. このときの応力を降伏応力 Y と呼ぶ. iSALE では物質強度を降伏応力で表現している. 計算の各タイムステップで計算される応力の大きさが物質の降伏応力を

超えた場合にそれ以上の復元力をかけないという処理を施せば、数値流体計算中で塑性変形を表現できることになる。式(3.2.4.4)でみたように応力は方向によって異なる値を持つ。また座標系のとり方が変わると値が変化してしまうため、 σ_{ij} のすべての方向への寄与を用いて座標のとり方に依存しないスカラー量を作ることが望ましい。iSALE-2D では円柱座標の 2 次の応力不変量 J_2 を

$$J_2 = \frac{1}{6}[(s_{rr}-s_{zz})^2 + (s_{zz}-s_{\theta})^2 + (s_{\theta}-s_{rr})^2] + s_{rz}^2 \quad (3.2.5.1)$$

と計算し、その平方根が降伏応力よりも大きくなった場合に応力テンソルを

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + S_{ij} \times \frac{Y}{\sqrt{J_2}} \quad (\sqrt{J_2} > Y) \quad (3.2.5.2)$$

と置き換えることによって塑性体を表現する。第一項目が第二項目に対して卓越する場合は強度の影響を無視でき、流体方程式に漸近する。

4. iSALE に実装されている物質モデル

3.2 節で数値流体計算の支配方程式群について解説した。本章では iSALE 中で実在物質を表現するために実装されている種々の物質モデルについて解説する。しかし、それぞれのモデルの一つ一つに対していくつもの先行研究が行われてきたものであり、iSALE で実装されているモデルが必ずしも現在の最高峰というわけではないことを注意しておこう。ここでは使用頻度が高いと思われる 3 つのモデルについて概要を解説するに留めるので、その先は読者の自学自習に委ねる。4.1 節で降伏応力モデル、4.2 節で熱弱化モデル、4.3 節で微小空隙圧密モデルについて述べる。

4.1. 降伏応力(物質強度)モデル

3.2.5 項で降伏応力 γ を導入することにより、数値流体計算中で塑性体を表現することを述べた。iSALE には物質に応じた降伏応力モデルが実装されている。以下では特に使用頻度が高いと思われる完全流体(4.1.1)、粉体(4.1.2)、岩石(4.1.3)、そして金属(4.1.4)について簡単に解説する。なお各項表題の括弧内の大文字英字は iSALE 内でのそれぞれのモデルの名称である。

4.1.1. 完全流体(HYDRO)

完全流体に剪断応力はかからないのでポワソン比は 0.5 である(式(3.2.4.5)参照)。iSALE では降伏応力モデルに HYDRO model を選択すると自動的にポワソン比 0.5 が入力され、偏差応力テンソルの計算値は強制的に 0 になる。このとき iSALE は完全な数値流体計算コードとなる。衝突速度が 10 km s^{-1} を超えるような衝突が起こることを想定する場合、衝突点近傍では物質強度の影響がほとんどなくなるため、完全流体で計算すれば十分である。また降伏応力モデルを用いて計算を行う際に同じ衝突条件の完全流体計算の結果と比較すると、物質強度がどのような役割を果たすのか?を理解するのに役立つ。

4.1.2. 粉体(DRPR)

iSALE では粉体を取り扱うための DRPR model が実装されている。粉体を押し固めると硬くなることは経験として知っているであろう。これは Mohr-Coulomb 則として知られている。iSALE には Drucker and Prager (1952)によって定式化された Drucker-Prager model (DRPR model)が実装されている。このモデルでは降伏応

力が

$$Y = \min(Y_{\text{coh}} + \mu P, Y_{\text{lim}}) \quad (4.1.2.1)$$

と与えられる。ここで Y_{coh} , μ , Y_{lim} はそれぞれ Cohesion(ゼロ圧力における降伏応力), 内部摩擦係数, 臨界応力である。Cohesion は van der Waals 力, 静電気力, 磁力, 液膜による架橋, 粘着物質の存在, 焼結などによる構成粒子の固結など様々な要因で発生し得る凝集力に起因する [e.g., 荒川, 1975]。臨界応力は摩擦変形から塑性変形への遷移点に対応する。

式(4.1.2.1)でわかるように DRPR model は簡便である。また Y_{coh} と μ の値を変化させることで, 単一モデルで様々な圧力依存性を持つ降伏応力モデルをつくることができる。物質強度とその圧力依存性が結果にどのような影響を与えるかを系統的に調べるといった目的に適している[e.g., Elbeshausen et al., 2009]。

4.1.3. 岩石(ROCK)

iSALE の降伏応力モデルの中でおそらく最もよく利用されているモデルが岩石を扱う ROCK model であろう。岩石は歪みが蓄積すると破壊され脆くなる。ROCK model ではこの挙動を無傷の岩石を表現する Lundborg model [Lundborg, 1968]と前項 4.1.1 で述べた DRPR model を組み合わせて表現する。無傷の岩石の降伏応力 Y_i と破壊後の岩石の降伏応力 Y_d を, 0 から 1 の値をとる Damage parameter D を用いて

$$Y = (1-D)Y_i + DY_d \quad (4.1.3.1)$$

のように線形結合する。Lundborg model は, 成形した試料に一様圧力を掛けながら変形させ降伏点を調べるといった静的変形試験の結果から経験式を導いたものである。無傷の岩石の降伏応力 Y_i は

$$Y_i = Y_{\text{coh},i} + \frac{\mu_i P}{1 + \frac{\mu_i P}{Y_{\text{lim}} - Y_{\text{coh},i}}} \quad (4.1.3.2)$$

となる。ここで添字 I (intact)は無傷であることを示す。破壊された岩石の降伏応

力 Y_d は、岩石が粉砕されて粉体になったと考えて DRPR model を適用し、

$$Y_d = \min(Y_{\text{coh},d} + \mu_d P, Y_i) \quad (4.1.3.3)$$

と表す。添字 d(damaged)は破壊されたことを示す。(4.1.3.3)は(4.1.2.1)と同じ形式だが Y_d は Y_i を超えないという条件に変わっていることに注意しよう。

ROCK モデルは Damage parameter D を記述する Damage model とセットで使用する。Damage parameter D は累積歪 ϵ_{tot} と破壊を起こす臨界歪 ϵ_f を使って、

$$D = \min\left(\frac{\epsilon_{\text{tot}}}{\epsilon_f}, 1\right) \quad (4.1.3.4)$$

と定義される。累積歪 ϵ_{tot} は 3.2.5 項で応力不変量を導入したのと同様に全方向への寄与を考慮した歪速度不変量 $\dot{\epsilon}_{\text{inv}}$ を用い

$$\epsilon_{\text{tot}} = \sum_1^n \dot{\epsilon}_{\text{inv}}^n \Delta t \quad (4.1.3.5)$$

$$\dot{\epsilon}_{\text{inv}}^n = \left\{ \frac{1}{6} [(\dot{\epsilon}_{rr}^n - \dot{\epsilon}_{zz}^n)^2 + (\dot{\epsilon}_{zz}^n - \dot{\epsilon}_{\theta}^n)^2 + (\dot{\epsilon}_{\theta}^n - \dot{\epsilon}_{rr}^n)^2] + \dot{\epsilon}_{rz}^n \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.1.3.6)$$

と計算される。ここで上添字 n はべき乗でなくタイムステップ n (時刻 n ステップ目)のことである。臨界歪 ϵ_f には定数を与えるモデル(SIMPLE), 臨界歪の圧力依存性を導入したモデル(IVANOV), 臨界歪の圧力依存性が脆性, 延性, 塑性変形領域で切り替わるモデル(COLLINS)が実装されている。

4.1.4. 金属(JNCK)

iSALE には金属の挙動を表現する Johnson-Cook model [Johnson and Cook, 1983] が実装されている。計算中で天体の金属核を考慮したい場合, あるいは衝突実験の再現計算をしたい場合などに有用である。JNCK model では金属の降伏応力は

$$Y = (A + B\epsilon^N)(1 + C \ln \dot{\epsilon}) \left[1 - \left(\frac{T - T_{\text{ref}}}{T_m - T_{\text{ref}}} \right)^M \right] \quad (4.1.4.1)$$

と与えられる。ここで A, B, C, N, M は実験データと合わせるための Fitting parameters(定数), T_m は融点の温度, T_{ref} は参照温度である。金属の降伏応力が歪み, 歪速度, 温度に依存することを表現した形式となっている。

4.2. 熱弱化モデル(THSOFT)

