
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

DOI:10.25743/ICT.2024.29.1.002

Компактная разностная схема для гидродинамической модели истечения атмосфер планет

Н. В. ЕРКАЕВ*, К. Д. ГОРБУНОВА

Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

*Контактный автор: Еркаев Николай Васильевич, e-mail: erkaev@icm.krasn.ru

Поступила 23 марта 2023 г., доработана 14 апреля 2023 г., принята в печать 21 апреля 2023 г.

Рассмотрено применение компактной схемы типа Маккормака на неравномерной сетке для решения гидродинамической задачи убегания атмосферы планеты при наличии поглощения внешнего жесткого ультрафиолетового излучения, имеющей важное значение для моделей эволюции планет. В качестве объектов моделирования выбраны две реальные экзопланеты — TOI-421b и TOI-421c, существенно различающиеся по массе и радиусу орбиты. Стационарные распределения плотности, температуры и давления получены в результате численного интегрирования нестационарных гидродинамических уравнений и установления с течением времени требуемого стационарного решения. Показано существенное преимущество компактной схемы типа Маккормака перед классической схемой Маккормака.

Ключевые слова: гидродинамическая модель, компактная разностная схема, атмосфера.

Цитирование: Еркаев Н.В., Горбунова К.Д. Компактная разностная схема для гидродинамической модели истечения атмосфер планет. Вычислительные технологии. 2024; 29(1):5–17. DOI:10.25743/ICT.2024.29.1.002.

Введение

Убегание частиц атмосферы под действием внешнего ультрафиолетового излучения является ключевым фактором, определяющим структуру и эволюцию атмосфер планет Солнечной системы, а также экзопланет, расположенных далеко от нее. Первые экзопланеты обнаружены около 30 лет назад. До настоящего времени было открыто более 5000 экзопланет в различных звездных системах. Свойства атмосфер наблюдаемых планет тесно связаны с интегральным потоком излучения, получаемым планетой за время ее существования, а также с особенностями поведения излучения от их родительской звезды в процессе эволюции.

На ранних стадиях эволюции значительные потоки экстремального ультрафиолетового излучения (EUV) от родительской звезды вызывают интенсивную потерю атмосфер планет. В этом случае может реализоваться гидродинамический режим радиального истечения атмосферного газа со сверхзвуковой скоростью. Скорость потери атмосферной массы зависит от многих параметров, в числе которых — радиус и масса планеты, температура поверхности, интенсивность приходящего излучения и состав атмосферного газа. Математическое моделирование этих процессов в сочетании с наблюдениями может дать важную дополнительную информацию о физических условиях на конкретных планетах.

Гидродинамическая модель может служить инструментом, позволяющим интерпретировать данные наблюдений и давать предсказания, проверяемые экспериментально. Так, сверзвуковое истечение водорода наблюдается на космических телескопах методами спектроскопии благодаря поглощению нейтральными атомами Лайман-альфа-линии излучения звезды. Гидродинамическая модель истечения нужна также для моделирования долговременной эволюции атмосфер планет с момента их формирования из протопланетного облака. Она является основой, которую можно усложнять с учетом многокомпонентности газа и химических реакций.

Решение задачи истечения атмосферного газа сопряжено с вычислительными сложностями, связанными с наличием больших градиентов и значительных перепадов физических параметров, нелинейностью и нелокальностью функции нагрева, поскольку действие ультрафиолетового излучения от звезды очень резко обрывается на малых расстояниях от поверхности планеты. Это накладывает повышенные требования к используемой численной схеме. Основное требование к численной схеме при решении эволюционной задачи состоит в том, чтобы расчет стационарного решения на каждом этапе выполнялся достаточно быстро. Поэтому предпочтение следует отдавать схемам, позволяющим выполнять расчет с приемлемой точностью при меньшем числе узлов сетки.

В работах [1, 2] использовалась классическая схема Маккормака [3] для расчета гидродинамического истечения атмосферы. Однако данная схема обеспечивала устойчивый счет лишь при существенных ограничениях на параметры задачи. В работах [4–6] рассмотрены компактные схемы типа Маккормака, проведены исследования устойчивости и продемонстрированы тестовые расчеты. В компактных схемах, в отличие от обычных, численные производные неявным образом связаны с сеточными значениями функций, и для их нахождения нужно обращать матрицу. Первоначально в работе [4] использовалось обращение трехдиагональной матрицы. В работах [5, 6] предложены схемы, в которых трехдиагональная матрица расщепляется на две двухдиагональные, обращение которых не представляет труда. Преимущество используемой в нашей работе компактной схемы среди прочих, рассмотренных в работе [6], заключается в максимальном предельном значении числа Куранта, равном 1. У остальных схем максимально допустимое число Куранта строго меньше 1.

В работе [7] представлены первые результаты применения компактной схемы типа Маккормака для гидродинамической задачи истечения атмосферы на равномерной сетке, которая обеспечивает четвертый порядок аппроксимации по пространству. Показано значительное преимущество компактной схемы, которая позволяет устойчиво решать задачу в более широком диапазоне параметров по сравнению с классической схемой Маккормака. Кроме того, она позволяет получать результат с хорошей точностью при существенно меньшем числе узлов расчетной сетки. При этом значительно уменьшается время счета.

В настоящей работе, в отличие от [7], компактная схема для задачи истечения атмосферы модифицирована для неравномерной пространственной сетки, а также использована более реалистичная двумерная функция нагрева атмосферы, усредненная по сферическим углам, и учтены дополнительные важные физические факторы: ионизация, рекомбинация и радиационное охлаждение. Выделены ключевые параметры подобия и проиллюстрировано применение модели в конкретных случаях реальных экзопланет TOI-421b и TOI-421c [8].

