

変動惑星圏シミュレーション

寺田直樹、加藤雄人、寺田香織(東北大)、
藤原均(成蹊大)、荻野竜樹、梅田隆行(名大STEL)、
石井克哉、永井亨(名大情報基盤センター)

名古屋大学HPC計算科学連携研究プロジェクト
成果報告シンポジウム
2012年5月9日

変動惑星圏シミュレーション

- 惑星大気・プラズマ環境におけるマイクロ秒～数十億年スケールの時間変動、及びその蓄積によって生じる惑星圏システムの多様性を明らかにすべく、本研究グループが現有する以下の数値シミュレーションコードを適用・拡充発展させ、惑星大気・プラズマの変動と進化に係る統合的知見を得ることを目的とする。

(a) 太陽系初期シミュレーション
[齋(D3)]

(b) 長期変動(数千万年～数十億年)シミュレーション
[寺田直、寺田香(PD)、古橋(M2)]

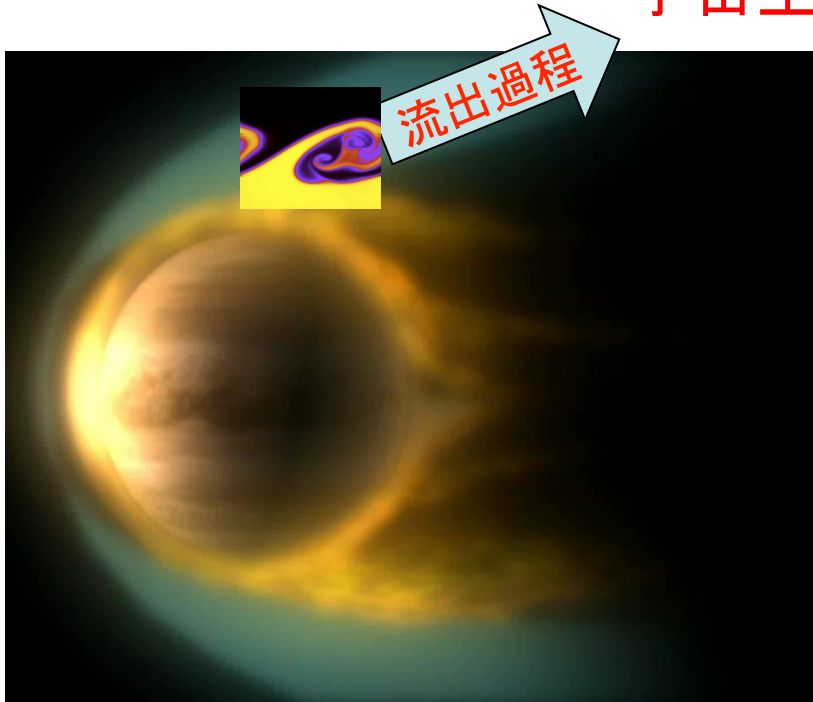
(c) 中期変動(数分～数十年)シミュレーション
[藤原、寺田直、寺田香(PD)、黒田(PD)、松田(D3)]

(d) 短期変動(マイクロ秒～秒)シミュレーション
[加藤、疋島(PD)]

大気・プラズマに係る
(特徴的な)
不可逆過程の蓄積

惑星からの大気・プラズマ流出

宇宙空間へ流出



火星・金星(非磁化惑星)

典型的な時間スケール

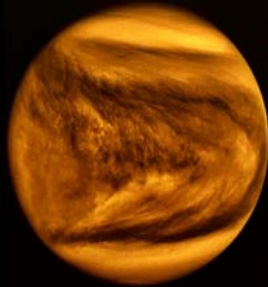
- ・ 分～時: 大気・プラズマ流出過程
- ・ 分～年: 境界条件(太陽や下層大気)の周期的変動、突発的変動
- ・ μ 秒～秒: 加熱・温度構造決定

- 大気・プラズマに係る(特徴的な)不可逆過程の蓄積
- 惑星大気・プラズマの流出、そしてそれによって引き起こされる惑星環境の進化が主研究課題

太陽風と太陽放射の影響によって、 大量の大気が宇宙空間に流出



水星：
大気喪失
(10^{-12})

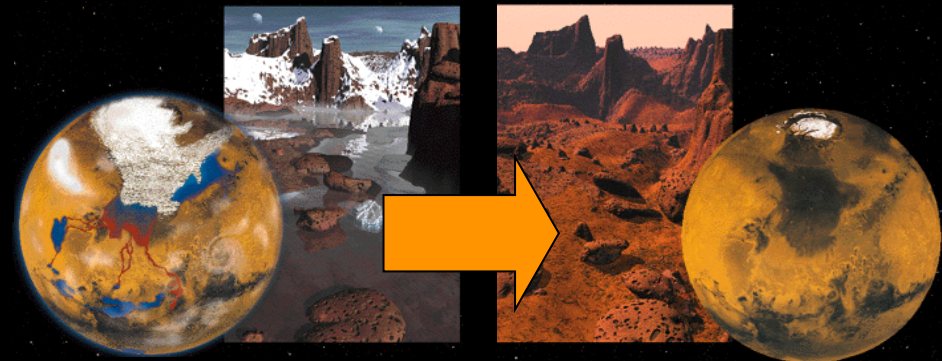


金星：
水喪失
(100)



地球：
水惑星
(1)

↑
表面大気圧

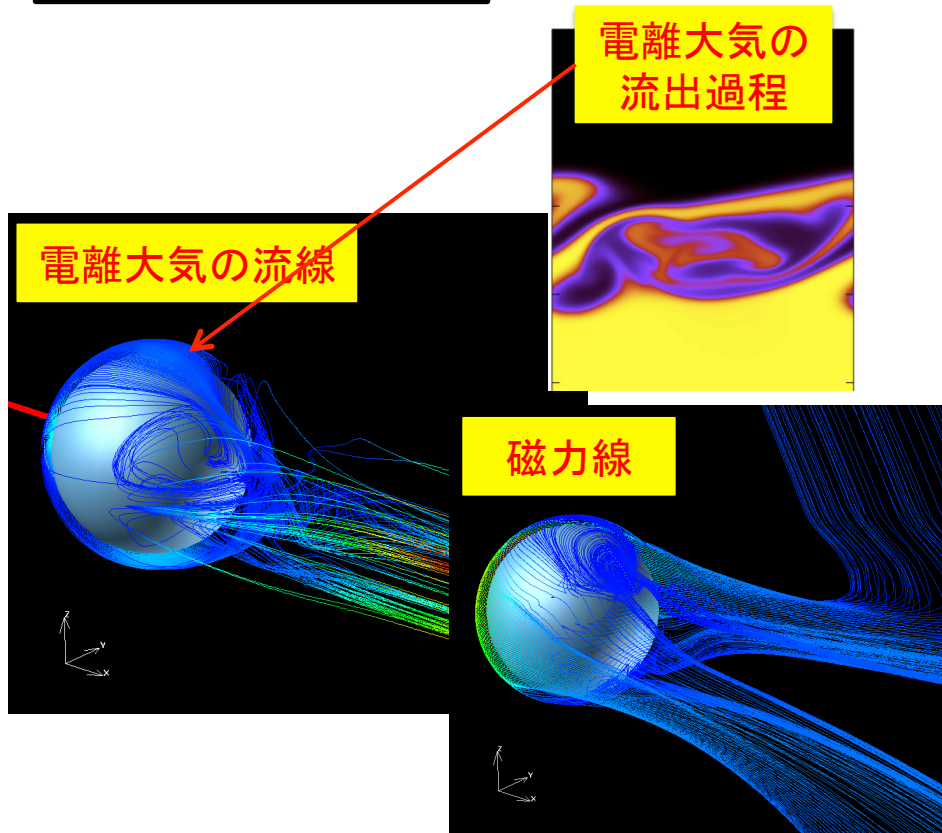


火星： 大気喪失が進行中
(10^{-2})