4.1.4 項で JNCK model(金属に適したモデル)には温度が上がると降伏応力が低下する効果が含まれていることを述べた。同様に岩石物質も温度が上がると降伏応力が低下することが知られている[e.g., Hacker and Kirby, 1993]。特に岩石物質の温度が融点に達すると強度を失って完全流体として振舞うと近似してよい。ところが DRPR model, ROCK model にはその効果は考慮されていない。そこで iSALE には Ohnaka (1995)で定式化された熱弱化モデル(Thermal softening model)が実装されている。このモデルでは降伏応力の温度依存性を

$$Y(T) = Y_c \tanh \left[\xi \left(\frac{T_m}{T} - 1 \right) \right] \quad (4.2.1)$$

として導入する。ここで ξ は定数である。室温では $Y(T_{ref}) = Y_c$, 融点温度では $Y(T_m) = 0$ となる。DRPR model, ROCK model などを使用する際に THSOFT model を合わせて使用することで、岩石物質の熱弱化の効果のある程度取り込むことができる。

実在物質の融点は圧力依存性を持つことが知られている。従って式(4.2.1)中の T_m にも圧力依存性を導入することが望ましい。iSALE には温度-圧力平面上での熔融曲線を

$$T_m(P) = T_{m0} \left(\frac{P}{a} + 1 \right)^{\frac{1}{c}} \quad (4.2.2)$$

と近似的に表現できる機能が実装されている。ここで T_{m0} は標準状態における融点である。式(4.2.2)は Simon approximation と呼ばれる[e.g., Poirier, 1991; Wünnemann et al., 2008]。 a, c は Fitting parameters(定数)である。

4.3. 微小空隙圧密モデル(WUNNEMA)

空隙が存在する物質に衝撃波が伝播すると衝撃圧縮時に行われる仕事量($P\Delta V$)が増える. 図 4.3.1 に空隙を含む物質と含まない物質の Hugoniot 曲線の比較を示す.

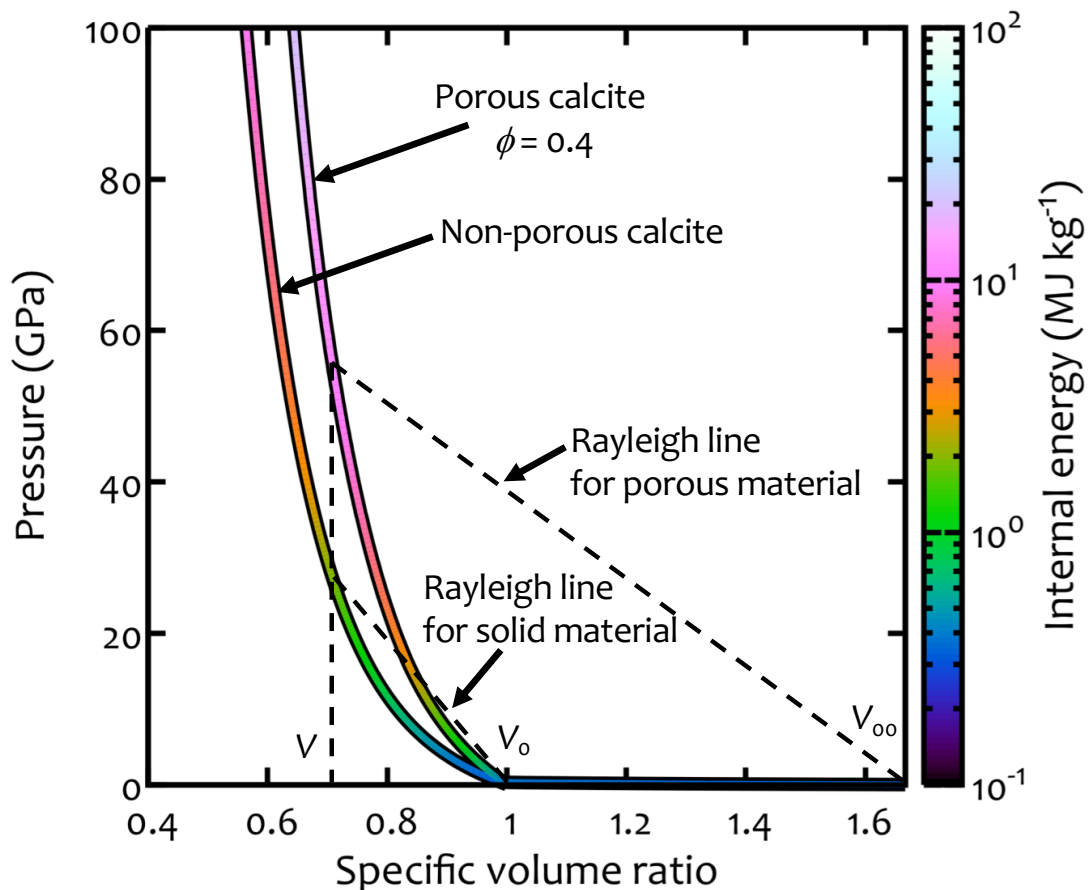


図 4.3.1. 空隙を含む物質と含まない物質の比体積-圧力平面上の Hugoniot 曲線. ある体積 V まで衝撃圧縮した際の仕事は Rayleigh line の下の三角形の面積に等しい.

同体積まで圧縮した場合(図中の V), 圧縮で行われた仕事が大きくなるので熱圧力によって空隙を含む物質の Hugoniot 曲線の方が高圧になる[Ahrens and O'Keefe, 1972]. 空隙を含む場合, 衝突点近傍の物質の内部エネルギーに多くのエネルギーが分配されることになり, 衝撃波強度の減衰率が大きくなり, 衝突点遠方への運動エネルギー輸送効率は小さくなる[Wünnemann et al., 2006]. 従って衝突現象全体を通じてエネルギー分配の様相が変わることになる. 空隙の

圧密の効果を流体方程式, 状態方程式に無矛盾に取り込むことは惑星科学研究を進める上で重要である. 空隙率 ϕ は

$$\phi = 1 - \frac{\rho}{\rho_s} \quad (4.3.1)$$

と定義される. ここで添字 s は空隙を含む物質の物質部分(matrix)の状態量を指す. 空隙率は直感的に理解しやすい量ではあるが, この後の式展開の都合上, Distension α を

$$\alpha = \frac{1}{1-\phi} = \frac{\rho_s}{\rho} \quad (4.3.2)$$

のように導入する. このとき空隙を含む物質の状態方程式は

$$P = f(\rho, E) = f\left(\frac{\rho_s}{\alpha}, E\right) \quad (4.3.3)$$

と表せるだろう. この状態方程式は実は

$$P = \frac{1}{\alpha} P_s(\rho_s, E) \quad (4.3.4)$$

と変形できる. この式は空隙を含む物質の状態量を, $1/\alpha$ の補正を加えるだけで空隙を含まない物質の状態方程式から計算可能であることを意味しており, 有用である[Wünnemann et al., 2006]. 式(4.3.3)と(4.3.4)の関係は経験的に成立することが古くから知られていたが, Holsapple (2008)によって熱統計力学計算から以下のように導かれることが示された. 空隙を含む物質は物質部分(matrix)と空洞部分(void)の混合物である. ここで重要な点は空洞部分には物質がなく, 当然エネルギーも持っていないということである. 空隙を含む物質の内部エネルギー, 比熱, エントロピーはすべて物質部分が担うことになり, 単位質量あたりのそれらの値は空隙を含まない場合の状態量と等しい. つまり, $E = E_s, C_v = C_{vs}, S =$

S_s が成立する. 内部エネルギーと比熱の関係から温度 T も同様に空隙を含まない場合の値と同じになる. 空隙を含む物質の Helmholtz free energy F は

$$F = E - TS = E_s - TS_s = F_s \quad (4.3.5)$$

となり, 空隙を含まない場合と等しい. 式(3.2.2.17)を用いて Helmholtz free energy F から圧力 P を計算すると

$$\begin{aligned} P &= \rho^2 \left. \frac{\partial F_s}{\partial \rho} \right|_T \\ &= \rho^2 \left. \frac{\partial F_s}{\partial \rho_s} \right|_T \left. \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho} \right|_T \\ &= \alpha \rho^2 \left(\frac{P_s}{\rho_s^2} \right) \\ &= \frac{1}{\alpha} P_s \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

となり, 式(4.3.4)を導くことができる.

