外惑星大気を念頭においた熱力学計算手法

杉山耕一朗
(北大地球惑星科学専攻)
sugiyama@ep.sci.hokudai.ac.jp

1-1. 背景

□外惑星大気シミュレーションモデルの構築を目指して

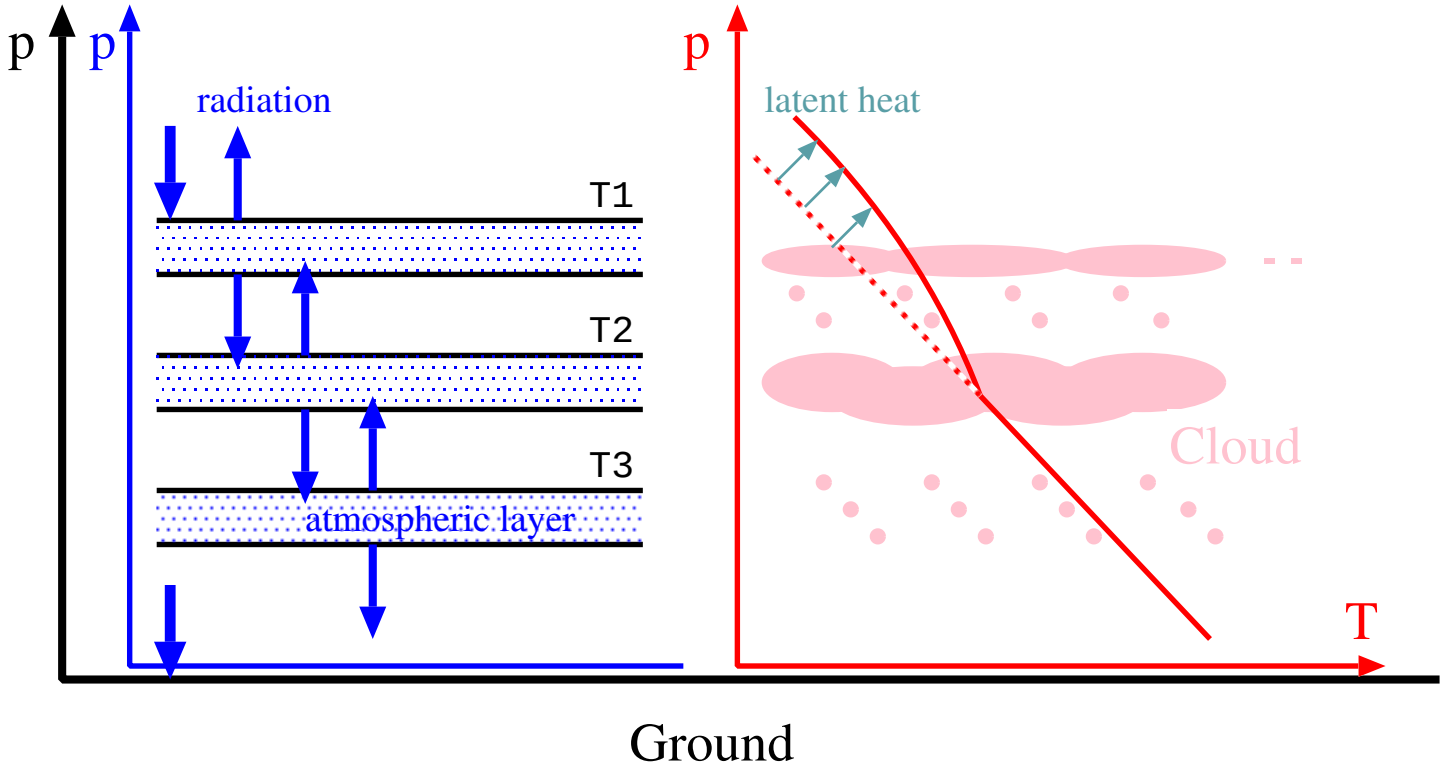
○運動のない大気の平均的な温度構造を把握する

▹放射対流平衡モデルが必要

○キーパラメータ

▹対流領域での断熱温度勾配

▹放射に関係する物質の鉛直分布



1-2. 外惑星大気の熱力学計算 (1)