- 大気流出の理解は、惑星環境の進化と多様性を生む要因の理解に不可欠

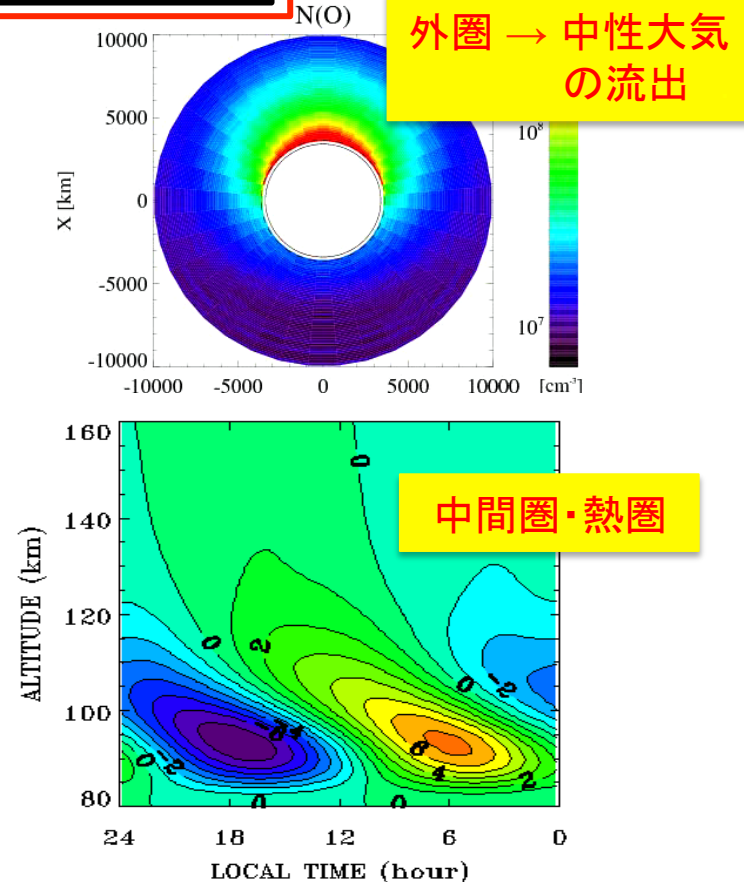
惑星からの大気・プラズマ流出

電離大気(プラズマ)の流出



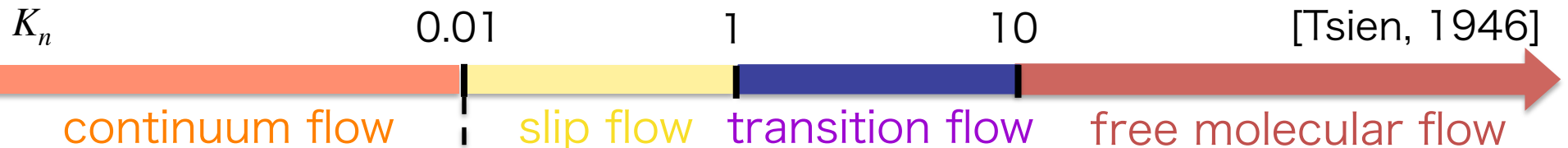
金星・火星電磁圏のMHDシミュレーション

中性大気の流出

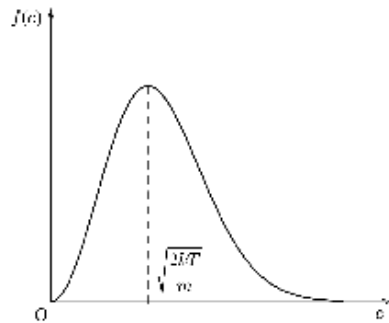


金星・火星の外圏・熱圏・中間圏シミュレーション

Gas dynamic regimes



- Local thermodynamic equilibrium (LTE)
 - Energy of molecules are distributed according to Maxwell distribution



Navier-Stokes equations

- First order moment of f

- Collision frequency is not high enough to maintain equilibrium.
- Momentum exchange via collisions between atmospheric molecules is still important.

- Collisions between atmospheric molecules are negligible.

Boltzmann equation

$$\frac{\partial}{\partial t}(nf) + c \frac{\partial}{\partial r}(nf) + F \frac{\partial}{\partial c}(nf) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} n^2 (f^* f_1^* - ff_1) c_r \sigma d\Omega dc_1$$

n : number density, f : velocity distribution function, c : molecular velocity, c_r : relative molecular speed, F : external force per unit mass, subscript * : post-collision values, f and f_1 : distribution functions of two different types of molecules of class c and c_1 , respectively, σ : collision cross-section, t : time, r : physical space, Ω : solid angle

惑星からの中性大気流出

外圏-熱圏 DSMC (Direct simulation Monte-Carlo) モデルの開発

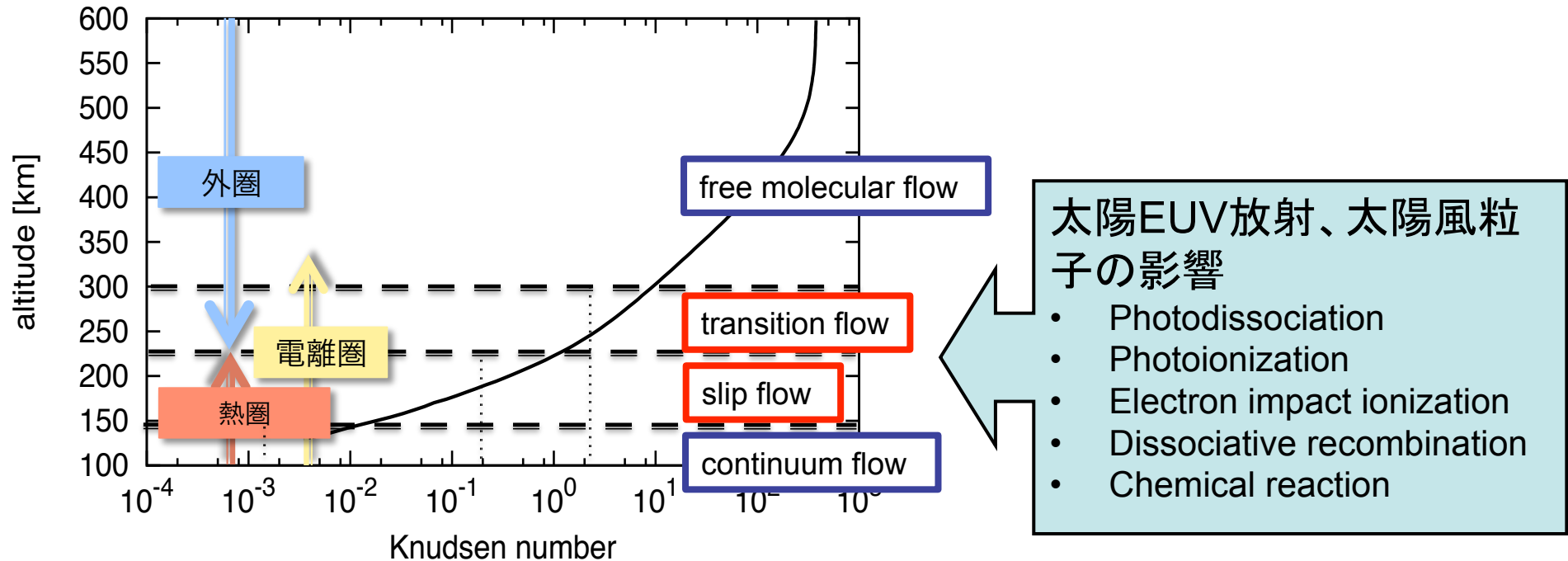
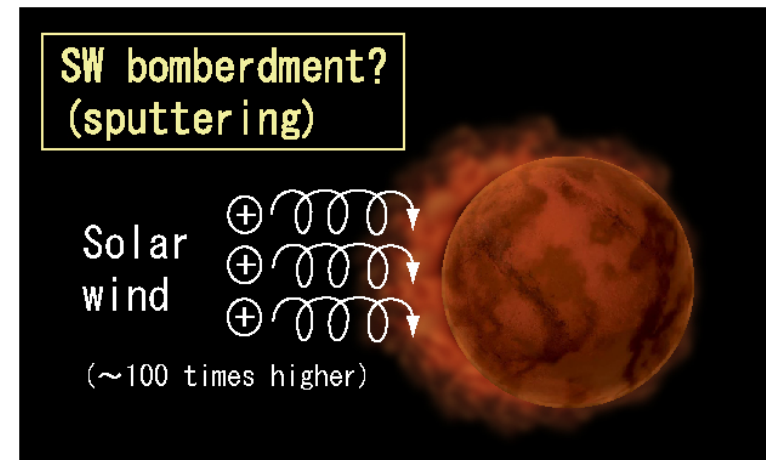


図. 火星超高層の分類

Difference between DSMC model and test particle Monte Carlo model

- test particle Monte Carlo model
 - only hot particles are followed
 - background thermal population remains fixed
 - hot particle transport do not change the thermal or vertical structure of background gases
 - sputtering [Leblanc and Johnson, 2002]
- DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) model
 - all particles in the upper atmosphere are followed
 - heating of thermal population due to bombardment of (solar wind) hot particles is considered



SW bombardment and evolution of the early martian atmosphere

Accurate intermolecular collision simulation is a critical issue

- In oxygen-oxygen collision, the projectiles are strongly forward scattered (quantal calculation) [Kharchenko et al., 2000].
- The calculated O escape rates using the forward scattering model of Kharchenko et al. [2000] are an order of magnitude larger than that for the isotropic scattering model [Fox and Hac, 2009].