Distension α は計算の毎タイムステップで計算可能な体積歪 ε_v

$$\varepsilon_v = \int_{V_0}^{V'} \frac{dV}{V} = \ln\left(\frac{V'}{V_0}\right) \quad (4.3.7)$$

から求めると数値流体計算と相性がよい. ここで全ての微小空隙が潰れるまで物質部分の比体積 v_s は変化しないと仮定すると, 式(4.3.7)は

$$\begin{aligned} \varepsilon_v &= \ln\left(\frac{V' v_s}{V_s V_0}\right) \\ &= \ln\left(\frac{\alpha}{\alpha_0}\right) \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

と変形できる. α_0 は圧密前の初期の Distension である. この式を変形すれば, 体

積歪の関数として Distension

$$\alpha = \alpha_0 e^{\varepsilon_v} \quad (4.3.9)$$

を得ることができる。実在物質を圧密する際には物質部分の弾性、摩擦、圧縮、熱膨張の効果は無視できない。iSALE ではそれらの効果も考慮し、5つの入力パラメータを用いて実在物質の圧密曲線を再現する定式化がなされている。興味のある読者は Wünnemann et al. (2006), Collins et al. (2011)を参照してほしい。

5. 数値流体計算研究を行う際の注意事項

4章までで iSALE の数値解法と実装されている物質モデルの概略を述べた。本章では数値衝突流体計算を行う上での注意事項を述べる。iSALE では計算が破綻することはあまりなく、計算を実行すれば何かしらの結果を得ることができる。しかし、その結果が物理的に確からしいのか否かについてはユーザ自身が注意深く検討しなければならない。本章では iSALE を用いた数値流体計算における注意事項を述べる。初学者にありがちな数値流体計算全般への過度な期待について 5.1 節、数値拡散について 5.2 節、物質境界面の非物理的挙動について 5.3 節、結果の空間解像度依存性について 5.4 節、最後に iSALE 計算を進めていく際のコツについて 5.5 節で述べることにする。

5.1. iSALE で解ける量, 解けない量

完全流体の支配方程式について式(3.2.1.1)-(3.2.1.3)で示した。3, 4 章の内容も踏まえて iSALE で実際に解いている方程式系を改めて書き下すと、質量, 運動量, エネルギー保存則はそれぞれ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (5.1.1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = g_i + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial s_{ji}}{\partial x_i} - \frac{\partial (P+q)}{\partial x_i} \right) \quad (5.1.2)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + u_i \frac{\partial e}{\partial x_i} = -\frac{(P+q)}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} S_{ij} \dot{\epsilon}_{ij} \quad (5.1.3)$$

となる。(5.1.2)式中の g_i は重力加速度である。当たり前なのだが、重要な点はこの式に含まれていない効果は iSALE では解けないということである。エネルギー保存則(5.1.3)から明らかのように熱伝導や放射などによる温度変化は扱えない。惑星科学で想定されているような天体衝突現象のサイズスケールでは熱伝導や放射による冷却のタイムスケールよりも、膨張による冷却のそれの方が短い [e.g., Sugita and Schultz, 2002] ので、衝突過程を扱う上ではあまり重要でないと考えられているからである。しかし、実験室スケールで同様に扱えるかどうかは自明でないことには注意が必要である。ユーザ自身が見積もって評価しなければならない。

ANEOS は惑星科学分野においては最頻出の EOS である。しかし、3.2.2 項で述べたように多くの仮定をおいて構築されていることには注意が必要である。また熱統計力学の原理から出発しているため、熱力学平衡に達していることを仮定している。気体を扱えるからといって希薄な領域まで適用することはできない。多くの物質について熔融や高圧電離に伴う比熱の増加の効果が含まれておらず、温度を過大評価する傾向にあることが知られている [e.g., Melosh, 2007; Kurosawa et al., 2012; Kraus et al., 2012].

式(5.1.2), (5.1.3)中に導入された偏差応力テンソルによって iSALE は物質の弾塑性体挙動を扱えることを 3.2.4 項, 3.2.5 項で述べた。しかし、式(3.2.4.5)の導入時に述べたように iSALE では等方性物質を仮定していることには注意が必要である。従って結晶軸の異方性が圧縮波の伝播に与える影響は扱うことができない。これは標的物質のバルク音速よりも遅い衝突速度における衝撃波の減衰率の推定などを行う際には問題になり得る。

5.2. 数値拡散

数値拡散は格子法の数値流体計算につきまとう問題である。現象を理解するために簡単な 1 次元問題を考えてみよう。図 5.2.1a に示すような物理量プロファイルが粒子速度 u で正の向きに移流するとする。このとき厳密解はこのプロファイルを保ったまま正の向きに移動するだけである。黒塗り丸はそれぞれの格子上での値、実線が時刻 $t = 0$ での厳密解、破線が 1 タイムステップ後($t = \Delta t$)の厳密解とする。図 5.2.1b は 1 タイムステップ後の様子である。緑線は格子状の点を線形補間したものである。このように数値計算上ではもともとのプロファイルを保てず、線形補間プロファイルが緑破線のように移流させることになる。更にもう 1 タイムステップ進めた場合($t = 2\Delta t$)の結果を図 5.2.1c に示す。同様に赤線がこの時刻での厳密解、緑線は格子上の値の線形補間プロファイルである。厳密解プロファイルに対して滲んでしまっていることがわかる。支配方程式に散逸項が含まれていなくても、連続体を差分化して移流する際に物理量が数値的に拡散してしまう。このような数値拡散を避けるための差分化の方法(CIP 法 [e.g., Yabe and Aoki, 1991; Yabe et al., 1991])など)も提案されているが、現行の iSALE では採用されていない。図 5.2.1 は過剰に空間解像度が粗い系をとり、数値拡散がわかりやすいように図示したが、程度の差はあっても数値拡散の影響はうけてしまうことには注意が必要である。iSALE では特に内部エネルギー(温度)に数

値拡散の影響が出やすいようである [e.g., Bowling et al., 2020].

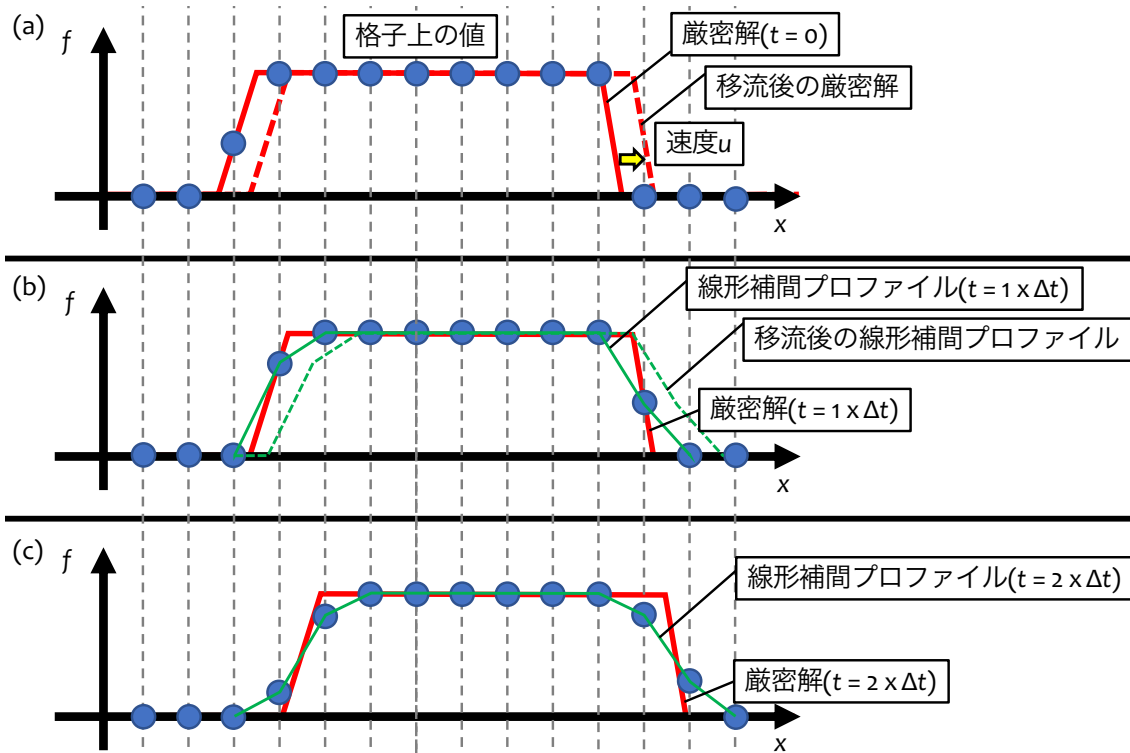


図 5.2.1. 数値拡散模式図. 矢部, 内海, 尾形(2003)の図 2.3 を参考に作図.