1. Уравнения модели и постановка задачи

Геометрическая ситуация взаимодействия входящего излучения и атмосферы планеты проиллюстрирована на рис. 1. Рассматриваем атмосферу, состоящую только из атомов водорода. Для моделирования процесса убегания атмосферных частиц применяем одномерные гидродинамические уравнения сохранения массы, импульса и энергии в сферической системе координат:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(\rho r^2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v r^2)}{\partial r} &= 0, \\
 \frac{\partial(\rho v r^2)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho v^2 + p)r^2]}{\partial r} &= -\rho r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} + 2pr, \\
 \frac{\partial[r^2(0.5\rho v^2 + E_{th})]}{\partial t} + \frac{\partial[r^2v(0.5\rho v^2 + E_{th} + p)]}{\partial r} &= -\rho v r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} + r^2 \frac{\rho_n}{m} \left[Q - \Lambda \exp\left(-\frac{118348}{T}\right) \frac{\rho_i}{m} \right], \\
 Q &= \eta \sigma_i J_\infty \left(0.5 \int_0^{\pi/2 + \arccos(R_p/r)} \exp(-\tau) \sin(\theta) d\theta \right), \\
 \tau &= \int_r^\infty \frac{\sigma_i}{m} \frac{\rho_n(s) s ds}{(s^2 - r^2 \sin(\theta)^2)^{1/2}}.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь коэффициент Λ связан с охлаждающим Лайман-альфа-излучением ($\Lambda = 7.5 \cdot 10^{-19}$ эрг·см 3 ·с $^{-1}$); ρ , v , p , T — соответственно массовая плотность, скорость, тепловое давление и температура газа; m — масса атомов водорода; E_{th} — тепловая энергия всех частиц на единицу объема ($E_{th} = 3/2 p$); коэффициент η представляет собой долю энергии фотона, которая расходуется на нагревание (допуская, что фотон имеет энергию 20 эВ, а энергия ионизации равна 13.6 эВ, получаем оценку $\eta = 1 - (13.6 \text{ эВ}/20 \text{ эВ}) \approx 0.32$ [6]); функция Q определяет скорость нагрева EUV; Φ — гравитационный потенциал; r — радиальное расстояние от центра планеты; θ — сферический угол, отсчитываемый от направления звезды; σ_i — поперечное сечение ионизации; J_∞ — интенсивность приходящего ультрафиолетового излучения (в единицах эрг·см $^{-2}$ ·с $^{-1}$); ρ_i и ρ_n — массовые плотности ионов и нейтральных атомов водорода соответственно.

В общем случае гравитационный потенциал должен учитывать три фактора: притяжение планеты, приливное притяжение звезды и вклад центробежных сил, связанных

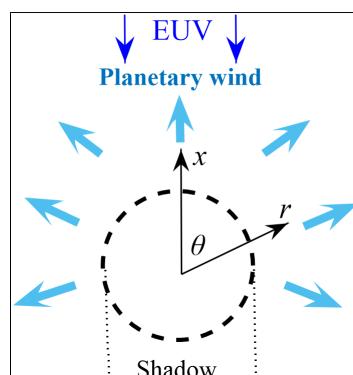


Рис. 1. Модель поглощения жесткого ультрафиолета в верхней атмосфере
Fig. 1. A model of absorption of hard ultraviolet in the upper atmosphere

с вращением системы двух тел планета–звезда вокруг их центра масс. Суммарный гравитационный потенциал можно выразить формулой [9]

$$\Phi = -G \left[\frac{M_p}{r} + \frac{M_s}{d_s - r} + \frac{M_s + M_p}{2d_s^3} \left(\frac{d_s M_s}{M_s + M_p} - r \right)^2 \right],$$

где M_p , M_s — массы планеты и звезды соответственно; d_s — расстояние от планеты до звезды; G — гравитационная постоянная. Использование заданной уравнением (1) двумерной функции нагрева, усредненной по сферическому и азимутальному углам, затратно в вычислительном отношении. Поэтому имеет смысл применять одномерную аппроксимацию функции нагрева следующего вида:

$$Q = \frac{\sigma_i \eta J_\infty \exp(-\tau)}{1 + \epsilon \tau}, \quad \tau = \int_r^\infty \frac{\sigma_i}{m} \rho_n(s) ds.$$

Здесь ϵ — постоянный параметр, подбираемый из условия наилучшей аппроксимации ($\epsilon \sim 1$). Плотности нейтральных и ионизированных частиц определяются из системы уравнений

$$\frac{\partial \rho_n}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(\rho_n v r^2)}{\partial r} = -\nu \rho_n + \alpha n_e \rho_i, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(\rho_i v r^2)}{\partial r} = \nu \rho_n - \alpha n_e \rho_i, \quad (3)$$

где n_e — плотность электронов, определяемая условием квазинейтральности $n_e = \rho_i/m$; ν и α — коэффициенты фотоионизации и рекомбинации [10]:

$$\nu = 0.59 \cdot 10^{-7} J_\infty \frac{\exp(-\tau)}{1 + \epsilon \tau} \text{ с}^{-1}, \quad \alpha = 2.7 \cdot 10^{-13} \left(\frac{10^4}{T} \right)^{0.9} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}.$$

Общая массовая плотность представляет собой сумму массовых плотностей различных частиц $\rho = \rho_n + \rho_i$. Тепловое давление слагается из парциальных давлений всех частиц, включая вклад электронов $p = [(\rho_n + \rho_i)m + n_e]k_B T$, где k_B — постоянная Больцмана.

2. Безразмерные уравнения

Для удобства вычислений вводим безразмерные величины, определенные следующими нормировками:

$$\tilde{p} = \frac{p}{\rho_0 v_0^2}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad \tilde{v} = \frac{v}{v_0}, \quad \tilde{T} = \frac{T}{T_0}, \quad \tilde{r} = \frac{r}{R_p}, \quad \tilde{t} = \frac{t v_0}{R_p}, \quad v_0 = \sqrt{\frac{k_B T_0}{m}}, \quad X = \frac{\rho_i}{\rho}, \quad \tilde{\Phi} = \frac{R_p}{G M_p} \Phi,$$

где ρ_0 и T_0 — массовая плотность и температура на нижней границе вблизи поверхности планеты.