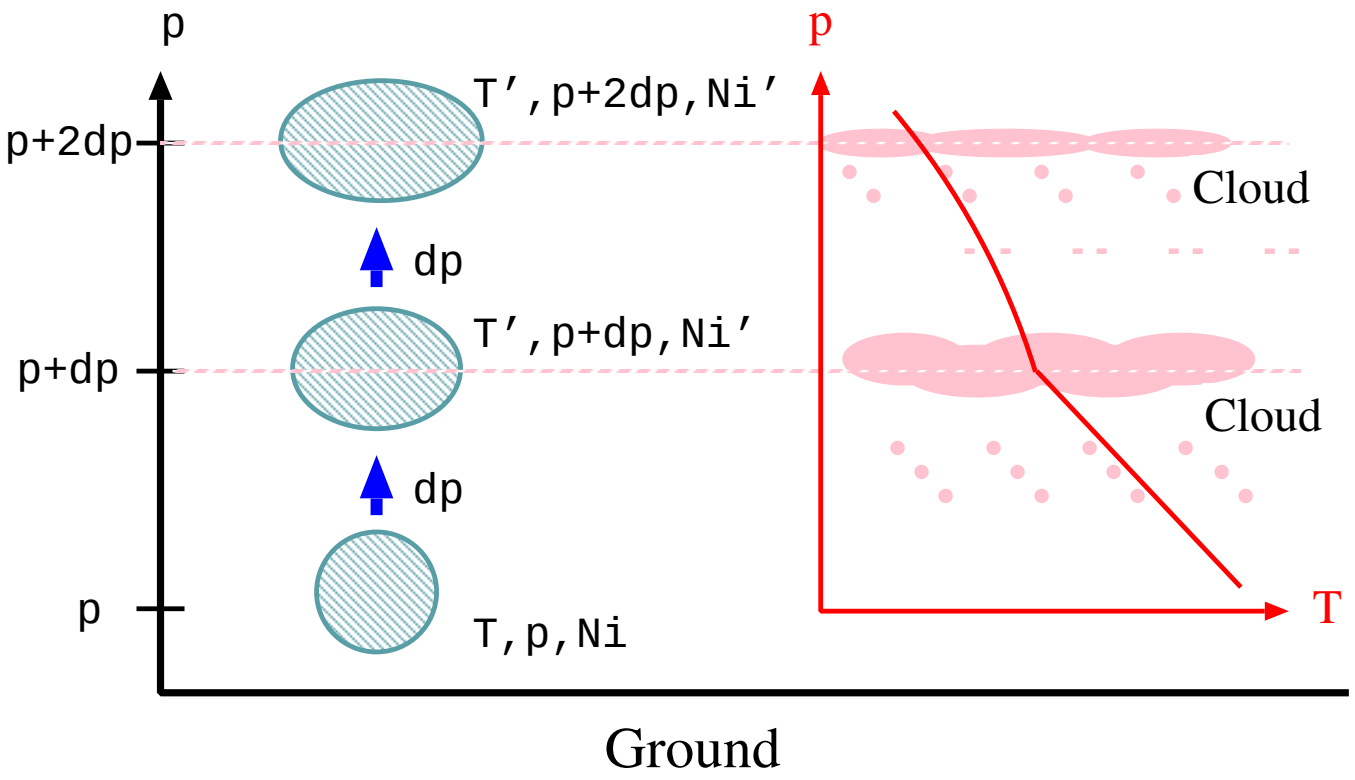
□Atreya and Romani (1985)

○系の設定

- ▹空気塊に含まれる物質は全て理想気体/液体/固体/溶液である
- ▹空気塊を断熱的に上昇させる. (dS = 0)