5.3. 物質境界面における非物理的挙動

3.2.3 項で人工粘性の重要性について述べた. 本節では人工粘性を導入して衝撃波を補足する場合, 物質境界面に不可避の数値誤差が現れることを示そう. 図 5.3.1 は iSALE 2D で 5 km s^{-1} で直進する 2 枚の花崗岩平板が原点 $x = 0$ において左右から正面衝突(つまり 10 km s^{-1} の衝突に相当)する状況を解いたものである. 上のパネルから順に密度, 粒子速度, 圧力, 温度を示している. 1次元平板衝突問題であるので, Rankine-Hugoniot 関係式(3.1.1)–(3.1.3)と状態方程式から衝撃圧縮状態の密度, 圧力, 温度を計算できる. 同質量, 同物質の平板衝突なので, 圧縮状態での粒子速度は 0 である. これらの解析解を水平点線で示している. また Rankine-Hugoniot 関係式から計算される衝撃波速度から求めた衝撃波面位置の時間変化を垂直破線で示した($x > 0$). 全体的には解析解をよく再現しており, iSALE は固体同士の衝突による状態量の変化を正しく解けると言える. しかし, 接触境界面($x = 0$)において密度(図 5.3.1 の一番上)と温度(図 5.3.1 の一番下)で

それぞれアンダーシュート、オーバーシュートが生じていることがわかる。図 5.3.2 に接触境界面($x = 0$)近辺を拡大して示す。密度については 1 格子、温度については 3-5 格子が解析解から大きく逸脱することがわかる。また接触境界面周りの 3-5 格子にエネルギーが集中するため、その外側の温度は解析解よりも~10%程度低い。図 5.3.3 には衝撃波面周辺を拡大して示す。この計算では 4-5 格子に渡って衝撃波面が鈍っていることがわかる。また 3.2.2 項で述べたように圧力には他の状態量に観られない数値振動(± 10 GPa 程度、衝撃圧力の解析解は 137 GPa)が起こっていることがわかる。計算条件によって程度の差はあるが

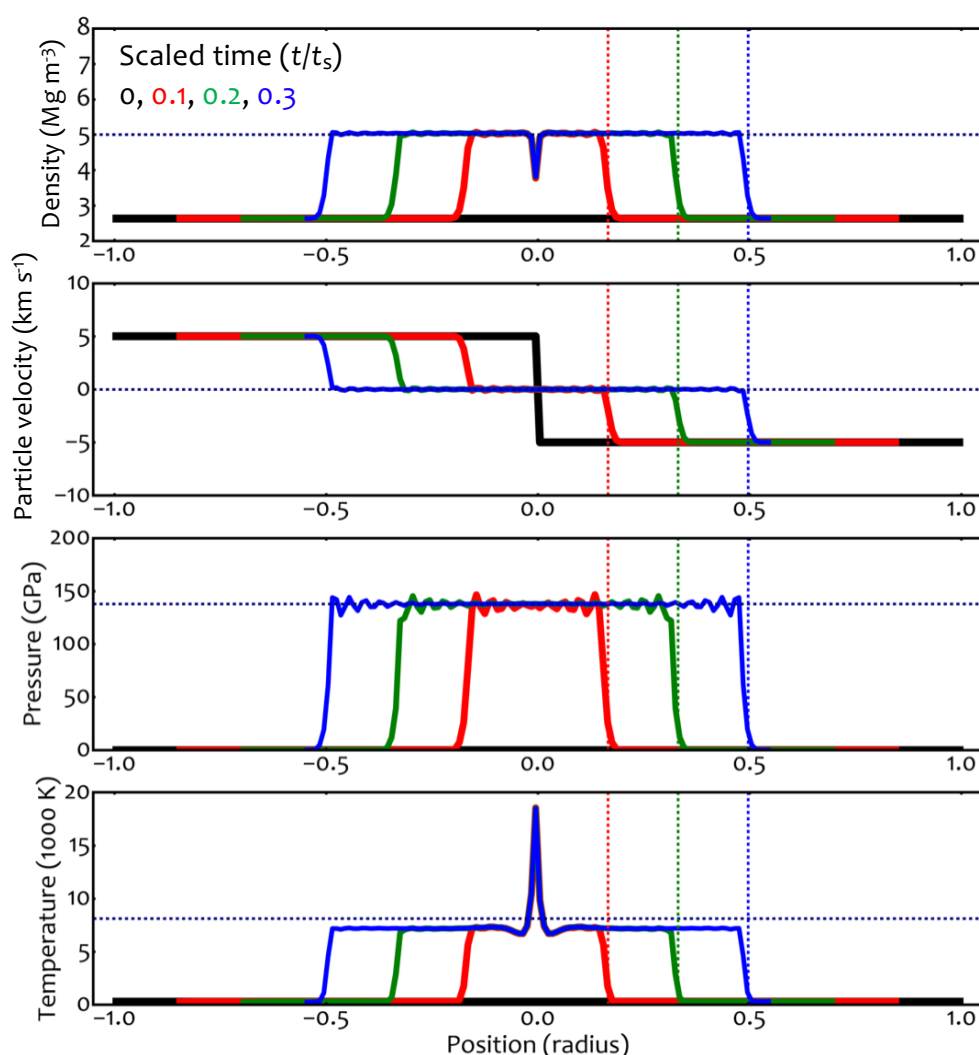


図 5.3.1. iSALE による平板衝突の計算結果。衝突からの経過時刻を規格化時間 t_s 別に色違いの線で示した。ここで $t_s = D/v_i$, D は花崗岩円板直径, v_i は衝突速度である。破線は解析解(本文参照)。

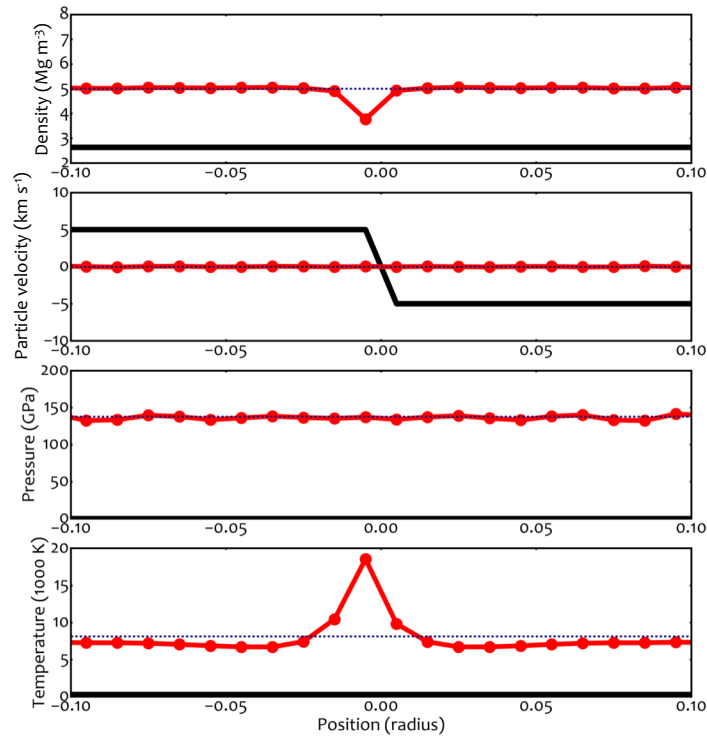


図 5.3.2. 図 5.3.1 の接触境界面近辺を拡大して示した. 丸点は格子点を表す.

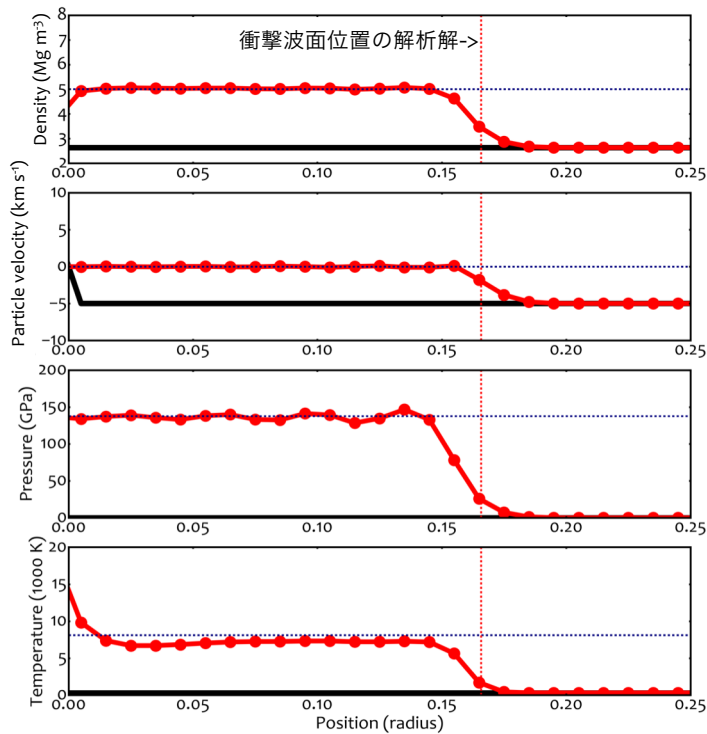


図 5.3.3. 図 5.3.1 の衝撃波面近辺を拡大して示した. 丸点は格子点を表す. 垂直破線は衝撃波面位置の解析解.