Переходя к безразмерным переменным, получаем систему уравнений вида

$$\frac{\partial(\tilde{\rho} \tilde{r}^2)}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial(\tilde{\rho} \tilde{v} \tilde{r}^2)}{\partial \tilde{r}} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial(\tilde{\rho} \tilde{v} \tilde{r}^2)}{\partial \tilde{t}} + \frac{\partial[(\tilde{\rho} \tilde{v}^2 + \tilde{p}) \tilde{r}^2]}{\partial \tilde{r}} = -\tilde{\rho} \lambda \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} \tilde{r}^2 + 2\tilde{p} \tilde{r}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial[\tilde{r}^2(0.5\tilde{\rho}\tilde{v}^2 + 1.5\tilde{p})]}{\partial\tilde{t}} + \frac{\partial[\tilde{r}^2\tilde{v}(0.5\tilde{\rho}\tilde{v}^2 + 2.5\tilde{p})]}{\partial\tilde{r}} = -\tilde{\rho}\tilde{v}\lambda\frac{\partial\tilde{\Phi}}{\partial\tilde{r}}\tilde{r}^2 + \\ + \tilde{r}^2\tilde{\rho}(1-X)\left[\tilde{Q} - \tilde{\rho}X\tilde{\Lambda}\exp(-B/\tilde{T})\right], \quad (6)$$

$$\tilde{Q} = 0.5q_0 \int_0^{\pi/2+\arccos(1/\tilde{r})} \exp(-\tau) \sin(\theta) d\theta, \quad (7)$$

$$\tau = a_0 \int_r^\infty \tilde{\rho}(s)(1-X) \frac{sds}{(s^2 - r^2 \sin(\theta)^2)^{1/2}}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}X)}{\partial\tilde{t}} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(\tilde{\rho}X\tilde{v}\tilde{r}^2)}{\partial\tilde{r}} = \tilde{\nu}\tilde{\rho}(1-X)\frac{\tilde{Q}}{q_0} - \tilde{\alpha}\tilde{\rho}^2X^2. \quad (9)$$

Здесь λ , a_0 , q_0 , $\tilde{\Lambda}$, B , $\tilde{\nu}$, $\tilde{\alpha}$ — безразмерные постоянные параметры, определяемые следующими выражениями:

$$\lambda = G \frac{mM_p}{R_p k_B T_0}, \quad a_0 = \frac{\sigma_i \rho_0 R_p}{m}, \quad q_0 = \sigma_i \eta J_\infty \frac{R_p m^{1/2}}{(k_B T_0)^{3/2}}, \quad \tilde{\Lambda} = \Lambda \frac{\rho_0 R_p}{m^2 v_0^3}, \quad B = \frac{118 \cdot 348}{T_0}, \\ \tilde{\nu} = 0.59 \cdot 10^{-7} J_\infty \frac{R_p}{v_0}, \quad \tilde{\alpha} = 2.7 \cdot 10^{-13} \left(\frac{10^4}{T_0}\right)^{0.9} \frac{\rho_0 R_p}{m v_0}.$$

Уравнение (9) относительно доли ионов получено из уравнений (2), (3). В итоге имеем систему безразмерных нестационарных уравнений (4)–(9), определяющих зависимости массовой плотности газа ρ , давления p , радиальной скорости v и относительной концентрации ионов X от времени и радиального расстояния.

В результате нагрева может сформироваться радиальное истечение атмосферных частиц в окружающее космическое пространство. В этом случае наиболее интересен и важен аэродинамический режим, при котором скорость газа монотонно возрастает до сверхзвуковых значений по мере удаления от планеты. Физические граничные условия ставятся на нижней границе атмосферы при $\tilde{r} = 1$, где заданы температура и плотность, а также концентрации компонент атмосферного газа. Верхняя граница задается на достаточно большом расстоянии при $\tilde{r} = R_m$, где скорость потока превышает скорость звука. С этой границы возмущения не распространяются вниз по потоку, а физические величины на ней полностью определяются значениями во внутренней области. В численной схеме значения в граничных точках могут быть найдены из соотношений вдоль характеристик, приходящих из внутренних точек.

Основной интерес представляет нахождение стационарного установившегося решения при постоянных внешних условиях, а также квазистационарного решения в случае медленно меняющихся условий при расчете долговременной эволюции атмосферы. При этом возникает вопрос задания начальных условий, которые физически не влияют на конечное установившееся решение, однако могут вызвать численную неустойчивость при неудачном выборе начального распределения плотности. В работах [1, 2] в качестве начального условия использовалось равновесное изотермическое распределение Больцмана для плотности

$$\tilde{\rho} = \exp[\lambda(1/r - 1)], \quad v = 0.$$

Однако данное условие обеспечивает устойчивый счет лишь при достаточно больших значениях параметра λ ($\lambda \geq 10$) и умеренных значениях параметра a_0 . Эти ограничения можно преодолеть, если при меньших значениях λ в качестве начальных условий задавать результаты расчета, соответствующие $\lambda = 10$. Аналогично, результат расчета, полученный при умеренном значении параметра a_0 , можно использовать в качестве начального распределения при решении задачи для больших значений данного параметра.