○計算する物理量

- ▹空気塊が断熱上昇する時に実現する鉛直温度分布と鉛直物質分布

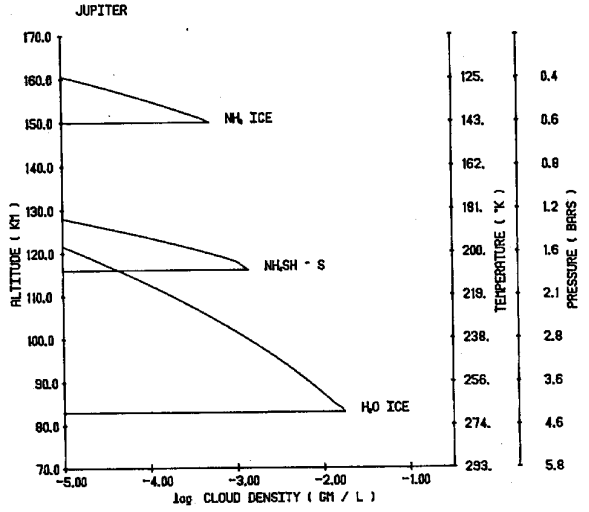


モデルの枠組の模式図

1-2. 外惑星大気の熱力学計算 (2)

□Atreya and Romani (1985) [つづき]

○結果



Atreya and Romani, 1985, In Planetary Meteorology, Cambridge Univ. Press, p.53

木星における雲の鉛直分布 (Atreya and Romani, 1985)

○問題点

▹熱力学関数関数 S を相変化や化学反応に伴う熱量を知っているものとして表現しているので, 大気の組成や温度・圧力条件, 生じうる反応式を知らないと計算できない.

$$dS = \frac{dU}{T}dT + \frac{p}{T}dV + \sum \frac{\mu_i}{T}dn_i$$

$$\bar{c}_{\mathrm{p}}dT - vdP + \sum_{\mathrm{i}} L_{\mathrm{i}}dn_{\mathrm{i}} + \sum L_{\mathrm{RX}}dn_{\mathrm{RX}} = 0$$

(μは化学ポテンシャル, L_i は潜熱, L_rx は反応熱)

2. 本研究の目標

□目的

○空気塊が断熱上昇するときに実現する, 鉛直温度分布と鉛直物質分布を計算するための手法を検討する.

○そのための数値計算ソフトウェアを開発する

□考え方の指針

○系に含まれる物質自体や元素量をパラメータとして簡単に扱えるようにする

▹系に存在する物質を規定するだけで, 鉛直温度プロファイルや鉛直物質分布が求まるようなソフトウェアを開発する.

3. 全体の枠組

□空気塊の設定

- ○空気塊に含まれる物質は全て理想気体/液体/固体/溶液として扱う
  - ▹その場合, 物質の化学ポテンシャルは以下の式を満たす.

$$\mu_i(T,p) = \mu_i^\circ(T) + RT\ln\frac{n_i}{\sum n_i} + \alpha RT\ln\frac{p}{p_0}$$

(μ^o は標準化学ポテンシャル, αは気相ならば 1, それ以外は 0.)

□検討事項

- ○空気塊の状態をどう定義するか
  - ▹熱力学関数は何が適当か
  - ▹熱・化学平衡をどのように表現するか
- ○空気塊の断熱上昇をどのように表現するか

4-1-1. 空気塊の状態の特徴づけ

□空気塊の状態の記述

- ○空気塊の状態を熱力学関数 G を用いて記述することにする.
  - ▹変数として温度・圧力・物質存在量を選ぶならば, 熱力学関数 S よりも熱力学関数 G の方が扱い易い
  - ▹空気塊の温度・圧力を設定することによって, 空気塊の熱力学関数 G は以下のような簡単な形式で書ける

$$G(n_i^\phi) = \sum \mu_i^\phi n_i^\phi$$

(μ は化学ポテンシャル, n は物質存在量. 添字 i は物質を意味し, 添字 φ は相を意味する.)

  - ▹空気塊に存在する物質の潜熱や反応熱の代わりに, 化学ポテンシャルが必要

□空気塊の平衡状態の記述

- ○任意の温度・圧力における空気塊の平衡状態を, 熱力学関数 G が最小化された状態として求める.
  - ▹任意の温度・圧力において空気塊に含まれる物質の存在量が得られる

4-1-2. 空気塊の平衡状態の計算 (1)

□空気塊の熱力学関数 G の最小化方法

○逐次近似法によって熱力学関数 G の最小値を求める

▹温度・圧力を固定し, 物質存在量を変化させることで, G の最小となる点を求める.