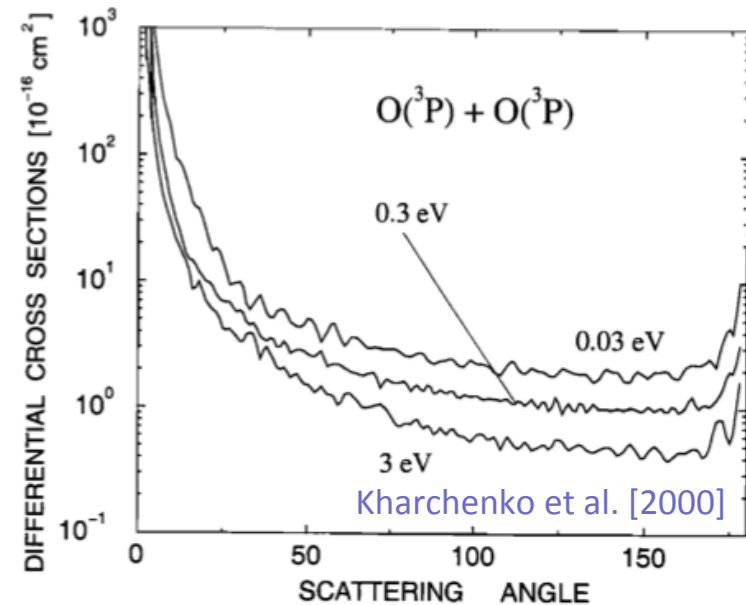


Fig. Statistically averaged differential cross sections if elastic collisions of $O(^3P) + O(^3P)$

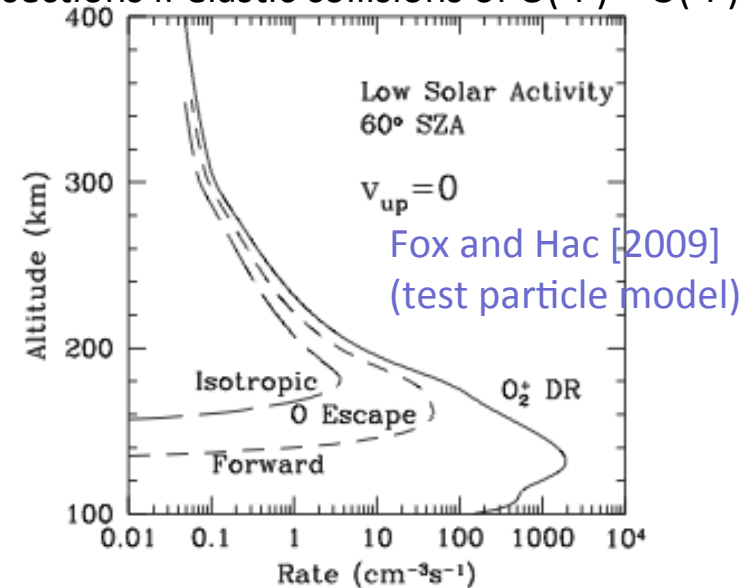


Fig. Computed total O_2^+ DR rates and production rates of escaping O.

Types of intermolecular collisions for upper atmosphere DSMC model

- Sun's EUV heating
 - O_2^+ dissociative recombination
 - neutral (hot O) – neutral
 - collision energy : 0.03 ~ 4.0 eV
 - collision with thermal ion
 - ion – neutral
 - 0.03 ~ 0.2 eV
- Solar wind bombardment
 - neutral (H) – neutral
 - 0.03 eV ~ 1 keV
 - dissociation, excitation, ionization..
- sputtering
 - ion (O^+) – neutral
 - 0.03 eV ~ 1 keV

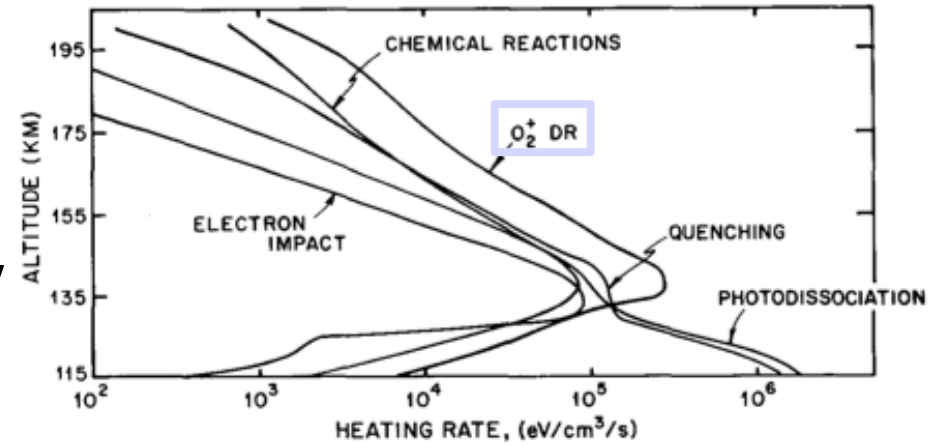


Fig. Heating rates due to the major sources in the Venusian thermosphere [Fox, 1988]

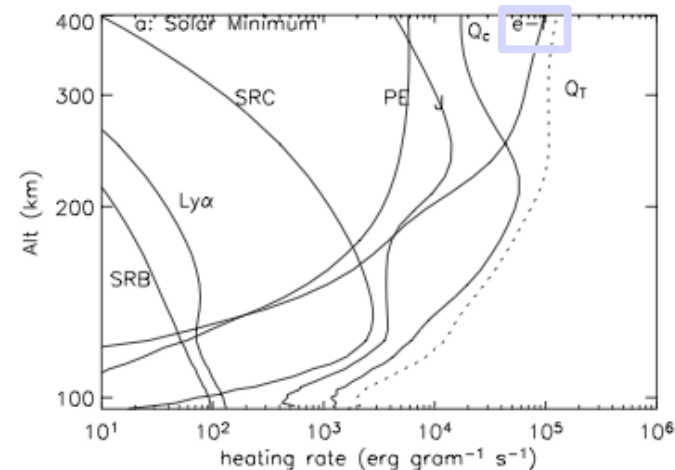
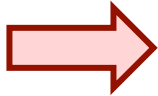
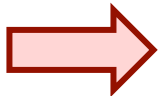



Fig. e-i: heating by collisions between thermal electrons, ions, and neutrals; Q_c : heating from chemical reactions [Tian et al., 2008]

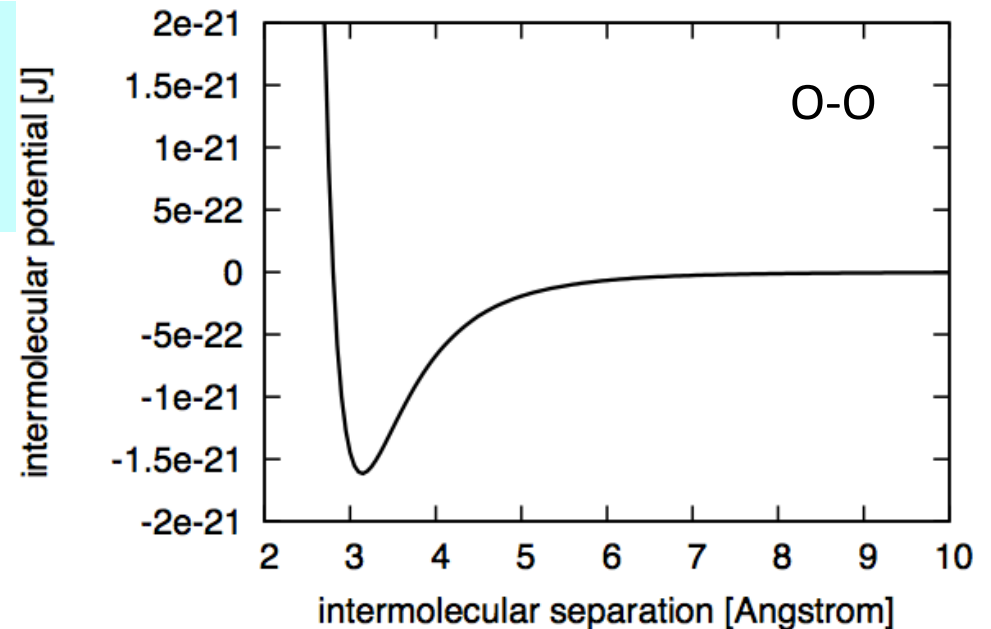
Types of intermolecular collisions for upper atmosphere DSMC model

- Sun's EUV heating
 - O_2^+ dissociative recombination
 - neutral (hot O) – neutral  Lennard-Jones(6-12) potential elastic collision
 - collision energy : 0.03 ~ 4.0 eV
 - collision with thermal ion
 - ion – neutral  Induced polarization elastic collision
 - 0.03 ~ 0.2 eV
- Solar wind bombardment
 - neutral (H) – neutral
 - 0.03 eV ~ 1 keV
 - dissociation, excitation, ionization..  Ziegler-Biersak-Littmark potential inelastic collision
- sputtering
 - ion (O^+) – neutral
 - 0.03 eV ~ 1 keV

Lennard-Jones (6-12) potential (< 5 eV)

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

ε = binding energy



- Lennard-Jones parameter

| Molecule | σ [Å] | ε/k [K] | Temperature [K] | Reference |
|-----------------|--------------|---------------------|-----------------|-----------------------------------|
| CO | 3.652 | 98.4 | 2200 ~ | Boushehri et al., 1987 |
| CO ₂ | 3.769 | 245.3 | 1000 ~ | Boushehri et al., 1987 |
| H | 2.708 | 37.0 | 100 ~ 5000 | NASA technical report R-132, 1962 |
| N ₂ | 3.681 | 91.42 | 50 ~ 100,000 | Capitelli et al., 2000 |
| O | 2.80 | 117.0 | 50 ~ 100,000 | Capitelli et al., 2000 |