3. Численный метод

Система уравнений (4)–(9) может быть записана в векторной форме

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \xi} = \mathbf{S},$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{U} &= \left[\tilde{\rho}, \tilde{\rho}\tilde{v}, \frac{\tilde{\rho}\tilde{v}^2}{2} + \tilde{E}_{th}, \tilde{\rho}X \right] r^3 \ln(R_m), \quad \tilde{r} = (R_m)^\xi, \quad \mathbf{H} = [\tilde{\rho}\tilde{v}, \tilde{\rho}\tilde{v}^2 + \tilde{p}, \tilde{v}(0.5\tilde{\rho}\tilde{v}^2 + \tilde{E}_{th} + \tilde{p}, \tilde{\rho}X\tilde{v})] \tilde{r}^2, \\ \mathbf{S} &= \left[0, \left(-\tilde{\rho}\lambda \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} + 2\frac{\tilde{p}}{\tilde{r}} \right), \left(-\tilde{\rho}\tilde{v}\lambda \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{r}} + \tilde{\rho}(1-X) \left(Q - \rho X \tilde{\Lambda} \exp \left(-\frac{B}{\tilde{T}} \right) \right) \right), \right. \\ &\quad \left. (\tilde{\nu}\tilde{\rho}(1-X) - \alpha\tilde{\rho}^2 X^2) \right] \tilde{r}^3 \ln(R_m). \end{aligned}$$

Введем сетку для вычислений $t_j = j\Delta t$, $r_k = (R_m)^{\xi_k}$, $\xi_k = k/N$, $k = 0, 1, 2, \dots, N$, где R_m — радиус внешней границы расчетной области. При этом шаг по радиусу увеличивается по мере удаления от планеты. Минимальный шаг сетки равен $h_{\min} = (R_m)^{1/N} - 1 \approx \ln(R_m/N)$. Максимальный шаг отличается от минимального постоянным множителем R_m : $h_{\max} = R_m - (R_m)^{(N-1)/N} = R_m(1 - (R_m)^{-1/N}) \approx R_m \ln(R_m)/N$.

Согласно работе [6] пересчет искомых величин на следующий временной шаг выполняется по формуле

$$U^{n+1} = U^n + \delta_1 h^{(1)} + \delta_2 h^{(2)} + \delta_3 h^{(3)} + \delta_4 h^{(4)} \quad (10)$$

с коэффициентами $\delta_1 = 1/6$, $\delta_2 = 1/3$, $\delta_3 = 1/3$, $\delta_4 = 1/6$. Здесь

$$h^{(1)} = -\Delta t D^F[H(U^j)] + \Delta t S(U^j), \quad (11)$$

$$h^{(2)} = -\Delta t D^B[H(U^j + \alpha_2 h^{(1)})] + \Delta t S(U^j + \alpha_2 h^{(1)}), \quad (12)$$

$$h^{(3)} = -\Delta t D^F[H(U^j + \alpha_3 h^{(2)})] + \Delta t S(U^j + \alpha_3 h^{(2)}), \quad (13)$$

$$h^{(4)} = -\Delta t D^B[H(U^j + \alpha_4 h^{(3)})] + \Delta t S(U^j + \alpha_4 h^{(3)}) \quad (14)$$

с коэффициентами $\alpha_2 = 1/2$, $\alpha_3 = 1/2$, $\alpha_4 = 1$; D^F и D^B — конечно-разностные операторы односторонних производных вперед и назад, которые определяются следующими рекуррентными формулами:

$$AD_{k-1}^B + (1-A)D_k^B = \frac{1}{\Delta \xi}(f_k - f_{k-1}), \quad (15)$$

$$AD_{k+1}^F + (1-A)D_k^F = \frac{1}{\Delta \xi}(f_{k+1} - f_k), \quad (16)$$

где $A = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$. Рекуррентные уравнения требуют граничных условий, которые определяются соответствующими граничными шаблонами [6]:

$$D_0^F = \left[\left(-\frac{25}{12} + \frac{17}{12\sqrt{3}} \right) f_0 + \left(4 - \frac{25}{6\sqrt{3}} \right) f_1 - \left(3 - \frac{3\sqrt{3}}{2} \right) f_2 + \left(\frac{4}{3} - \frac{13}{6\sqrt{3}} \right) f_3 - \left(\frac{1}{4} - \frac{5}{12\sqrt{3}} \right) f_4 \right] \frac{1}{\Delta\xi},$$

$$D_0^B = \left[-\left(\frac{25}{12} + \frac{17}{12\sqrt{3}} \right) f_0 + \left(4 + \frac{25}{6\sqrt{3}} \right) f_1 - \left(3 + \frac{3\sqrt{3}}{2} \right) f_2 + \left(\frac{4}{3} + \frac{13}{6\sqrt{3}} \right) f_3 - \left(\frac{1}{4} + \frac{5}{12\sqrt{3}} \right) f_4 \right] \frac{1}{\Delta\xi},$$

$$D_N^F = \left[\left(\frac{25}{12} + \frac{17}{12\sqrt{3}} \right) f_N - \left(4 + \frac{25}{6\sqrt{3}} \right) f_{N-1} + \left(3 + \frac{3\sqrt{3}}{2} \right) f_{N-2} - \left(\frac{4}{3} + \frac{13}{6\sqrt{3}} \right) f_{N-3} + \left(\frac{1}{4} + \frac{5}{12\sqrt{3}} \right) f_{N-4} \right] \frac{1}{\Delta\xi},$$

$$D_N^B = \left[\left(\frac{25}{12} - \frac{17}{12\sqrt{3}} \right) f_N - \left(4 - \frac{25}{6\sqrt{3}} \right) f_{N-1} + \left(3 - \frac{3\sqrt{3}}{2} \right) f_{N-2} - \left(\frac{4}{3} - \frac{13}{6\sqrt{3}} \right) f_{N-3} + \left(\frac{1}{4} - \frac{5}{12\sqrt{3}} \right) f_{N-4} \right] \frac{1}{\Delta\xi}.$$

Для определения этих граничных шаблонов использовались приведенные в работе [6] формулы Тейлора для односторонних производных

$$D_0^F = f' + \Delta\xi \frac{\sqrt{3}}{6} f'' - \Delta\xi^3 \frac{3}{72} f''' + O(\Delta\xi^4), \quad (17)$$

$$D_0^B = f' - \Delta\xi \frac{\sqrt{3}}{6} f'' + \Delta\xi^3 \frac{3}{72} f''' + O(\Delta\xi^4). \quad (18)$$

Эти граничные значения производных приравнивались к линейной комбинации сеточных значений функции в четырех близлежащих узлах сетки с неопределенными коэффициентами:

$$D_0^F = \sum_{k=0}^4 C_{1k} f_k, \quad D_0^B = \sum_{k=0}^4 C_{2k} f_k. \quad (19)$$

Далее в правых частях равенств (19) применялись разложения Тейлора, которые приравнивались к разложениям (17), (18). В результате определялись требуемые коэффициенты C_{1k} , C_{2k} .