iSALE による計算ではこの程度の不定性は避けられないことを念頭に置かなければならない。

上記の例では物質同士の接触境界面について述べたが、自由表面との物質境界面でも同様に注意が必要である。上記の例で衝撃波面は 4-5 格子に渡って鈍ることを示した。自由表面は圧力 0 の境界条件であるため、圧力が上昇しない。従って初期に自由表面から 4-5 格子以浅に配置されていた物質の衝撃圧力や温度は人工的に低く計算されてしまうことになる [e.g., DeCarli et al., 2007; DeCarli, 2013; Kurosawa et al., 2018]。衝突速度に迫るような速度を持つ高速度放出物はほぼ全てがこのような浅い領域から放出されるので、結果の解釈には注意が必要である。

5.4. 結果の空間解像度依存性

式(3.2.1.5)-(3.2.1.6)の差分式は $\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$ で式(3.2.1.1)-(3.2.1.3)の流体方程式に漸近する。計算にかかる実時間を短くするために時間刻み Δt と格子サイズ Δx を過剰に大きくとると、現実と異なる結果を与えることは想像ができるであろう。衝突天体を何格子で分割するか(Numbers of cells per projectile radius, n_{CPPR})は空間解像度の指標である。前節で衝撃波面が 4-5 格子に渡って表現されることを述べた。従って最低でも $n_{\text{CPPR}} = 10$ 程度は必要であろう。先行研究によれば最大衝撃圧力分布を精度良く計算するには $n_{\text{CPPR}} > 20$ にする必要がある [e.g., Pierazzo et al., 2008]。以下では自身の計算に必要な n_{CPPR} を決定するための一般的な指針を述べよう。

まず基本的な計算設定(入力ファイル)は完成しており、計算のスナップショットを確認する限りでは期待通りの挙動を示していることを仮定しよう。次に iSALE に同梱されている Python をベースとした pySALEPlot を用いて計算出力を解析し、求めたい量(例えば放出物質質量、熔融質量など)を計算することになるが、ここでもとりあえずそれらしい値を出せるところまで完成しているとしよう。この状態で n_{CPPR} をいくつか変化させた計算を行い、同じ解析スクリプトで結果が n_{CPPR} に対して変化するかを確かめるのである [e.g., Wakita et al., 2017; Kurosawa and Genda, 2018; Wakita and Genda, 2019; Wakita et al., 2019]。結果が変化しなくなる(収束する)中で小さめの n_{CPPR} を採用することが計算コスト(計算にかかる実時間、計算結果を保管するためのストレージにかかる費用など)の観点で理想的である。このような例を図 5.4.1 に示す [Kurosawa and Genda, 2018]。計

算の内容は元文献を参照して頂くとして、この図は横軸に衝突からの経過時刻、縦軸に2つの異なる条件を満たす加熱質量(Ar loss & Melt)を示している。規格化時間 $tt_s^{-1}=1$ 以降では結果が n_{CPPR} の値に対して収束していることがわかる。この結果をもとにこの論文では $n_{\text{CPPR}} = 50$ を基準値として、加熱質量の衝突速度依存性を調べた。この方法を使う場合の注意点は許容できる限界まで n_{CPPR} を大きく変化させることである。これは狭い範囲で結果が収束していたとしても、それ以上空間解像度を挙げた場合に結果が変化する可能性は否定できない³³からである。

許容できる計算時間³⁴のギリギリまで n_{CPPR} を上げて結果が収束しない場合も頻繁にある。このような場合は n_{CPPR} の逆数に対して結果をプロットするのが有効である。 n_{CPPR}^{-1} に対して結果が線形に変化していれば、空間解像度に対して1次精度で収束しているとみることができ [e.g., Wünnemann et al., 2008; Kurosawa et al., 2018; Suetsugu et al., 2018; Kurosawa et al., 2021]. この直線を $n_{\text{CPPR}}^{-1} = 0$ まで外挿したときの y 切片は $n_{\text{CPPR}} \rightarrow \infty$ の値とみてよいだろう。このような例を図 5.4.2 に示す[Kurosawa et al., 2018]. 同様にここでは計算内容の解説は行わない。この図は横軸に n_{CPPR}^{-1} 、縦軸にある条件を満たす標的天体由来の放出物質量をプロットして

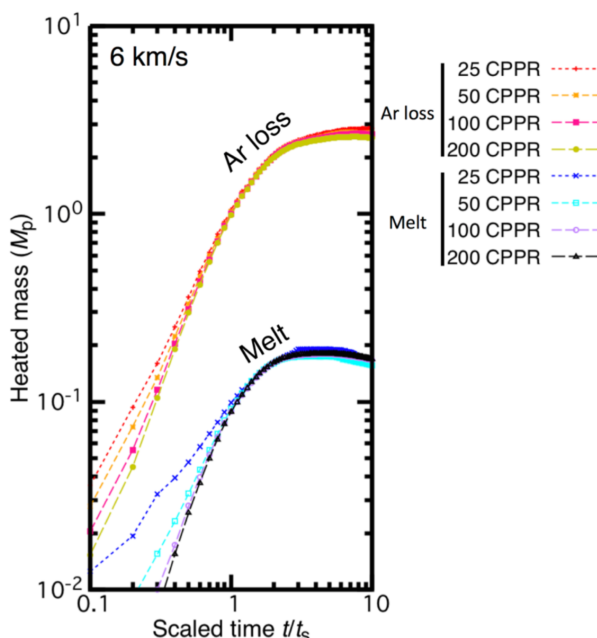


図 5.4.1. 規格化時間に対する加熱質量. Kurosawa and Genda (2018)より引用.

³³ 論文投稿時の査読コメントあるあるかと思えます...

³⁴ 人にもよりますが、長くても1-2ヶ月程度ではないでしょうか...?

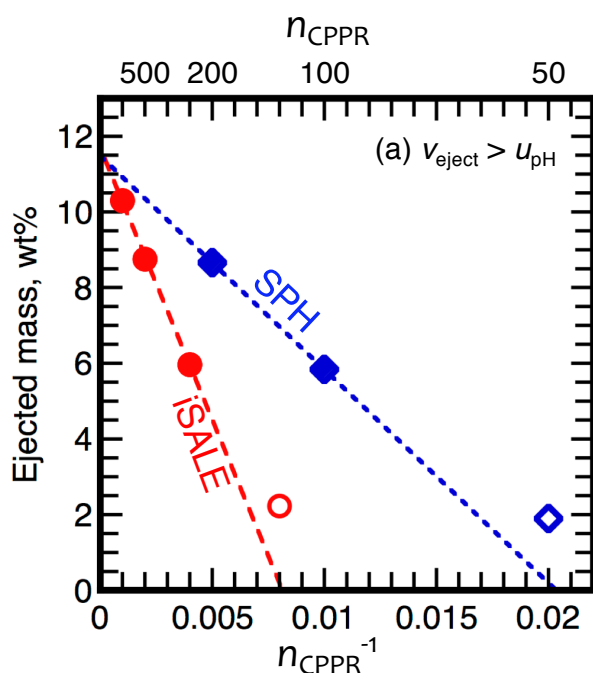


図 5.4.2. n_{CPPR} の逆数に対する放出物質質量. 破線は最小 2 乗法で求めた塗り潰し点の最尤一次関数. Kurosawa et al. (2018)より引用.

いる. iSALE とラベルが書かれた赤点は $n_{\text{CPPR}} > 200$ で線形になっていることがわかる. n_{CPPR}^{-1} に対して結果が線形になっていないときは外挿で生じる不定性が大きいので避けるべきであろう.

5.5. iSALE 計算を進めていく際のコツ

4 章で iSALE には多様な物質モデルが実装されていることを述べた. そして 2 章で説明したようにソースコードを編集することなく, 2 つの入力ファイルの編集作業のみで多様なモデル群を自在に自身の計算に取り入れることができる. 便利な反面, ユーザ自身の自由度が高く, 初学者には高い壁となり得る. そこで本節では iSALE 計算を進めていくコツをいくつか述べよう. これらは実際に筆者が辿った道筋である.