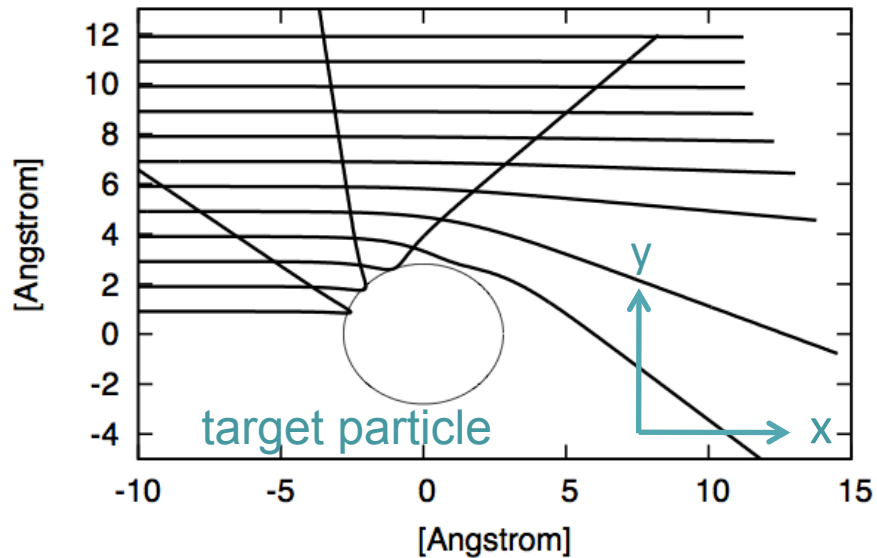
- Lorentz-Berthelot mixing rule

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}, \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii} \varepsilon_{jj}}$$

* polyatomic molecules
are treated as rigid units

O-O interaction according to LJ (6-12) potential

orbit (collision energy = 0.03 eV)



- cutoff point

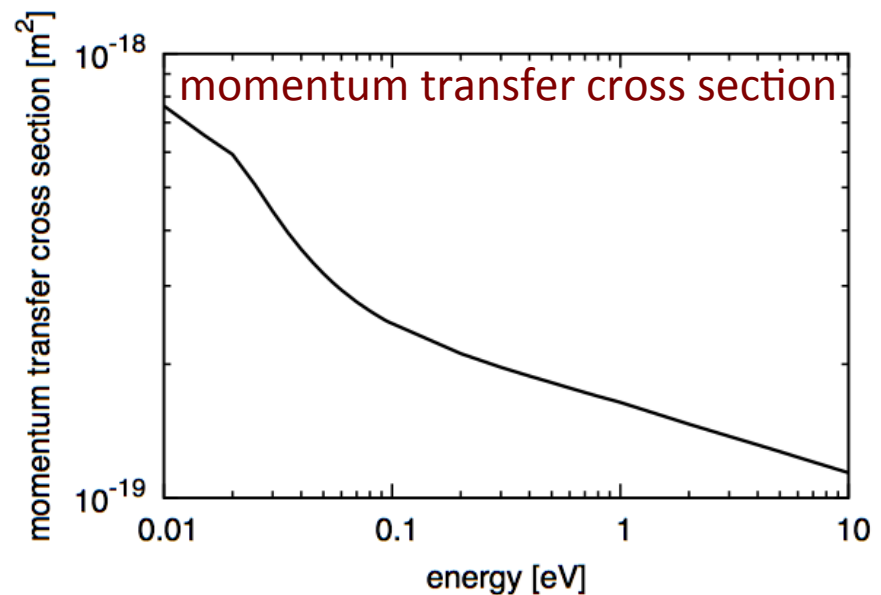
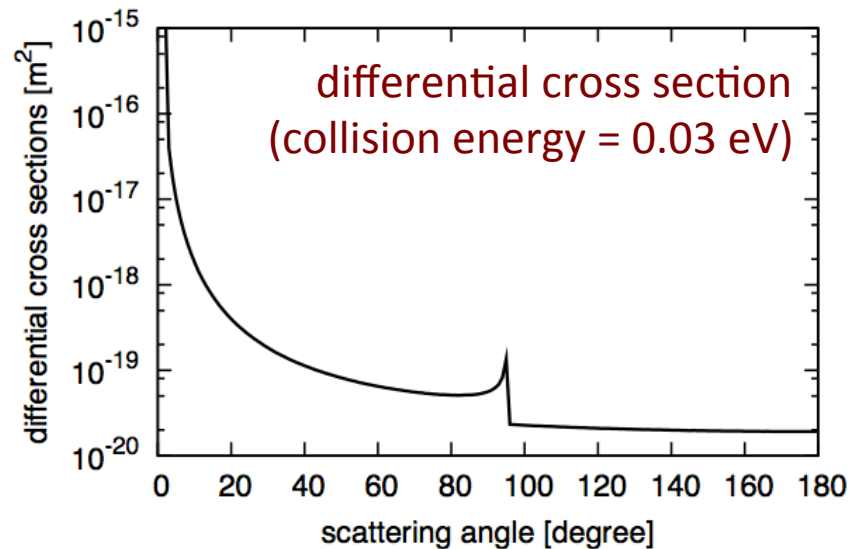
$$F \leq 1.0 \times 10^{-19} \text{ N}$$

- deflection angle

$$\chi = \cos^{-1} \left(\frac{\sqrt{(v_x - v_{x_{GC}})^2}}{\sqrt{(v_x - v_{x_{GC}})^2 + (v_y - v_{y_{GC}})^2}} \right)$$

- momentum transfer cross section

$$\sigma_M = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos \chi) b db$$



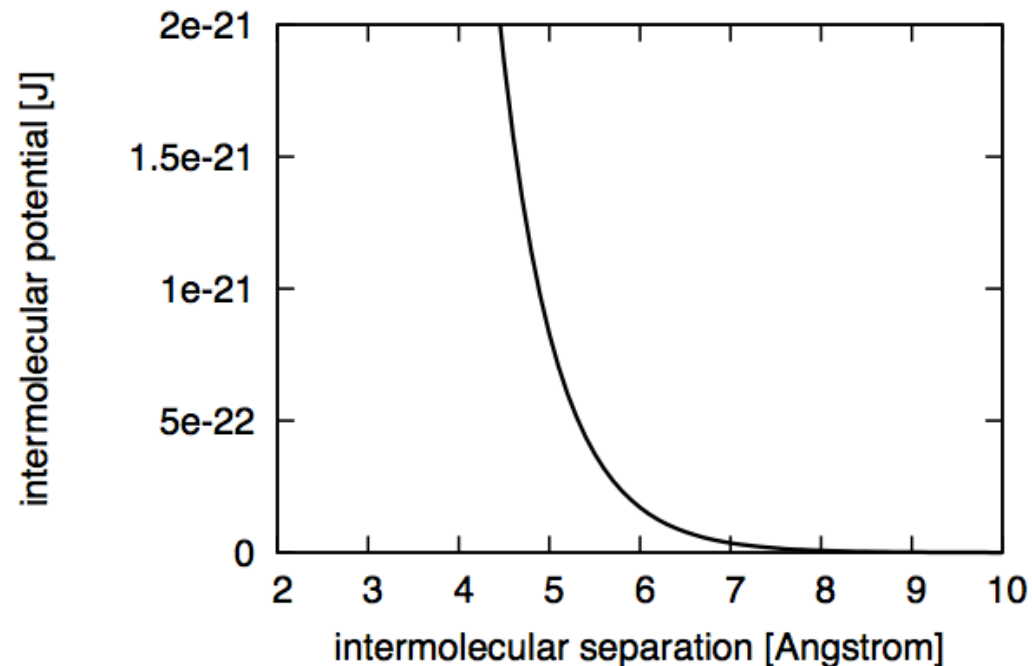
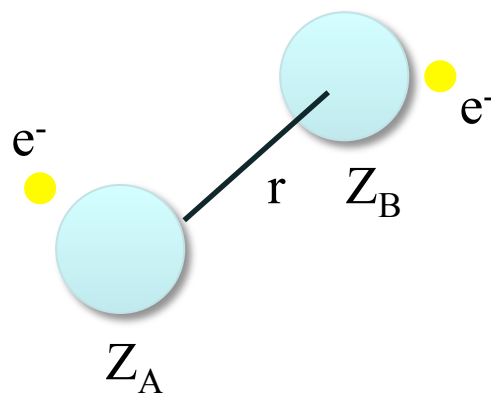
Ziegler-Biersak-Littmark potential (> 5 eV)

$$V = \frac{Z_A Z_B e^2}{r} \phi(r/a_u), \quad a_u = 0.8853 a_0 / (Z_A^{0.23} + Z_B^{0.23})$$