Применяя нижнее граничное условие для D_0^B , вычисляем D_k^B из (15) в направлении увеличения номера индекса $k : k = 0, 1, 2, \dots, N$. Затем, используя верхнее граничное условие для D_N^F , вычисляем D_k^F из (16) в направлении уменьшения индекса $k : k = N, N-1, N-2, \dots, 0$. Полученные величины D^B и D^F подставляем в формулы (11)–(14), чтобы определить промежуточные параметры $h^{(1)}, h^{(2)}, h^{(3)}, h^{(4)}$, входящие в формулы (10) для вычисления решения на следующем временном шаге. Используя данный алгоритм, получаем нестационарное решение уравнений гидродинамики, описывающее радиальные потери атмосферных частиц. Это решение эволюционирует во времени до установления стационарных профилей плотности, скорости и температуры атмосферы, которые не зависят от выбранного начального условия. Вблизи поверхности планеты заданы граничные условия для температуры и плотности. А на верхней границе для достаточно большого радиуса, где поток — сверхзвуковой, на каждом шаге

по времени в граничной точке задаем значения искомых переменных равными соответствующим значениям в ближайшем внутреннем узле сетки. Эти условия не влияют на нижние слои атмосферы благодаря сверхзвуковому характеру потока.

4. Результаты

В качестве объектов моделирования рассмотрены реальные экзопланеты TOI-421b и TOI-421c, обнаруженные в 2020 г. и детально описанные в статье [8]. Для этих планет задавались входные физические параметры, представленные в таблице. На рис. 2 показаны радиальные профили скорости и звукового числа Маха для двух планет. Планета TOI-421b имеет меньшую массу и, соответственно, более слабую гравитацию ($\lambda = 20.965$) по сравнению с TOI-421c ($\lambda = 36.2$). Кроме того, эта планета имеет более близкую к звезде орбиту, поэтому получает более интенсивный поток ионизующего излучения. Оба эти фактора (слабая гравитация и сильное излучение) способствуют достижению большей скорости истечения атмосферы.

На рис. 3 для двух планет представлены радиальные зависимости степени ионизации (отношения плотности ионов к общей плотности частиц) и температуры. Для планеты TOI-421b характерны более высокие степень ионизации и максимум температуры, что обусловлено большей интенсивностью излучения, вызывающего ионизацию и нагрев газа. На больших расстояниях температура газа быстро спадает вследствие уменьшения плотности нейтральных частиц, поглощающих излучение, а также адиабатического охлаждения потока газа. В используемой неравномерной сетке шаг уменьшается по мере приближения к поверхности планеты, где градиенты физических параметров растут. На рис. 4, *a* показаны радиальные профили давления и усредненной по углу функции нагрева для экзопланеты TOI-421b. Давление нормировано к его значению на нижней границе. Функция нагрева, имеющая смысл количества поглощаемого тепла, приходящегося на один атом, нормирована к ее значению на верхней границе вдали от планеты. Справа показаны аналогичные профили для более массивной планеты (TOI-421c).

В обоих случаях при удалении от планеты сначала происходит резкое экспоненциальное падение давления, которое далее переходит в плавное степенное убывание. Более массивная планета (TOI-421c) имеет более компактную атмосферу, и поэтому граница зоны тепловыделения располагается ближе к планете ($r = 1.5R_p$), где начинается выделение тепла и отмечается переход закона спадания давления от экспоненциального к степенному. В случае менее массивной планеты (TOI-421b) плотность атмосферного газа медленнее спадает и граница области поглощения тепла располагается дальше от планеты (при $r = 2.5R_p$). Важно отметить, что усредненная функция нагрева более плавно убывает по мере приближения к планете, в то время как неусредненная функция при $\theta = 0$ имеет существенно более резкое падение до нуля. Функции максимально различаются на расстоянии $r = 2.44R_p$. При этом значение усредненной функции нагрева уменьшается на 40 %.

Решаемая система уравнений записана в консервативной форме, что обеспечивает выполнение законов сохранения массы, энергии и импульса для численного решения. Однако подстановка полученных результатов расчета в уравнение Эйлера, отражающее детальный баланс сил, будет давать некоторую невязку, зависящую от используемой разностной схемы. Погрешность оценивается невязкой, определяемой следующим выражением:

Физические параметры планет
Physical parameters of planets

Планета	M_p/M_E	R_p/R_E	T_0, K	$p_0, \text{дин}/\text{см}^2$	d_s, AU	$J_{XUV}, \text{эрн}/(\text{с} \cdot \text{см}^2)$
TOI-421b	7.17	2.68	981.4	5e3	0.056	7452
TOI-421c	16.42	5.09	673.6	5e3	0.1189	1655