まずは基本操作に慣れることが重要であろう. iSALE には豊富な例題が用意されている. 片っ端から走らせて描画してみると iSALE でどんな計算を行うことができるのか, 想像がわくことであろう. 中には計算終了まで数時間~数日を要する例題もあるが, 計算終了までにかかる時間は出力ファイルの output.txt0 から概算可能(実践編 4.2 節を参照)である. cfCA の計算サーバが計算をしてくれてい

る間は他の研究を進めることができる。

iSALE examples (実践編 3.3 節に簡単な解説あり.)

http://www.isale-code.de/redmine/projects/isale/wiki/Example_problems

例題をすべて描画してみると自分が取り組みたい問題に近い設定の例題が見つかるであろう。その入力ファイルを編集し、先行研究の再現計算をしてみると、iSALE がどの程度自身の研究に役立ってくれるか、を想像できるであろう。数値衝突計算の先行研究だけでなく、軸対称の現象が起こると期待できる垂直衝突の室内衝突実験であれば、入力ファイルの工夫次第で近い条件の計算を実施することも可能である。ここまでできれば、iSALE の基本操作にはかなり慣れてきているはずである。

iSALE は 1980 年に発表された SALE code[Amsden et al., 1980]から 40 年に渡り改良されてきた歴史を持つ数値流体計算コードである。研究を行っていく上でどうしても Black box として処理せざるを得ない部分が現れる。このときはユーザ自身で得られた結果が物理的に正しいのか否かを判断する必要がある。例えば 5.3 節で行ったように 1 次元平板衝突問題を解いたときに解析解を再現するか否か、衝突速度、空隙率、臨界応力などのパラメータを変化させたときに結果の変化は妥当かどうか、などを調べるとよいであろう。このような検討を進める上で判断を助けてくれるのは衝突物理に関する基礎知識である。数値衝突計算と平行して基礎勉強もしっかり行う必要がある。

最後に心に留めておいて欲しいのは iSALE 計算が本当に必要かどうか?は実是要検討事項である。論文掲載に耐える計算結果を出すにはやはりかなりの時間が必要である。iSALE は自由度が高く探索できるパラメータ空間が広いために、自分が行おうとしている研究を遂行する上で必要な計算のみをピンポイントで実施していかないと泥沼にハマりがちである。解析的に解ける問題を数値計算しようとしていたり、iSALE ではできない、もしくはむかない計算を行おうとしている例を何例か見かけてきている。惑星科学分野での衝突現象に関する研究は 1960 年代から行われており、iSALE よりも長い歴史がある[e.g., 水谷, 1980; Melosh, 1989]. たいていの衝突現象のオーダー推定程度は解析モデルや先行研究の実験データから可能である。まずは文献調査をしっかり実施して、数値計算で解くべき問題とパラメータを整理することが肝要である。

謝辞

iSALE の主要開発メンバである, Gareth Collins, Kai Wünnemann, Boris Ivanov, H. Jay Melosh, Dirk Elbeshausen, Tom Davison の各氏に深謝致します。本テキストは過去の講習会, 及び iSALE users group in Japan のみなさまとのやりとりで得られた知見, 過去の講習会などでの応答を元にして執筆されました。特に 2014 年に開催された第 1 回 iSALE 勉強会の講師である, 高田淑子氏, 玄田英典氏, 中村昭子氏の講義資料 [[https://www.wakusei.jp/~impact/wiki/iSALE/?第 1 回+iSALE 勉強会](https://www.wakusei.jp/~impact/wiki/iSALE/?第1回+iSALE%20勉強会)]は本テキスト執筆にあたり大いに参考にさせて頂きました。2020 年度まで講師を努めて頂いた脇田茂氏には本稿のもとになった 2020 年度版のテキストの執筆にあたって有益なコメントを頂きました。iSALE 講習会 2021 参加者用 ML は千秋博紀氏に作成して頂きました。皆様に謝意を表します。最後に講習会開催に向けご尽力頂いた国立天文台天文シミュレーションプロジェクトの皆様、特に受講者への事細かな対応を行っていただいた加納香織氏に感謝申し上げます。

参考になる websites

CfCA HP

<https://www.cfca.nao.ac.jp>

CfCA 共同利用計算機の利用資格・利用申請資格

<https://www.cfca.nao.ac.jp/node/2>

iSALE HP (本家)

<https://isale-code.github.io>

iSALE users group in Japan wiki (過去の勉強会, 講習会の資料が公開されている)

<https://www.wakusei.jp/~impact/wiki/iSALE/>

参考文献

- Ahrens, T.J., O'Keefe, J.D., 1972. Shock melting and vaporization of lunar rocks and materials. *Moon* **4**, 214–249.
- Amsden, A.A., Ruppel, H.M., Hirt, C.W., 1980. A simplified ALE computer program for fluid flow at all speeds. *Los Alamos National Laboratories Report LA-8095*. Los Alamos, New Mexico. 101 pp.
- Araki, H., Tazawa, S., Noda, H., Ishihara, Y., Goossens, S., Sasaki, S., Kawano, N., Kamiya, I., Otake, H., Oberst, J., Shum, C., 2009. Lunar global shape and polar topography derived from Kaguya-LALT laser altimetry. *Science* **323**, 897-900, DOI: 10.1126/science.1164146
- Artemieva, N., Ivanov, B., 2004. Launch of meteorites in oblique impacts. *Icarus* **171**, 84–101.
- Bottke, W.F., Nolan, M.C., Greenberg, R., Kolvoord, R.A., 1994. Velocity Distributions among Colliding Asteroids. *Icarus* **107**, 255–268. <https://doi.org/10.1006/icar.1994.1021>.
- Bowling, T.J., Johnson, B.C., Wiggins, S.E., Walton, E.L., Melosh, H.J., Sharp, T.G., 2020. Swell time at high pressure of meteorites during impact ejection from Mars. *Icarus* **343**, 113689.
- Collins, G.S., 2014. Numerical simulations of impact crater formation with dilatancy. *Journal of Geophysical Research - Planets* **119**, 2600–2619.
- Collins, G.S., Elbeshausen, D., Davison, T.M., Wünnemann, K., Ivanov, B., Melosh, H.J., 2016. iSALE-Dellen manual. *figshare*, <https://doi.org/10.6084/m9.figshare.3473690.v2>.
- Collins, G.S., Melosh, H.J., Ivanov, B.A., 2004. Modeling damage and deformation in impact simulations. *Meteorit. Planet. Sci.* **39**, 217–231.

- Collins, G.S., Melosh, H.J., Wünnemann, K., 2011. Improvements to the e-a porous compaction model for simulating impacts into high-porosity solar system objects. *Proceedings of the 11th Hypervelocity Impact Symposium* **38**, 434-439.
- Connrad, J.W., Nimmo, F., Fasset, C.I., Kamata, S., 2018. Lunar impact history constrained by GRAIL-derived basin relaxation measurements. *Icarus* **314**, 50-63.
- Davison, T.M., 2010. Numerical modelling of heat generation in porous planetesimal collision. *PhD. Thesis*, Department of Earth Science and Engineering, Imperial College London.
- DeCarli, P.S., Goresy, A.El, Xie, Z., Sharp, T.G., 2007. Ejection mechanisms for Martian Meteorites. In: *AIP Conference Proceedings*, **955**, pp. 1371–1374. doi:10.1063/1.2832979.
- DeCarli, P.S., 2013. Meteorites from Mars via a natural two-stage gas gun. *Proc. Eng.* **58**, 570–573. doi:10.1016/j.proeng.2013.05.065.
- de Niem, D., Kührt, E., Morbidelli, A., et al., 2012. Atmospheric erosion and replenishment induced by impacts upon the Earth and Mars during a heavy bombardment. *Icarus* **221**, 495–507. doi:10.1016/j.icarus.2012.07.032.
- Druker, D.C., Prager, W., 1952. Soil mechanics and plastic analysis or limit design. *Quarterly of Applied Mathematics* **10**, 157-165.
- Elbeshausen, D., Wünnemann, K., Collins, G.S., 2009. Scaling of oblique impacts in frictional targets: implications for crater size and formation mechanisms. *Icarus* **204**, 716–731. <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2009.07.018>.
- Elliott, J., Melosh, H. J., 2018. The effects of target heterogeneities on impact spallation and fragmentation. *LPS XXXIX*, 2664.