▹熱力学関数 G を 2 次関数で近似し, 繰り返しフィッティングする

▹連立方程式 (変数はラグランジュの未定乗数χ と n^φ/m^φ)

$$\sum_e a_{ie}^{\phi} m_i^{\phi} \chi_e = \sum_i \Gamma_i^{\phi}$$

$$\sum_e \left\{ \sum_i \sum_{\phi} a_{ie}^{\phi} a_{if}^{\phi} m_i^{\phi} \right\} \chi_e + \sum_{\phi} \sum_i a_{if}^{\phi} m_i^{\phi} \left(\frac{n^{\phi}}{m^{\phi}} \right) = \sum_i \sum_{\phi} a_{if}^{\phi} \Gamma_i^{\phi} + B_f$$

▹平衡時の組成を求める式

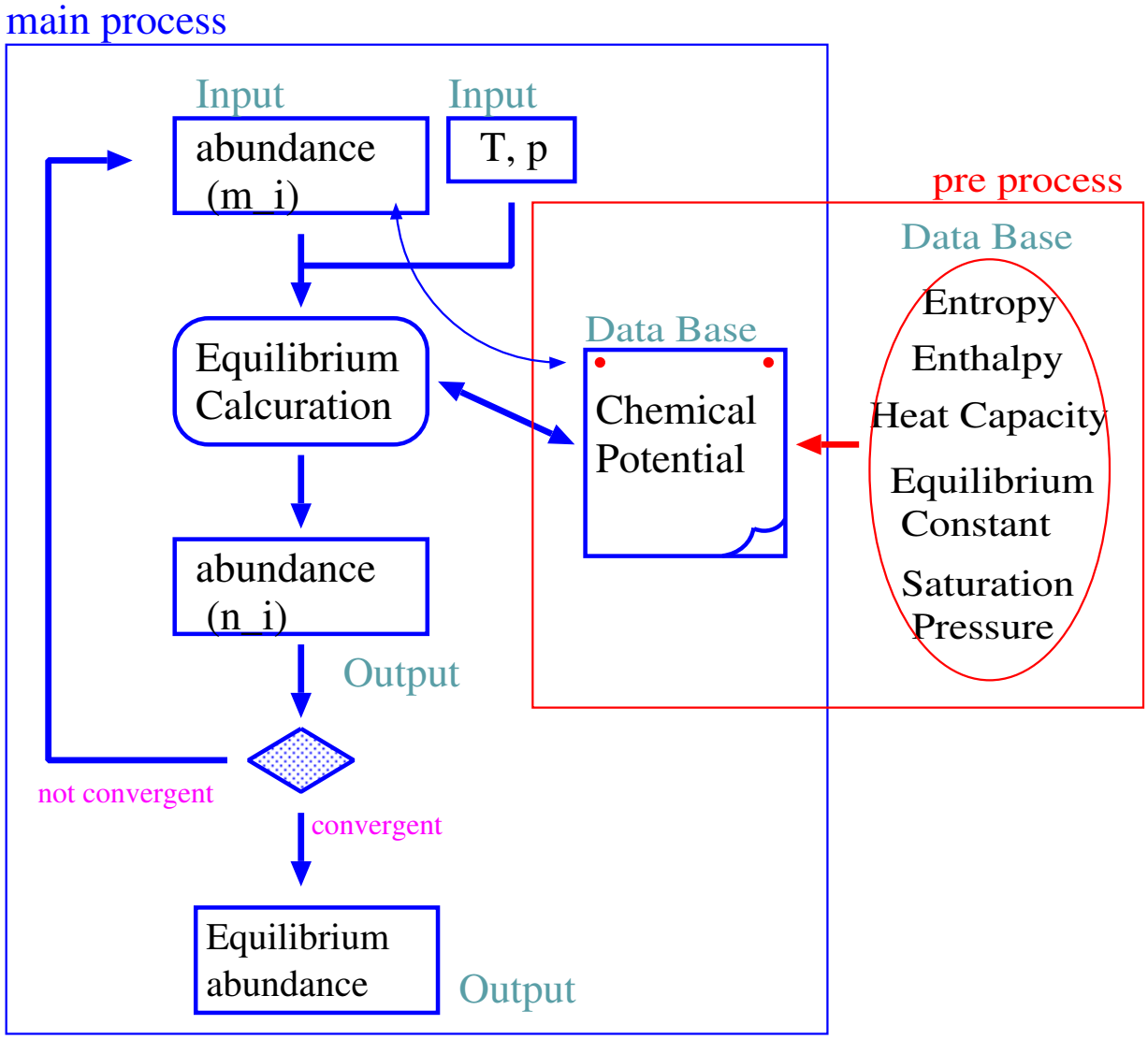
$$n_i^{\phi} = -\Gamma_i^{\phi} + \left(\frac{n^{\phi}}{m^{\phi}} \right) m_i^{\phi} + \sum_e \chi_e a_{ie}^{\phi} m_i^{\phi}.$$