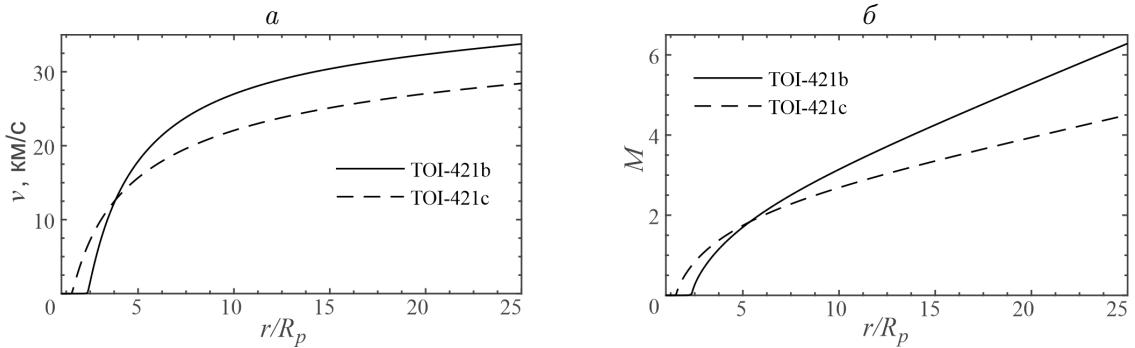


Рис. 2. Профили скорости (a) и числа Маха (б) для двух экзопланет
Fig. 2. Profiles of velocity (a) and Mach number (б) for two exoplanets

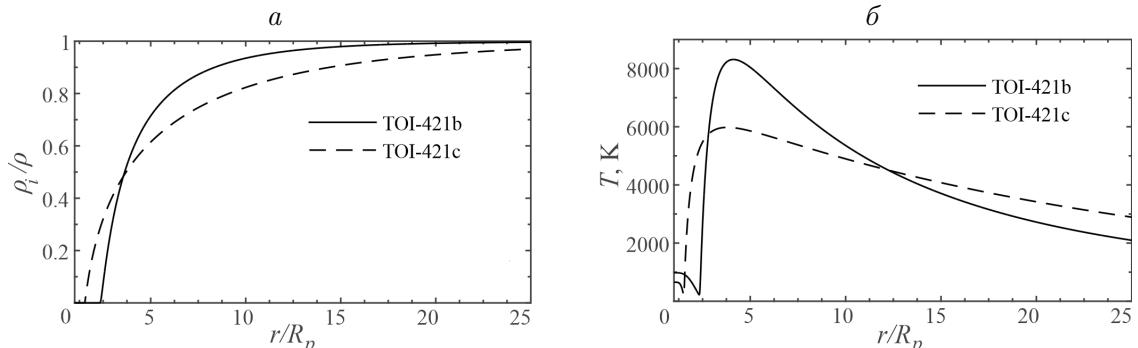


Рис. 3. Профили доли ионизованных атомов (a) и температуры (б) для двух экзопланет
Fig. 3. Profiles of the fraction of ionized atoms (a) and temperature (б) for two exoplanets

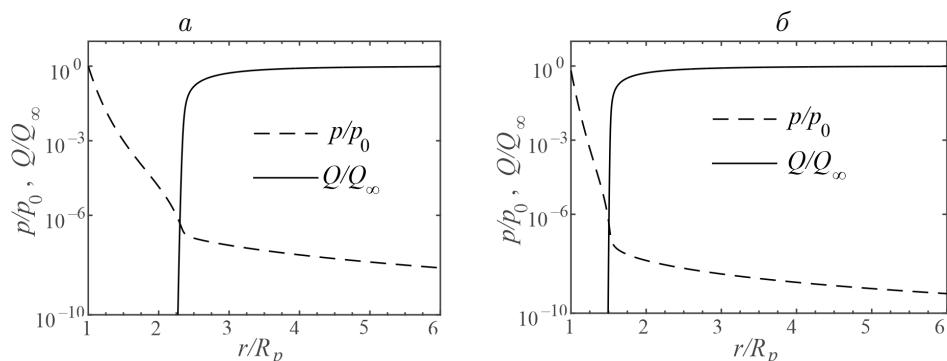


Рис. 4. Профили давления и функции нагрева для экзопланет TOI-421b (a) и TOI-421c (б)
Fig. 4. Profiles of the pressure and heating function for exoplanets TOI-421b (a) and TOI-421c (б)

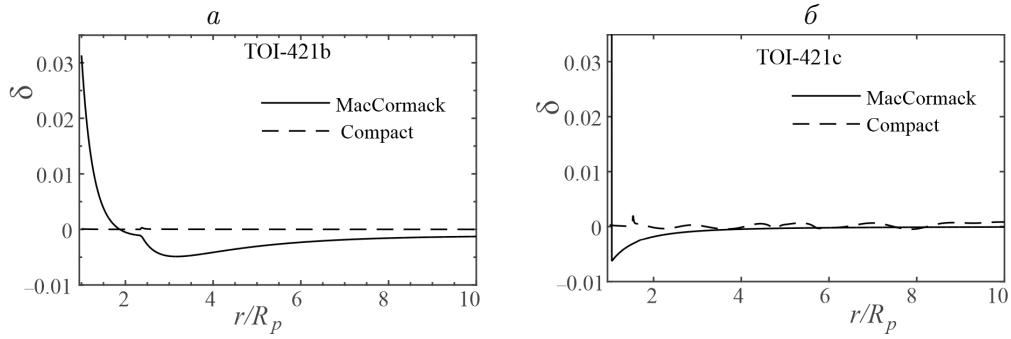


Рис. 5. Погрешности аппроксимации гидродинамического уравнения Эйлера, соответствующие классической схеме Маккормака и используемой в данной работе компактной схеме для обеих планет

Fig. 5. Approximation errors of the hydrodynamic Euler equation corresponding to the McCormack class scheme and the compact scheme used in this work for both planets

$$\delta = \frac{1}{\max |F_g|} \left(v \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + F_g \right),$$

где $F_g = \nabla \Phi$. Величина δ теоретически должна равняться нулю, но в результате счета из-за численной аппроксимации она получается отличной от нуля. Амплитуда отклонения данной величины от нуля зависит от численной схемы и шага сетки.