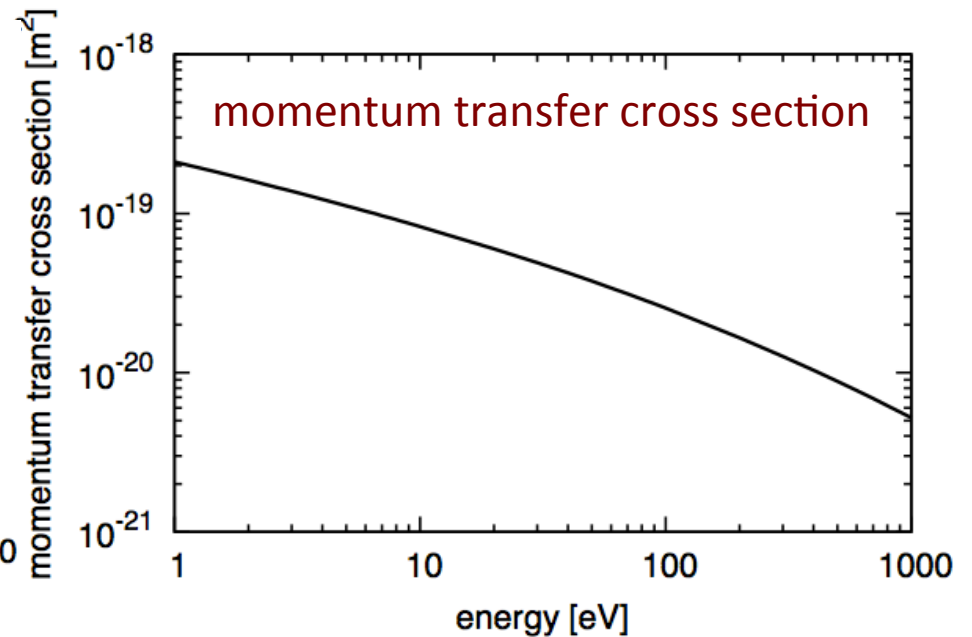
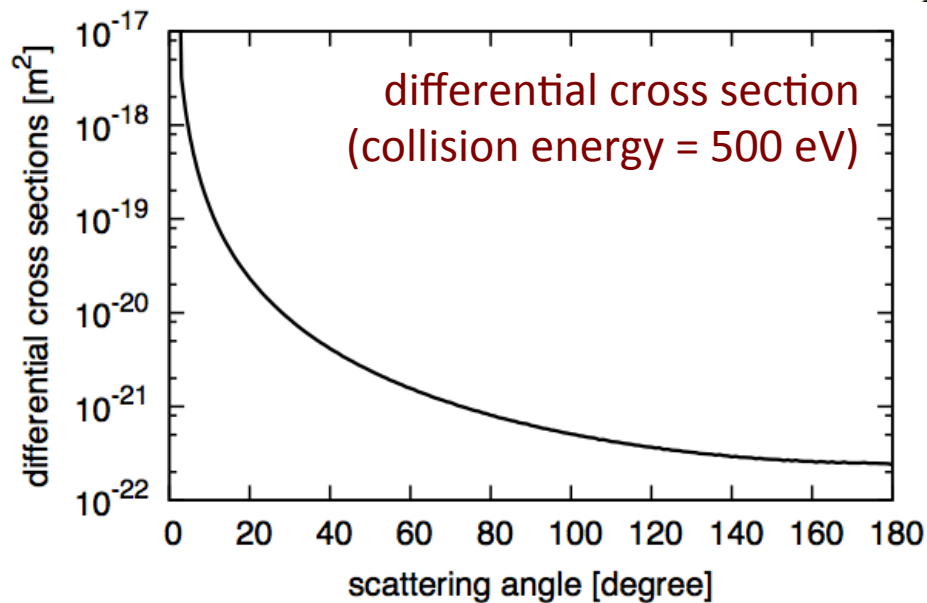
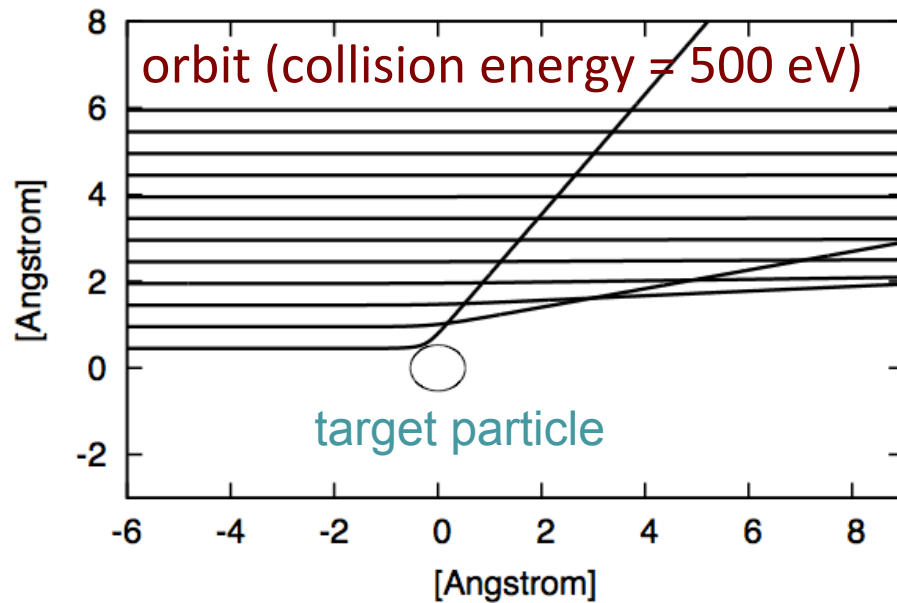
$$\begin{aligned} \phi(x) = & 0.18175 \exp(-3.1998x) + 0.50986 \exp(-0.94229x) \\ & + 0.28022 \exp(-0.4029x) + 0.028171 \exp(-0.20162x) \end{aligned}$$

a_0 : Bohr radius, Z_A : atomic number of the incident atom,
 Z_B : atomic number of the target atom

$\phi(x)$: screening function

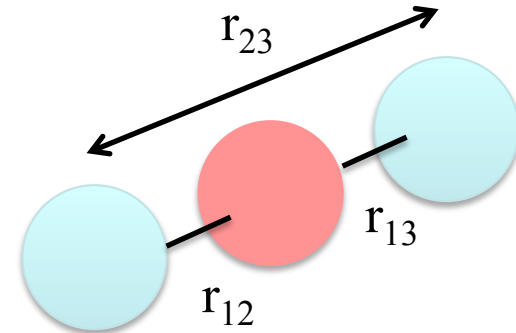


O-O interaction according to ZBL potential



Intramolecular potential of CO₂

$$V = V_{CO}(r_{12}) + V_{CO}(r_{13}) + V_{OO}(r_{23})$$



- Morse potential

- CO molecule [Johnson and Liu, 1998]

$$V_{CO}(r) = D_{CO} \left\{ \exp[-2\alpha_{CO}(r - r_{CO})] - 2\exp[-\alpha_{CO}(r - r_{CO})] \right\}$$

$$D_{CO} = 11.17 \text{ eV}, r_{CO} = 1.12 \text{ \AA}, \alpha_{CO} = 2.31 \text{ \AA}^{-1}$$

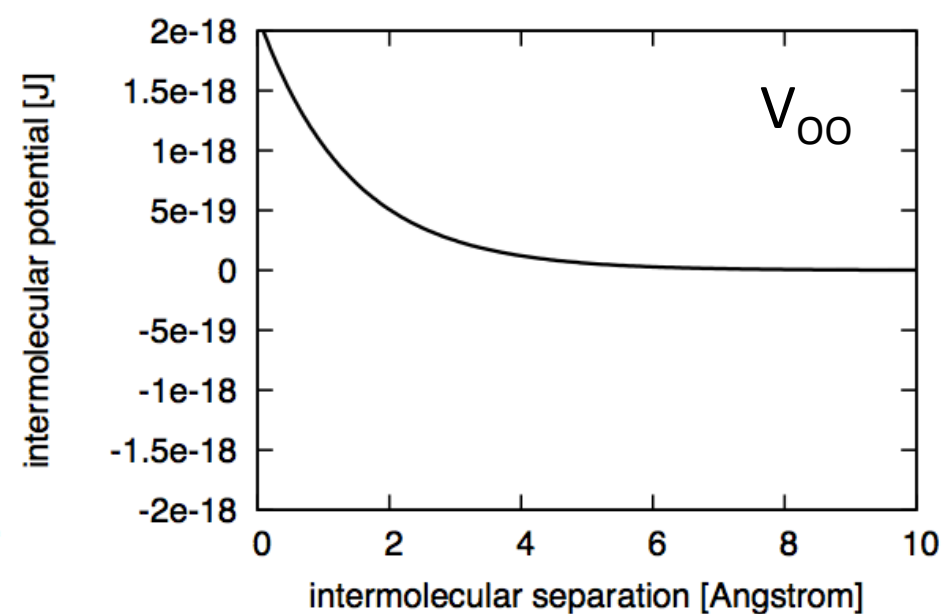
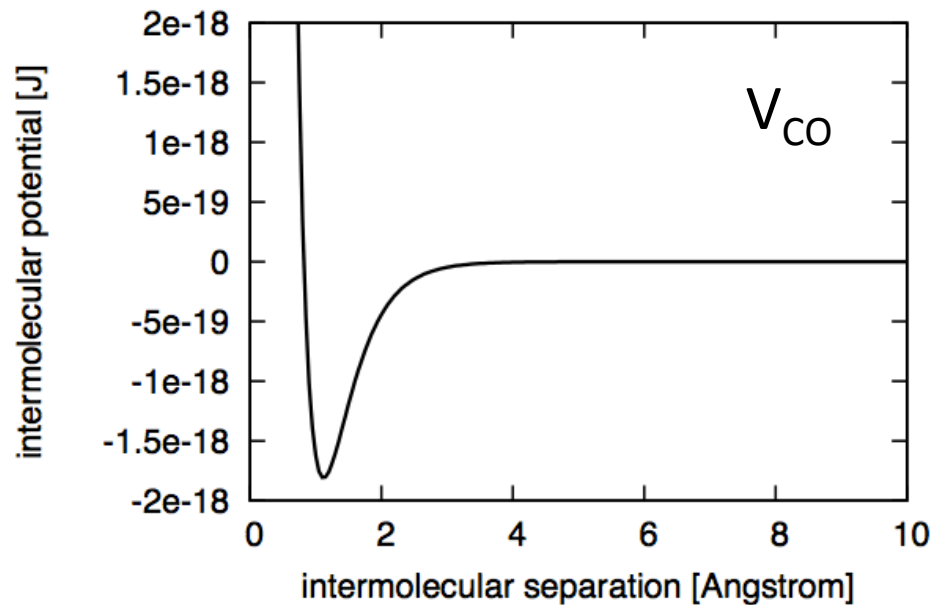
- O + O interaction in the CO₂ molecule [Johnson and Liu, 1998]