▹定数Γの定義

$$\Gamma_i^{\phi} = m_i^{\phi} \left[\frac{\mu_i^{\circ \phi}}{RT} + \ln \frac{m_i^{\phi}}{m^{\phi}} + \alpha \ln p \right].$$

4-1-2. 空気塊の平衡状態の計算 (2)

□平衡計算の手順



4-1-3. 数値的に解くために

□平衡解を求めるためのテクニック

○対数の扱い

▹対数の項を -∞ に発散させないために, 全体を m^φ で割る. これにより物質の存在量が限りなく 0 に近付いた場合, 対数の項は 0 に収束する.

$$m_i^\phi \left(\ln \frac{m_i^\phi}{m^\phi} \right) \rightarrow \frac{m_i^\phi}{m^\phi} \left(\ln \frac{m_i^\phi}{m^\phi} \right)$$

○相の扱い (その 1)

▹ある相に含まれる物質が全て 0 に近付くと以下の式は不定になる. そのため, ある相に存在する物質量が全て 0 に近付いた場合は, その相は存在しないものとして計算を進める.

$$\sum_e a_{ie}^\phi m_i^\phi \chi_e = \sum_i \Gamma_i^\phi$$

○負のモル数の扱い

▹計算によってモル数が負になる場合がある. その場合は, 初期存在量と物質量変化に適当な係数 λ を乗じたものの和を平衡時の存在量とみなす. この存在量は元素の保存を満たす.

$$n_i^* = m_i + \lambda \{ n_i - m_i \}$$

$$\lambda = \frac{m_i}{m_i - n_i} \ (n_i < 0) \quad \lambda = 1 \ (n_i \geq 0)$$

4-2-1. 断熱温度減率 (1)