На рис. 5 показаны профили δ , полученные в результате расчетов как по классической схеме Маккормака [3], так и по используемой в нашей работе компактной схеме для обеих планет. Видно, что классическая схема Маккормака дает довольно большую невязку вблизи нижней границы в зоне гидростатического равновесия и начала перехода в гидродинамический режим, где градиенты плотности и давления довольно велики. Для более массивной планеты (TOI-421c) невязка существенно больше и ее максимум находится гораздо ближе к нижней границе, где градиенты плотности и давления максимальны. При этом компактная схема дает существенно меньшую погрешность и, следовательно, гораздо лучше отрабатывает баланс сил даже вблизи поверхности планет. Важно отметить, что граница зоны гидростатического равновесия располагается тем дальше от планеты, чем меньше ее масса. Поэтому корректное описание этой области наиболее важно для планет относительно малых масс.

Для количественной оценки погрешности и порядка сходимости использовалось правило Рунге. Для этого проведены расчеты на трех вложенных сетках с числами узлов $N_1 = 1000$, $N_2 = 2000$, $N_3 = 4000$. Применение правила Рунге дало интересные результаты. Сходимость оценивалась по максимуму относительных вариаций плотности и температуры, которые имеют большие градиенты. Погрешность по плотности имеет вид

$$\Delta \rho_{1,2} = \max \left(\frac{\rho_{h2} - \rho_{h1}}{\rho_{h1}} \right) = 2.3e-2, \quad \Delta \rho_{2,3} = \max \left(\frac{\rho_{h3} - \rho_{h2}}{\rho_{h2}} \right) = 1.4e-3.$$

Отношение погрешностей дает оценку показателя сходимости по плотности

$$n = \ln \frac{\Delta \rho_{1,2}}{\Delta \rho_{2,3}} / \ln(2) \approx 4.$$

Аналогично определяем погрешность по температуре

$$\Delta T_{1,2} = \max \left(\frac{T_{h2} - T_{h1}}{T_{h1}} \right) = 3.8e-3, \quad \Delta T_{2,3} = \max \left(\frac{T_{h3} - T_{h2}}{T_{h2}} \right) = 5.0e-4.$$

В итоге для показателя сходимости по температуре получаем оценку

$$n = \ln \left(\frac{\Delta T_{1,2}}{\Delta T_{2,3}} \right) / \ln(2) \approx 3.$$

По классической схеме Маккормака порядок сходимости получился около 2. Для двух схем наиболее сильно различаются погрешности по температуре. Так, в случае $N = 1000$ для схемы Маккормака она достигает 20 %, в то время как для компактной схемы составляет всего 0.4 %.

Заключение

Показано, что применение компактной схемы типа Маккормака четвертого порядка на неравномерной сетке позволяет эффективно решать гидродинамическую проблему истечения газа из атмосферы планеты при наличии поглощения внешнего жесткого ультрафиолетового излучения, что важно для моделей эволюции планет. В качестве объектов моделирования рассмотрены две реальные экзопланеты TOI-421b и TOI-421c, значительно отличающиеся по массе и радиусу орбиты. Стационарные распределения плотности, температуры и давления получены в результате численного интегрирования нестационарных уравнений. С течением времени устанавливается искомое стационарное решение, не зависящее от выбора начального условия. Проведено сравнение с классической схемой Маккормака и показано существенное преимущество компактной схемы типа Маккормака. В отличие от классической схемы, компактная схема показала устойчивый счет при предельном значении числа Куранта, равном 1. Больший порядок аппроксимации и запас устойчивости по числу Куранта дают существенный выигрыш по времени счета, так как позволяют решать задачу истечения атмосферы на более крупной сетке и в более широком диапазоне изменения физических параметров планет при сохранении приемлемой точности.

Благодарности. Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (соглашение 075-02-2023-912). Исследования также поддержаны грантом Российского научного фонда № RSF-NSFC 23-47-00084 в части использования компактных разностных схем применительно к астрофизическим задачам.

Список литературы

- [1] Erkaev N.V., Lammer H., Odert P., Kulikov Y.N., Kislyakova K.G., Khodachenko M.L., Gudel M., Hanslmeier A., Biernat H. XUV exposed non-hydrostatic hydrogen-rich upper atmospheres of terrestrial planets. Part I: atmospheric expansion and thermal escape. *Astrobiology*. 2013; 13(11):1011–1029. DOI:10.1089/ast.2012.0957.
- [2] Erkaev N.V., Lammer H., Odert P., Kislyakova K.G., Johnstone C.P., Gudel M., Khodachenko M.L. EUV-driven mass-loss of protoplanetary cores with hydrogen-dominated atmospheres: the influences of ionization and orbital distance. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. 2016; 460(2):1300–1309. DOI:10.1093/mnras/stw935.

- [3] MacCormack R.W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. AIAA Paper. 1969: 69–354. DOI:10.2514/2.6901.
- [4] Kennedy C.A., Carpenter M.H. Several new numerical methods for compressible shear-layer simulations. Applied Numerical Mathematics. 1994; (14):397–433. DOI:10.1016/0168-9274(94)00004-2.
- [5] Hixon R. Evaluation of a high-accuracy MacCormack-type scheme using benchmark problems. Journal of Computational Acoustics. 1998; (6):291–305. DOI:10.1142/S0218396X9800020X.
- [6] Hixon R., Turkel E. Compact implicit MacCormack-type schemes with high accuracy. Journal of Computational Physics. 2000; (158):51–70. DOI:10.1006/jcph.1999.6406.
- [7] Gorbunova K.D., Erkaev N.V. Compact MacCormac-type schemes applied for atmospheric escape problem. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. 2022; 15(4):500–509. DOI:10.17516/1997-1397-2022-15-4-500-509.
- [8] Carleo I., Gandolfi D., Barragan O., Livingston J.H., Persson C.M., Lam K.W., Fulton B.J., Collins K.A. et. al. The multiplanet system TOI-421: a warm Neptune and a super puffy mini-Neptune transiting a G9 V star in a visual binary. The Astronomical Journal. 2020; 160(3):114. DOI:10.3847/1538-3881/aba124.
- [9] Erkaev N.V., Kulikov Y.N., Lammer H., Selsis F., Langmayr D., Jaritz G.F., Biernat H.K. Roche lobe effects on the atmospheric loss from “Hot Jupiters”. Astronomy & Astrophysics. 2007; (472):329–334. DOI:10.1051/0004-6361:20066929.
- [10] Murray-Clay R.A., Chiang E.I., Murray N. Atmospheric escape from Hot Jupiters. Astrophysical Journal. 2009; (693):23–42. DOI:10.1088/0004-637X/693/1/23.