$$V_{OO}(r) = A_{OO} \exp[-\beta(r - r_{CO_2})]$$

$$A_{OO} = 5.72 \text{ eV}, \beta = 0.7161 \text{ \AA}^{-1}, r_{CO_2} = 1.16 \text{ \AA}$$

Intramolecular potential of CO₂

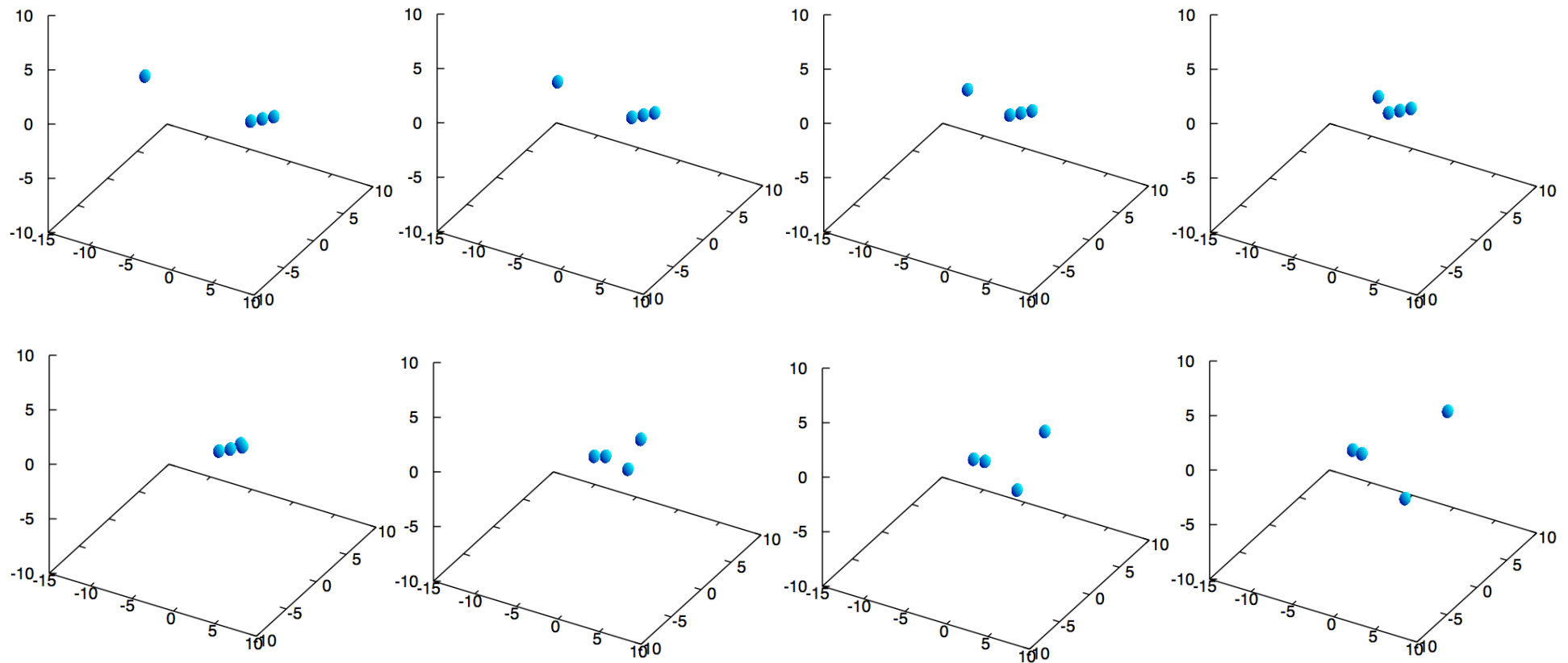
- potential curve



Dissociation occurs when the separation of the molecules is greater than the cutoff distance in the potential V_{CO} (9Å).

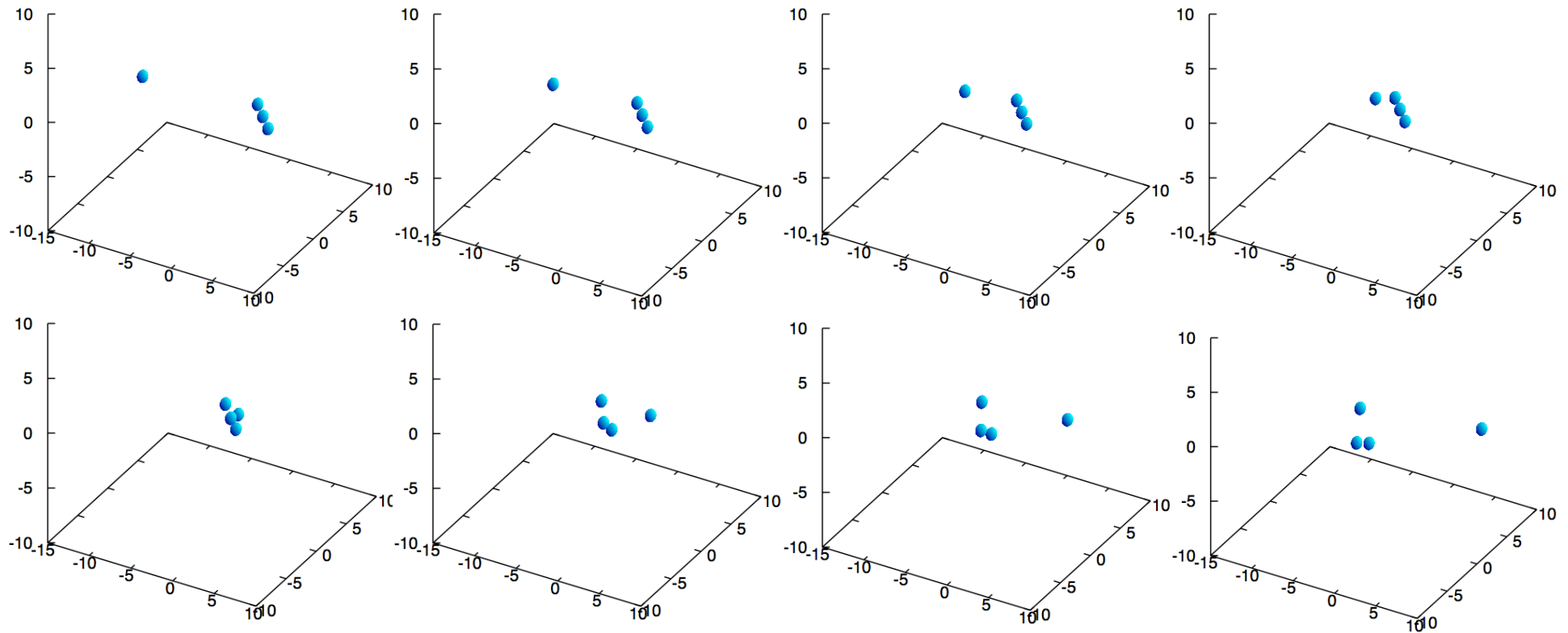
O-CO₂ interaction according to ZBL potential

- O + CO₂ → O + O + CO (collision energy = 500 eV)