□断熱温度減率の計算方法

○空気塊のエントロピーと空気塊から除去された凝縮物質のエントロピーとの和を保存する = 擬断熱

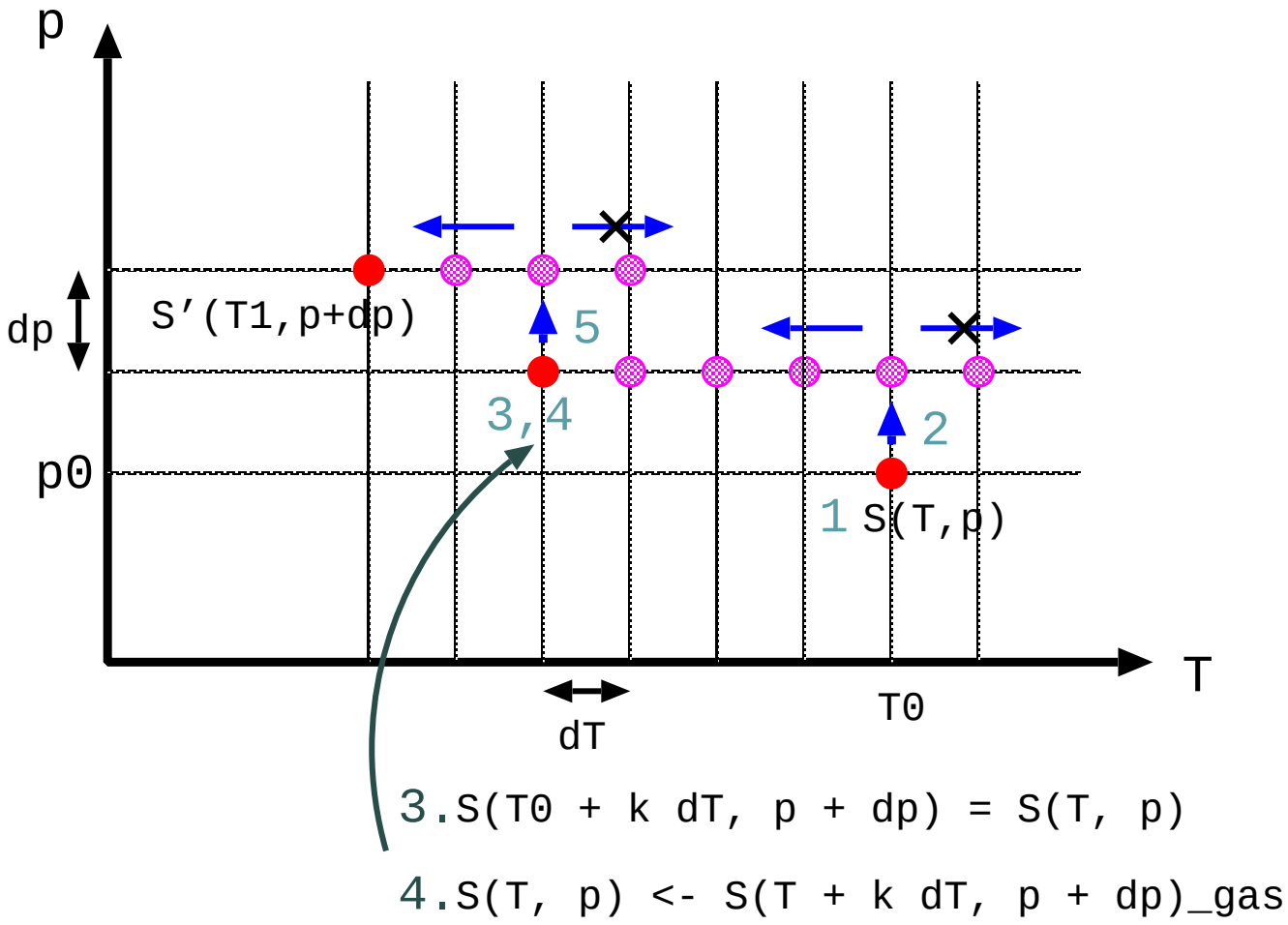
- ▹熱力学関数 G の T に関する偏微分はエントロピーである. 今や G は計算できるので, エントロピーも簡単に計算できる.
- ▹凝結物質は空気塊から離脱する(空気塊に含まれる元素は降水過程を通して減少する)
- ▹空気塊のエントロピーと離脱した凝結物質のエントロピーの和が保存する

○手順

1. 計算開始時の温度 T = T0, 圧力 p = p0 における平衡状態, エントロピー S(T,p) を求める. 凝縮が生じた場合は凝縮物質を除去し, 空気塊のエントロピーは気相だけのエントロピーに等しいものとする
2. 圧力を p + dp にする.
3. 温度を T から dT づつ k 回ずらした点 (T + k dT) でのエントロピー S(T + k dT, p + dp)を計算し, S(T, p) の値と一致する温度を求める.
4. 凝縮物質を除去し, 空気塊のエントロピーは気相だけのエントロピーに等しいものとする (擬断熱の条件). 気相だけのエントロピーを新たに S(T,p)として定義する.
5. 手順 2--5 を規定回数繰り返す.