- Hacker, B.R., Kirby, S.H., 1993. High-pressure deformation of calcite marble and its transformation to aragonite under non-hydrostatic conditions. *Journal of Structural Geology* **15**, 1207-1222.
- Hamano, K., Abe Y., 2010. Atmospheric loss and supply by an impact-induced vapor cloud: Its dependence on atmospheric pressure on a planet. *Earth Planets Space* **62**, 599-610.
- Hanks, T.C. and Anderson, D.J., 1969. The early thermal history of the Earth. *Physics of the Earth and Planetary Interior* **2**, 19-29.
- Hartmann, W.K., 1970. Lunar cratering chronology. *Icarus* **13**, 209–301.
- Hartmann, W.K., 1984. Does crater “saturation equilibrium” occur in the Solar System? *Icarus* **60**, 56–74.
- Hartmann, W.K., 2005. Martian cratering 8: Isochron refinement and the chronology of Mars. *Icarus* **174**, 294-320.
- Hashimoto, G.L., Abe, Y., Sugita, S., 2007. The chemical composition of the early terrestrial atmosphere: formation of a reducing atmosphere from CI-like material. *J. Geophys. Res.* **112**, E05010, <http://dx.doi.org/10.1029/2006JE002844>.
- Head, J.N., Melosh, H.J., Ivanov, B.A., 2002. Martian meteorite launch: High-speed ejecta from small craters. *Science* **298**, 1752–1756.
- Holsapple, K.A., 2008. Porous Material Models for Impact Studies. In *Lunar and Planetary Institute Science Conference Abstracts*, volume **39** of Lunar and Planetary Institute Science Conference Abstracts, pages 2257–+.
- Hyodo, R., Kurosawa, K., Genda, H., Usui, T., Fujita, K., 2019. Transport of impact ejecta from Mars to its moons as a means to reveal Martian history. *Scientific Reports* **9**: 19833, <https://doi.org/10.1038/s41598-019-56139-x1>

- Ishimaru, R., Senshu, H., Sugita, S., Matsui, T., 2010. A hydrocode calculation coupled with reaction kinetics of carbon compounds within an impact vapor plume and its implications for cometary impacts on Galilean satellites. *Icarus* **210**, 411–423.
- Ito, T., Malhotra, R., 2006. Dynamical transport of asteroid fragments from the ν_6 resonance. *Advances in Space Research* **38**, 817–825.
- Ivanov, B.A., de Niem, D., Neukum, G., 1997. Implementation of dynamic strength models into 2D hydrocodes: application for atmospheric break-up and impact cratering. *Int. J. Impact Eng.* **17**, 375–386.
- Johnson, B.C., Bowling, T.J., Melosh, H.J., 2014. Jetting during vertical impacts of spherical projectiles. *Icarus* **238**, 13–22. <http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2014.05.003>.
- Johnson G.R., Cook, W.H., 1983. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures. *Seventh International Symposium on Ballistics*, Hague.
- Johnson, B.C., Melosh, H.J., 2012a. Formation of spherules in impact produced vapor plumes. *Icarus* **217**, 416–430.
- Johnson, B.C., Melosh, H.J., 2012b. Impact spherules as a record of an ancient heavy bombardment of Earth. *Nature* **485**, 75–77.
- Johnson, B.C., Melosh, H.J., 2013. Formation of melt droplets, melt fragments, and accretionary impact lapilli during a hypervelocity impact. *Icarus* **228**, 347–363, <http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2013.10.022>
- Johnson, B.C., Minton, D.A., Melosh, H.J., Zuber, M.T., 2015. Impact jetting as the origin of chondrules. *Nature* **517**, 339–341, doi:10.1038/nature14105.

- Kamata, S., Sugita, S., Abe, Y., Ishihara, Y., Harada, Y., Morota, T., Namiki, N., Iwata, T., Hanada, H., Araki, H., Matsumoto, K., Tajika, E., Kuramoto, K., Nimmo, F., 2015. The relative timing of Lunar Magma Ocean solidification and the Late Heavy Bombardment inferred from highly degraded impact basin structures. *Icarus* **250**, 492–503.
- Kieffer, S.W., 1977. Impact conditions required for formation of melt by jetting in silicates. In: Roddy, D.J., Pepin, R.O., Merrill, R.B. (Eds.), *Impact and Explosion Cratering*. Pergamon Press, pp. 751–769.
- Kobayashi, H., Tanaka, H., 2010. Fragmentation model dependence of collision cascades. *Icarus* **206**, 735–746, <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2009.10.004>.
- Kress, M.E., McKay, C.P., 2004. Formation of methane in comet impacts: Implications for Earth, Mars, and Titan. *Icarus* **168**, 475–483.
- Krijt, S., Bowling, T.J., Lyons, R.J., Ciesla, F.J., 2017. Fast litho-panspermia in the habitable zone of the TRAPPIST-1 system. *Astrophys. J. Lett.* **839** (L21).
- Knauth, L.P., Burt, D.M., Wohletz, K.H., 2005. Impact origin of sediments at the Opportunity landing site on Mars. *Nature* **438**, 1123–1128, doi:10.1038/nature04383
- Kraus, R.G., Stewart, S.T., Swift, D.C., Bolme, C.A., Smith, R.F., Hamel, S., Hammel, B.D., Spaulding, D.K., Hicks, D.G., Eggert, J.H., Collins, G.W., 2012. Shock vaporization of silica and the thermodynamics of planetary impact events. *Journal of Geophysical Research* **117**, E09009, doi:10.1029/2012JE004082
- Kurokawa, H., Kurosawa, K., Usui, T., 2018. A lower limit of atmospheric pressure on early Mars inferred from nitrogen and argon isotopic compositions. *Icarus* **299**, 443–459.
- Kurosawa, K., 2015. Impact-driven planetary desiccation: the origin of the dry Venus. *Earth Planet. Sci. Lett.* **429**, 181–190.

- Kurosawa, K., Genda, H., 2018. Effects of friction and plastic deformation in shock-comminuted damaged rocks on impact heating. *Geophysical Research Letters* **45**, <https://doi.org/10.1002/2017GL076285>
- Kurosawa, K. Genda, H., Azuma, S., Okazawa, K., 2021. The role of post-shock heating by plastic deformation during impact devolatilization of calcite (CaCO₃). *Geophysical Research Letters* **48**, e2020GL091130. <https://doi.org/10.1029/2020GL091130>
- Kurosawa, K., Kadono, T., Sugita, S., Shigemori, K., Sakaiya, T., Hironaka, Y., Ozaki, N., Shiroshita, A., Cho, Y., Tachibana, S., Vinci, T., Ohno, S., Kodama, R., Matsui, T., 2012. Shock-induced silicate vaporization. *Journal of Geophysical Research* **117**, E04007, doi:10.1029/2011JE004031
- Kurosawa, K., Okamoto, T., Genda, H., 2018. Hydrocode modeling of the spallation process during hypervelocity impacts: implications for the ejection of martian meteorites. *Icarus* **301**, 219–234.
- Kurosawa, K. Takada, S., 2019. Impact cratering mechanics: A forward approach to predicting ejecta velocity distribution and transient crater radii. *Icarus* **317**, 135-147, <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2018.06.021>
- Lundborg N., 1968. Strength of rock-like materials. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* **5**, 427–454.
- Marchi, S., Bottke, W.F., Cohen, B.A., Wünnemann, K., Kring, D.A., McSween, H.Y., De Sanctis, M.C., O'Brien, D.P., Schenk, P., Raymond, C.A., Russell, C.T., 2013. High-velocity collisions from the lunar cataclysm recorded in asteroidal meteorites. *Nature Geoscience* **6**, 303-307, DOI: 10.1038/NCEO1769.
- Marchi, S., Bottke, W.F., Elkins-Tanton, L.T., Biehaus, M., Wünnemann, K., Morbidelli, A., Kring, D.A., 2014. Widespread mixing and burial of Earth's Hadean crust by

- asteroid impacts. *Nature* **511**, 578–582. <http://dx.doi.org/10.1038/nature13539>.
- Marsh, S.P., 1980. *LASL Shock Hugoniot Data*, Univ. of Calif. Press, Berkeley.
- Melosh, H.J., 1984. Impact ejection, spallation, and the origin of meteorites. *Icarus* **59**, 234–260.
- Melosh, H.J., 1989. *Impact Cratering — A Geologic Process*. Oxford University Press, New York, pp. 112–125. Chap. VII.
- Melosh, H.J., 2007. A Hydrocode Equation of State for SiO₂. *Meteorit. Planet. Sci.* **42**, 2079–2098.
- Melosh, H.J., Ryan, E.V., Asphaug, E., 1992. Dynamic fragmentation in impacts: Hydrocode simulation of laboratory impacts. *J. Geophys. Res.*, **97**(E9):14735–14759.
- Melosh, H.J., Vickery, A.M., 1989. Impact erosion of the primordial atmosphere of Mars. *Nature* **338**, 487–489.
- Minton, D.A., Fassett, C.I., Hirabayashi, M., Howl, B.A., Richardson, J.E., 2019. The equilibrium size-frequency distribution of small craters reveals the effects of distal ejecta on lunar landscape morphology. *Icarus* **326**, 63-87.
- Mizutani, H., Matsui, T., Takeuchi, H., 1972. Accretion process of the Moon. *Moon* **4**, 476-489.
- Mukhin, L.M., Gerasimov, M.V., Safonova, E.N., 1989. Origin of precursors of organic molecules during evaporation of meteorites and mafic terrestrial rocks. *Nature* **340**, 46–49.
- Namiki, N., Iwata, T., Matsumoto, K., Hanada, H., Noda, H., Goosens, S., Ogawa, M., Kawano, N., Asari, K., Tsuruta, S., Ishihara, Y., Liu, Q., Kikuchi, F., Ishikawa, T., Sasaki, S., Aoshima, C., Kurosawa, K., Sugita, S., Takano, T., 2009. Farside gravity field of