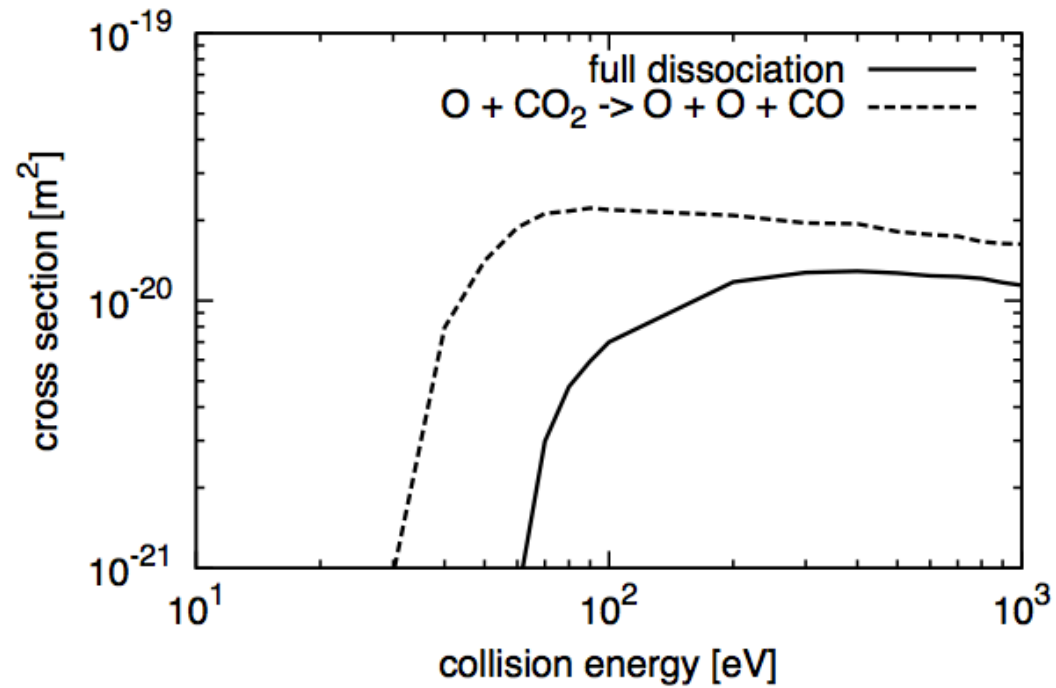
O-CO₂ interaction according to ZBL potential

- $O + CO_2 \rightarrow O + O + O + C$ (collision energy = 500 eV)

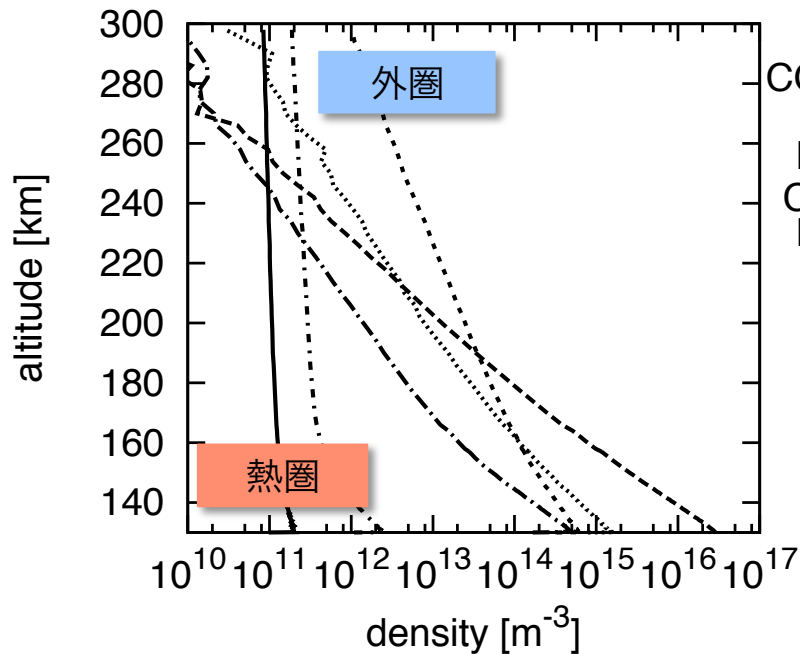


Dissociation cross section

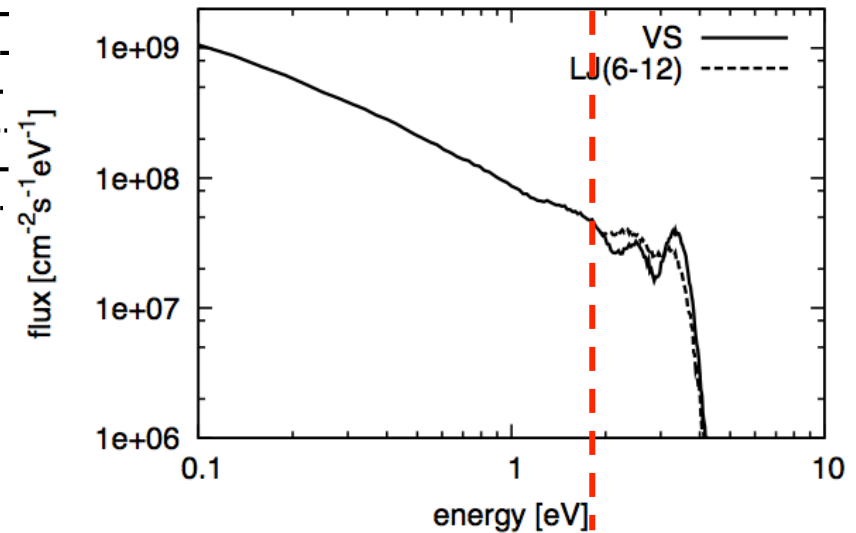
- hot O + CO₂



1D 外圏-熱圏DSMCモデル 計算結果



Calculated density profiles

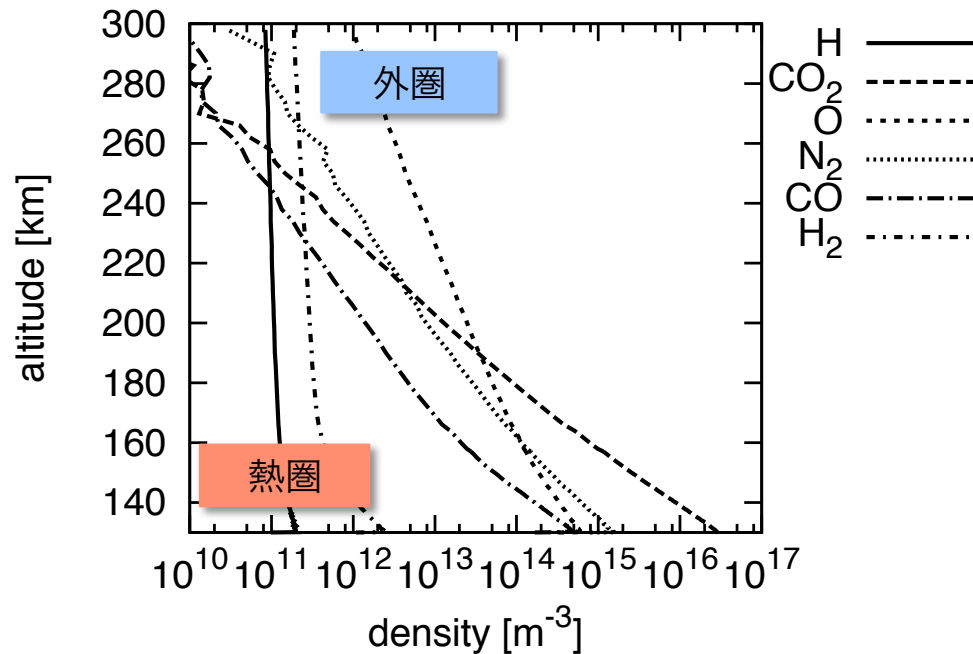


火星重力圏からの脱出
エネルギー(酸素原子)

Energy distribution at 300 km alt.

- 1D Mars exosphere-thermosphere DSMC model
 - Escape rates of neutral atmosphere can be evaluated (e.g., oxygen: $8\text{-}16 \times 10^{24}$ #/sec)