4-2-1. 断熱温度減率 (2)

□擬断熱温度減率の計算手順



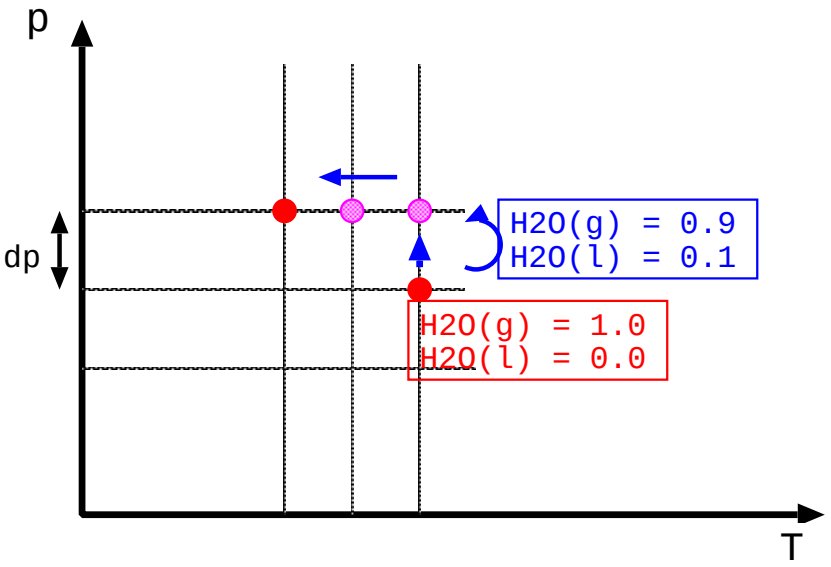
擬断熱温度減率の計算手順の模式図

4-2-2. 数値的に解くために

□擬断熱条件を数値的に解くためのテクニック

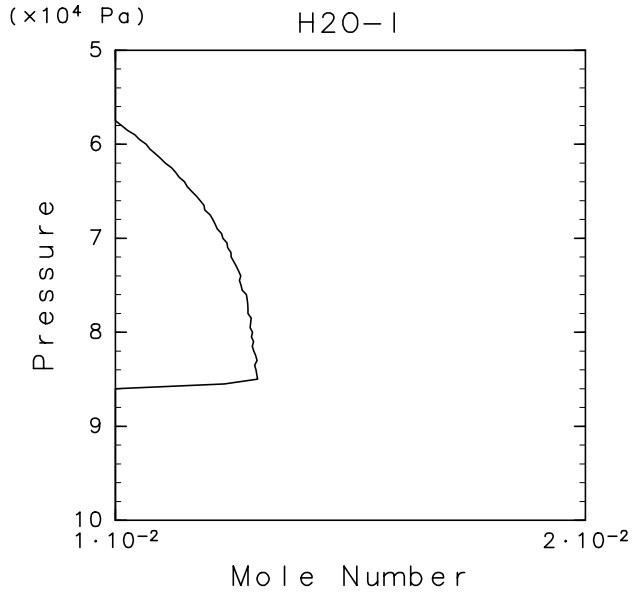
○相の扱い (その 2)

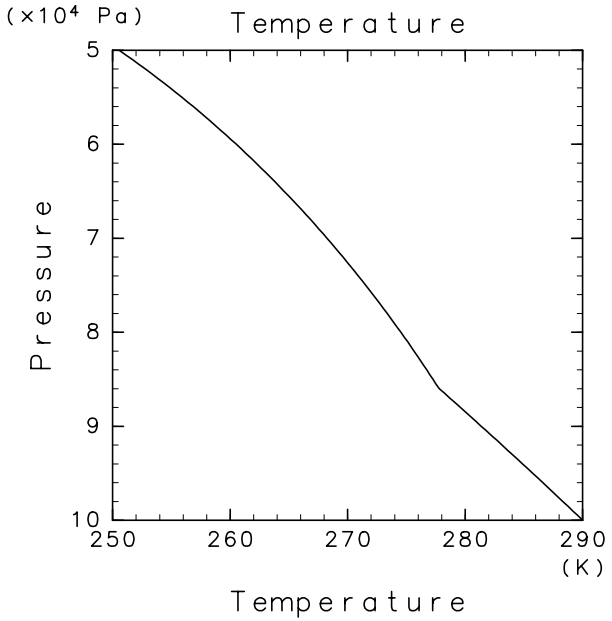
- ▹擬断熱を仮定しているので, 凝縮物質は空気塊から離脱する (存在量を 0 にする).
- ▹その状態でさらに 1 ステップ進めて空気塊を p = p + dp に持ち上げると, 凝縮物質の存在量が全て 0 なので凝縮相に関する方程式が除かれる. (4-1-3 「相の扱い(その 1)」参照). 熱力学的に凝結する高度でも, 凝縮相の方程式が除去されてしまったので, 凝縮が生じないということが起きる.
- ▹そのような状態を回避するために, 圧力 p を dp 変化させるたびに, 凝縮相に凝縮するための「タネ」を入れている. 例えば水蒸気の存在量の 1/10 を液体の水の存在量に振り分けるという作業を行っている.