- the Moon from four-way Doppler measurements of SELENE (Kaguya). *Science* **323**, 900–905. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1168029>.
- Neukum, G., Ivanov, B.A., 1994. Crater size distributions and impact probabilities on Earth from lunar, terrestrial-planet, and asteroid cratering data. In: *Hazards Due Comets and Asteroids*, p. 359.
- Neukum, G., Konig, B., Arkani-Hamed, J., 1975. A study of lunar impact crater size-distributions. *Moon* **12**, 201-229, <https://doi.org/10.1007/BF00577878>
- Nna-Mvondo, D., Khare, B., Ishihara, T., McKay, C.P., 2008. Experimental impact shock chemistry on planetary icy satellites. *Icarus* **194**, 822–835.
- Norman, M.D., Duncan, R.A., Huard, J.J., 2010. Imbrium provenance for the Apollo 16 Descartes terrain: Argon ages and geochemistry of lunar breccias 67016 and 67455. *Geochimica et Cosmochimica Acta* **74**, 763-783.
- Ohnaka, M., 1995. A shear failure strength law of rock in the brittle- plastic transition regime. *Geophysical Research Letters* **22**, 25–28.
- Penera, V., Jackson, A.P., Elkins-Tanton, L.T., Asphaug, E., 2018. Effect of reimpacting debris on the solidification of the lunar magma ocean. *Journal of Geophysical Research Planets* **123**, 1168-1191, <https://doi.org/10.1029/2017JE005512>
- Pierazzo, E., Artemieva, N., Asphaug, E., Baldwin, E.C., Cazamias, J., Coker, R., Collins, G.S., Crawford, D.A., Davison, T.M., Elbeshausen, D., Holsapple, K.A., Housen, K.R., Korycansky, D.G., Wunnemann, K., 2008. Validation of numerical codes for impact and explosion cratering: Impacts on strengthless and metal targets. *Meteoritics & Planetary Science* **43**, 1917-1938.
- Poirier, J.P., 1991. *Introduction to the physics of the Earth's interior*. Cambridge University Press, New York.

- Safronov, V. S., 1978. The heating of the Earth during its formation. *Icarus* **33**, 3-12.
- Salge, T., 2007. The ejecta blanket of the Chixulub impact crater, Yucatan, Mexico: Petrographic and chemical studies of the K-P section of El Guayal and UNAM boreholes. *PhD. Thesis*, the Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Humboldt-Universität zu Berlin.
- Senshu, H., Kuromoto, K., Matsui, T., 1972. Thermal evolution of a growing Mars. *Journal of Geophysical Research* **107**, 5118, doi:10.1029/2001JE001819.
- Shuvalov, V.V., 2009. Atmospheric erosion induced by oblique impacts. *Meteorit. Planet. Sci.* **44** (8), 1095–1105.
- Sleep, N.H., Zahnle, K., 1998. Refugia from asteroid impacts on early Mars and the early Earth. *J. Geophys. Res.* **103**, 28,529–28,544.
- Strom, R.G., Chapman, C.R., Merline, W.J., Solomon, S.C., Head, J.W., 2008. Mercury Cratering Record Viewed from Messenger's First Flyby. *Science* **321**, 79–81. <https://doi.org/10.1126/science.1159317>
- Strom, R.G., Malhotra, R., Ito, T., Yoshida, F., Kring, D.A., 2005. The origin of planetary impactors in the inner solar system. *Science* **309**, 1847-1850.
- Suetsugu, R., Tanaka, H., Kobayashi, H., Genda, H., 2018. Collisional disruption of planetesimals in the gravity regime with iSALE code: Comparison with SPH code for purely hydrodynamic bodies. *Icarus* **314**, 121-132, <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2018.05.027>
- Sugita, S., Matsui, T., 1992. Evolution of lunar topography by impact processes. *Geophysical Research Letters* **18**, 2125-2128.
- Sugita, S., Schultz, P.H., 2002. Initiation of run-out flows on Venus by oblique impacts. *Icarus* **155**, 265-284, doi:10.1006/icar.2001.6731

- Sugita, S., Schultz, P.H., 2003b. Interactions between impact-induced vapor clouds and the ambient atmosphere: 2. Theoretical modeling. *J. Geophys. Res.* **108**, 5052. doi:10.1029/2002JE001960.
- Svetsov, V.V., 2007. Atmospheric erosion and replenishment induced by impacts of cosmic bodies upon the Earth and Mars. *Solar Syst. Res.* **41** (1), 28–41.
- Tera, F., Papanastassiou, D.A., Wasserburg, G.J., 1974. Isotopic evidence for a terminal lunar cataclysm. *Earth Planet. Sci. Lett.* **22**, 1–21.
- Tillotson, J.H., 1962. Metallic Equations of State for Hypervelocity Impact *Technical Report GA-3216*, General Atomic Report.
- Thompson, S.L., Lauson, H.S., 1972. Improvements in the Chart D radiation-hydrodynamic code 3: Revised analytic equation of state: *Report SC-RR-71 0714*. Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico. 119 pp.
- Trunin, R.F., Gudarenko, L.F., Zhernokletov, M.V., Simakov, G.V., 2001. *Experimental Data on Shock Compression and Adiabatic Expansion of Condensed Matter*, Russ. Federal Nucl. Cent., Sarov, Russia.
- Veras, D., Armstrong, D.J., Blake, J.A., Gutiérrez-Marcos, J.F., Jackson, A.J., Schäfer, H., 2018. Dynamical and biological panspermia constraints within multi-planet exosystems. *Astrobiology* **18**, 1106-1122.
- Vickery, A.M., Melosh, H.J., 1987. The large crater origin for SNC meteorites. *Science* **237**, 738–743.
- von Neumann, J., Richtmyer, R. D., 1950. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *Journal of Applied Physics* **21**, 232-237.
- Wakita, S., Genda, H., 2019. Fates of hydrous materials during planetesimal collisions.

Icarus **328**, 58-68. <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2019.03.008>

Wakita, S., Genda, H., Kurosawa, K., Davison, T.M., 2019. Enhancement of impact heating in pressure-strengthened rocks in oblique impacts. *Geophysical Research Letters* **46**, 13678-13686. <https://doi.org/10.1029/2019GL085174>

Wakita, S. Matsumoto, Y., Oshino, S., Hasegawa, Y., 2017. Planetesimal collisions as a chondrule forming event. *The Astrophysical Journal* **834**:125. doi:10.3847/1538-4357/834/2/125

Wieczorek, M.A., Neumann, G.A., Nimmo, F., Kiefer, W.S., Taylor, G.J., Melosh, H.J., Phillips, R.J., Solomon, S.C., Andrew-Hanna, J.C., Asmar, S.W., Konopliv, A.S., Lemoine, F.G., Smith, D.E., Watkins, M.M., Williams, J.G., Zuber, M.T., 2013. The crust of the Moon as seen by GRAIL. *Science* **339**, 671-675, DOI: 10.1126/science.1231530.

Wünnemann, K., Collins, G.S., Melosh, H.J., 2006. A strain-based porosity model for use in hydrocode simulations of impacts and implications for transient crater growth in porous targets. *Icarus* **180**, 514–527.

Wünnemann, K., Collins, G.S., Osinski, G.R., 2008. Numerical modeling of impact melt production in porous rocks. *Earth and Planetary Science Letters* **269**, 530-539.

Yabe T., and T. Aoki 1991. A universal solver for hyperbolic equations by cubic-polynomial interpolation I. One-dimensional solver. *Comput. Phys. Commun.* **66**, 219–232.

Yabe, T., T. Ishikawa, P. Y. Wang, T. Aoki, Y. Kadota, and F. Ikeda 1991. A universal solver for hyperbolic equations by cubic-polynomial interpolation II. Two- and three-dimensional solver. *Comput. Phys. Commun.* **66**, 233–242.

荒川正文, 1975. 粉体粒子の付着と凝集. *色材* **48**, 165-176.

土屋卓久, 2004. 第一原理計算による圧力スケール検証 -Grüneisen parameter の体積依存性について-. *高圧力の科学と技術* **14**, 61-67.

水谷仁, 1980. *クレーター科学*, 東京大学出版会, 東京都文京区本郷.

諸田智克, 平田成, 2015. クレーターサイズ頻度分布からさぐる月惑星表面の地質進化. *日本惑星科学会誌 遊星人* **24**, 214-224.

矢部孝, 内海隆行, 尾形洋一, *CIP 法 原子から宇宙までを解くマルチスケール解法*, 森北出版株式会社, 東京都千代田区富士見.