外圏-熱圏DSMCモデルの課題

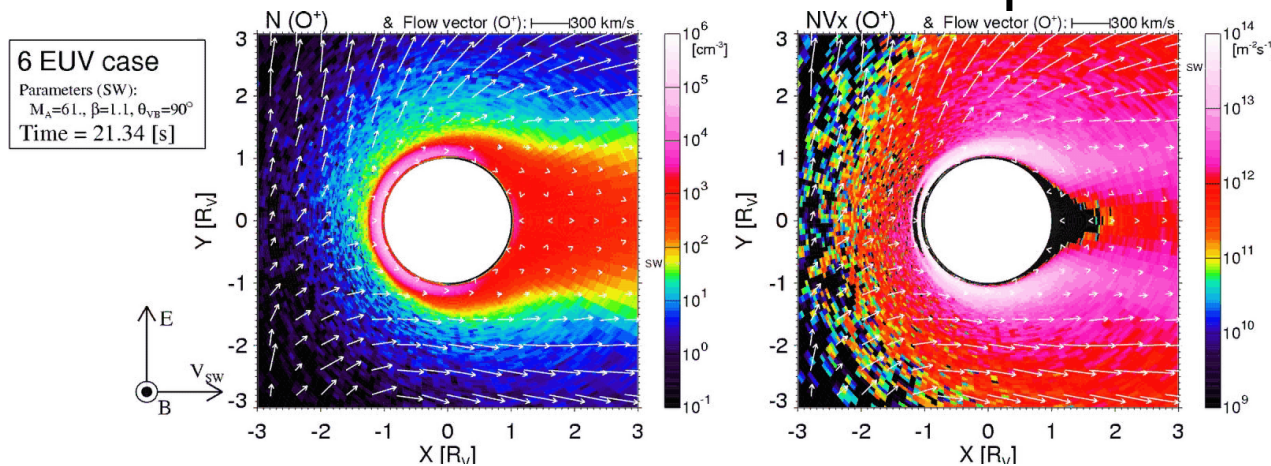


今後の課題

- 外圏-熱圏DSMCモデルの2D, 3D化
- 電離大気モデル(電磁ハイブリッドコード)との結合

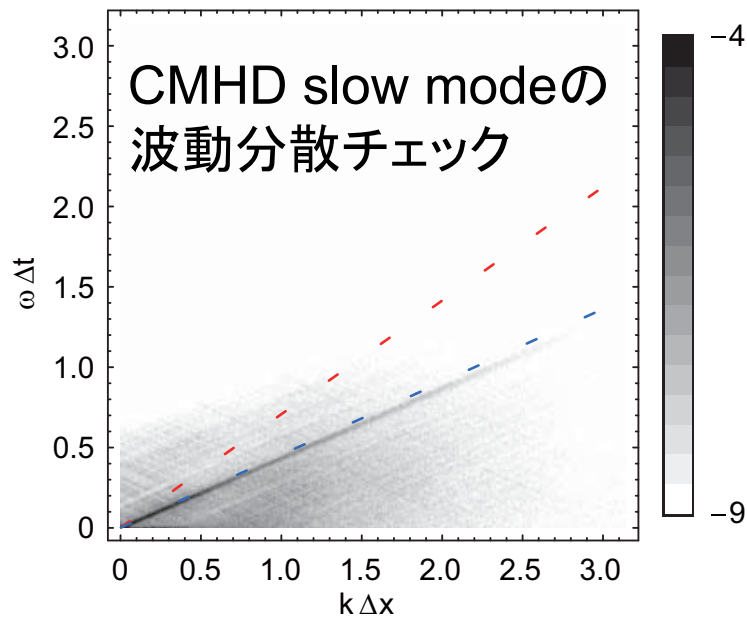
計算規模

- 2D 必要メモリ10-100GB (H24)
- 3D 必要メモリ1-10TB (H25以降)

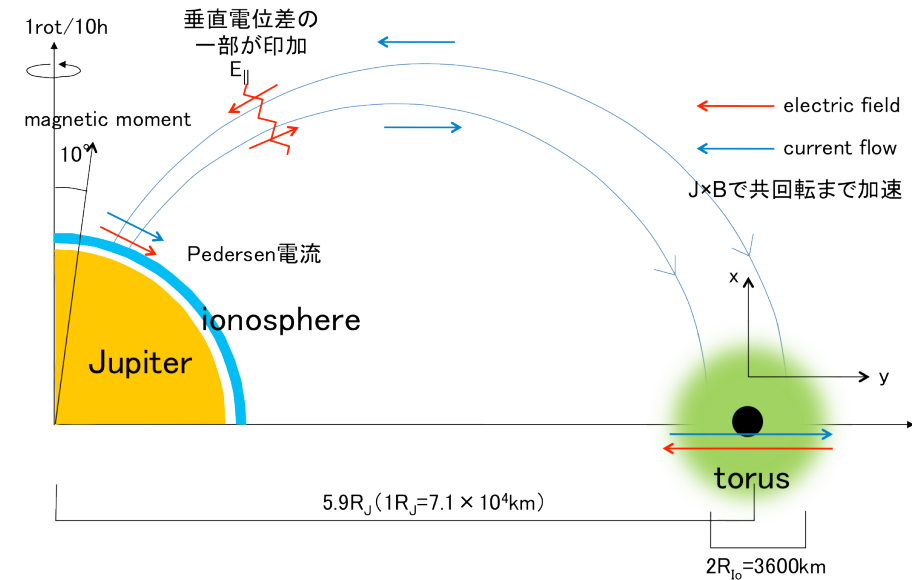


約35億年前の火星電離大気(プラズマ)流出の電磁ハイブリッドシミュレーション

ユニバーサルスキームの開発



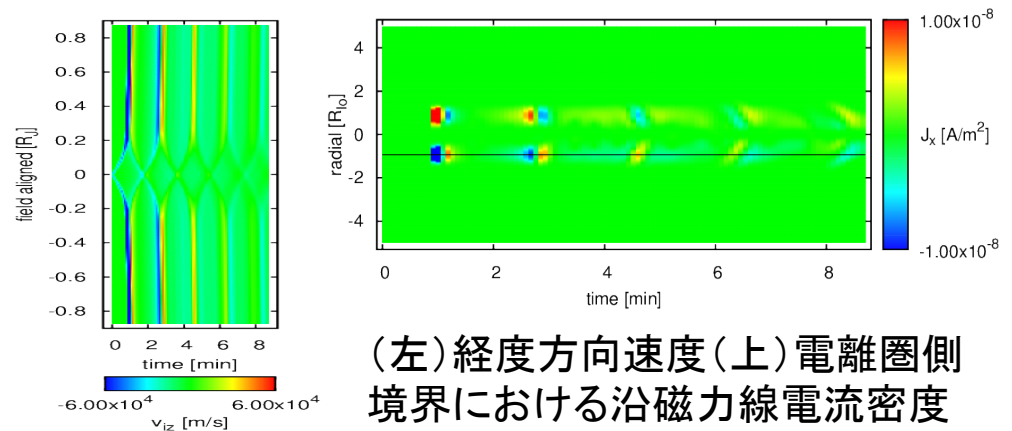
木星-イオ結合系への適用 (AMRコード)



Semi-discrete central schemeを

- ・ 電子移流項を含む方程式系に適用
- ・ 実問題 (木星-イオ結合系) に適用
- ・ AMR適用済み

[Matsuda et al., PoP 2011,
JGR submitted]



(左) 経度方向速度 (上) 電離圏側
境界における沿磁力線電流密度

名古屋大学HPC計算科学連携研究 プロジェクト課題(まとめ)

• 「変動惑星圏シミュレーション」

寺田直、加藤、寺田香(東北大)、藤原(成蹊大)、荻野、梅田(名大STEL)、石井、永井(名大情報基盤センター)

- 惑星大気・プラズマ環境におけるマイクロ秒～数十億年スケールの時間変動、及びその蓄積によって生じる惑星圏システムの多様性を明らかにすべく、本研究グループが現有する以下の数値シミュレーションコードを適用・拡充発展させ、惑星大気・プラズマの変動と進化に係る統合的知見を得ることを目的とする。
- (a) 太陽系初期シミュレーション [齋(D3)]
 - 惑星・惑星形成環境における重力収縮ガスとプラズマの相互作用、及び磁場が果たす役割を理解することを目標とする。特に、磁場の効果が重要となると考えられる超新星爆発が誘発する分子雲形成過程や、降着円盤における磁気乱流場での多様な不安定モードの発展とその競合を明らかにすることを旨とする。
- (b) 長期変動(数千万年～数十億年)シミュレーション [寺田直、古橋(M2)]
 - 惑星圏の長期変動(数千万年～数十億年スケールの時間変動)の中でも、不可逆過程の長期的蓄積によって生じる、惑星圏システムの進化・多様性に関わる過程を明らかにする。特に、火星、金星、水星、地球、系外惑星等の大気・プラズマの宇宙空間への流出過程を、本研究グループが現有する先鋭的なコードを用いて究明し、その数千万年～数十億年間に及ぶ蓄積によって生じる惑星大気の進化や、生命居住可能条件(ハビタブル条件)に及ぼす影響の定量評価を目標とする。
- (c) 中期変動(数分～数十年)シミュレーション [藤原、寺田直、寺田香(PD)、黒田(PD)、松田(D3)]
 - 惑星圏の中期変動(数分～数十年スケールの時間変動)の中でも、特に惑星大気の日々変動、季節変化、太陽11年周期変動などに起因した惑星圏中期変動を明らかにする。地球、金星、火星、木星など各惑星に特徴的な大気現象を理解すると共に、比較惑星学的見地から惑星圏中期変動の一般理論の構築を目指す。また、惑星電磁圏、大気圏などの領域間の結合過程が惑星圏中期変動に果たす役割の理解も目指す。
- (d) 短期変動(マイクロ秒～秒)シミュレーション [加藤、疋島(PD)]
 - 惑星圏の短期変動(マイクロ秒～秒スケールの時間変動)は、惑星圏システムにおける最高エネルギーのプラズマ粒子ダイナミクスに直接的に関わる現象を含むと共に、背景媒質であるプラズマの温度や組成に影響を及ぼし、長期・中期変動現象と共に惑星圏システムの進化・多様性を決定する本質的要素の一つである。短期変動現象をその物理素過程から究明し、長期・中期変動に関する理論モデルとの連携により、短期変動現象の不可逆過程への寄与と惑星圏システムの進化に及ぼす影響の定量評価を目指す。
- 本研究では、まずは(a)(b)(c)(d)の各課題を遂行し、それぞれの時間スケールにおける特徴的な惑星圏変動現象の理解を深める。そして将来的にそれらを統合的な視点で繋ぎ合わせ、惑星圏環境の変動現象とその蓄積によって生じる多様性をモデルとして統合するための足がかりを創ることを目標とする。