5-1. 結果 (地球)

□地球のような大気の場合

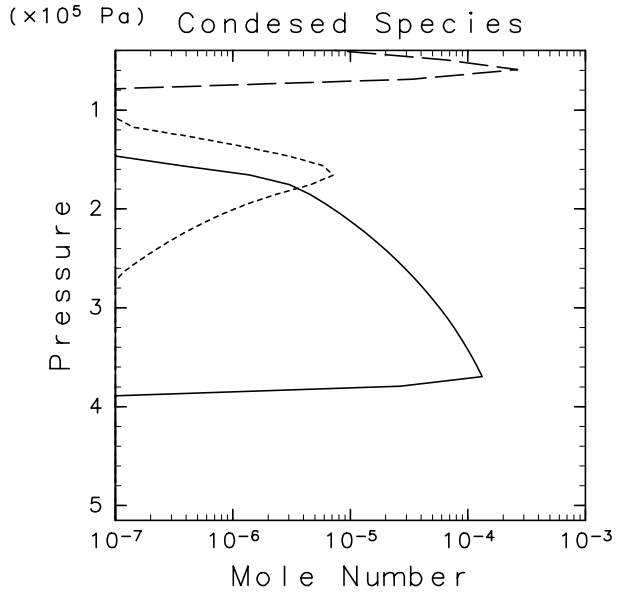


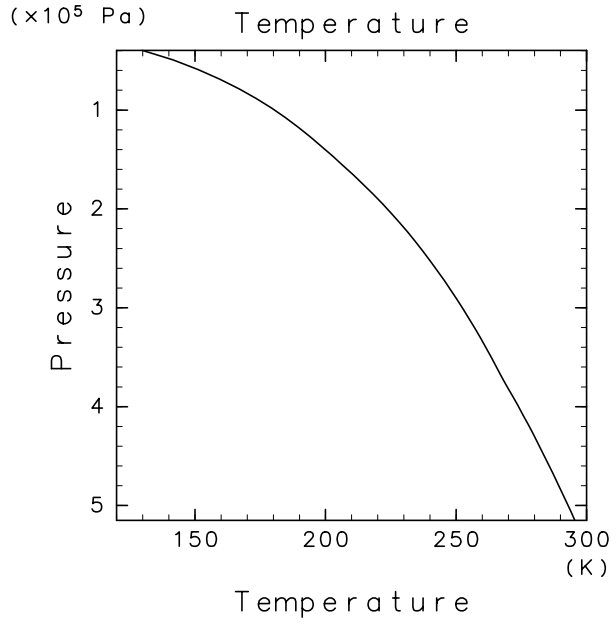


5-2. 結果 (木星)

□木星のような大気の場合

Jupiter





6. まとめ

外惑星大気を念頭におき, 大気の鉛直温度分布と鉛直物質分布を計算するための手法を検討し, 数値計算ソフトウェアを開発した.

本ソフトウェアの特徴は, 空気塊に含まれる物質の標準化学ポテンシャルの表さえあれば, 「どのような組成の大気でも計算できる」ことにある. 実際, スキームを変更することなく木星大気と地球大気の鉛直温度分布と鉛直物質分布とを計算できた.

したがって本ソフトウェアは, 木星型惑星の鉛直温度分布と鉛直物質分布の計算を Atreya and Romani (1985) よりも簡単に行うことができる.