MATHEMATICAL MODELLING

DOI:10.25743/ICT.2024.29.1.002

Hydrodynamic models of outflow of the planetary atmospheres

N. V. ERKAEV*, K. D. GORBUNOVA

Institute of Computational Modelling SB RAS, 660036, Krasnoyarsk, Russia

*Corresponding author: Nikolai V. Erkaev, e-mail: erkaev@icm.krasn.ru

Received February 23, 2023, revised April 14, 2023, accepted April 21, 2023.

Abstract

The compact McCormack-type difference scheme with the fourth order of accuracy and a nonuniform grid is adapted for solving the hydrodynamic problem of the escaping planet’s atmosphere in the presence of absorption of external extreme ultraviolet radiation, which is important for modelling of planetary evolution. This problem requires a high accuracy difference scheme. Two real recently discovered exoplanets TOI-421b,c, significantly differing in mass and orbit radius, were considered as simulation objects. A peculiarity of this problem is the nonlocal heating function, which integrally depends on the distribution of physical quantities over the radial distance and spherical angle. In particular, this function decreases very steeply when distance near the planet decreases. Therefore, an uneven difference grid is used with a decreasing step towards the planet. As a result of numerical integration of time dependent spherically symmetric hydrodynamic equations, radial distributions of density, temperature, pressure and velocity were obtained. The heating function was averaged over spherical angles. The model took into account such fundamentally important physical processes

as ionization and recombination, as well as Lyman-alpha radiation cooling. When carrying out calculations, hydrodynamic equations were solved in a conservative form, ensuring conservation of mass, momentum and energy. In this case, Euler's hydrodynamic equation, which takes into account the detailed balance of acting forces, was used to estimate the approximation error for the compact difference scheme, which was compared with a similar error for the classical McCormack scheme. The comparison shows a significant advantage of the compact difference scheme used in this research.

Keywords: hydrodynamic model, compact finite difference scheme, atmosphere.

Citation: Erkaev N.V., Gorbunova K.D. Compact finite difference scheme for the hydrodynamic outflow of planetary atmospheres. Computational Technologies. 2024; 29(1):5–17. DOI:10.25743/ICT.2024.29.1.002. (In Russ.)

Acknowledgements. This work is supported by the Krasnoyarsk Mathematical Center and financed by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation in the framework of the establishment and development of regional Centers for Mathematics Research and Education (agreement 075-02-2023-912). This research is also supported by the Russian Science Foundation (grant No. RSF-NSFC 23-47-00084) regarding the use of compact difference schemes in application to astrophysical problems.

References

1. Erkaev N.V., Lammer H., Odert P., Kulikov Y.N., Kislyakova K.G., Khodachenko M.L., Gudel M., Hanslmeier A., Biernat H. XUV exposed non-hydrostatic hydrogen-rich upper atmospheres of terrestrial planets. Part I: atmospheric expansion and thermal escape. Astrobiology. 2013; 13(11):1011–1029. DOI:10.1089/ast.2012.0957.
2. Erkaev N.V., Lammer H., Odert P., Kislyakova K.G., Johnstone C.P., Guedel M., Khodachenko M.L. EUV-driven mass-loss of protoplanetary cores with hydrogen-dominated atmospheres: the influences of ionization and orbital distance. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2016; 460(2):1300–1309. DOI:10.1093/mnras/stw935.
3. MacCormack R.W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. AIAA Paper. 1969: 69–354. DOI:10.2514/2.6901.
4. Kennedy C.A., Carpenter M.H. Several new numerical methods for compressible shear-layer simulations. Applied Numerical Mathematics. 1994; (14):397–433. DOI:10.1016/0168-9274(94)00004-2.
5. Hixon R. Evaluation of a high-accuracy MacCormack-type scheme using benchmark problems. Journal of Computational Acoustics. 1998; (6):291–305. DOI:10.1142/S0218396X9800020X.
6. Hixon R., Turkel E. Compact implicit MacCormack-type schemes with high accuracy. Journal of Computational Physics. 2000; (158):51–70. DOI:10.1006/jcph.1999.6406.
7. Gorbunova K.D., Erkaev N.V. Compact MacCormac-type schemes applied for atmospheric escape problem. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. 2022; 15(4):500–509. DOI:10.17516/1997-1397-2022-15-4-500-509.
8. Carleo I., Gandolfi D., Barragan O., Livingston J.H., Persson C.M., Lam K.W., Fulton B.J., Collins K.A. et. al. The multiplanet system TOI-421: a warm Neptune and a super puffy mini-Neptune transiting a G9 V star in a visual binary. The Astronomical Journal. 2020; 160(3):114. DOI:10.3847/1538-3881/aba124.
9. Erkaev N.V., Kulikov Y.N., Lammer H., Selsis F., Langmayr D., Jaritz G.F., Biernat H.K. Roche lobe effects on the atmospheric loss from “Hot Jupiters”. Astronomy & Astrophysics. 2007; (472):329–334. DOI:10.1051/0004-6361:20066929.
10. Murray-Clay R.A., Chiang E.I., Murray N. Atmospheric escape from Hot Jupiters. Astrophysical Journal. 2009; (693):23–42. DOI:10.1088/0004-637X/693/1/23.