doi: 10.3969/j.issn.1000-8349.2018.02.04

宇宙大尺度结构数值模拟的研究进展

唐 林^{1,2},林伟鹏^{1,3}

(1. 中国科学院 上海天文台 星系与宇宙学重点实验室,上海 200030;
2. 中国科学院大学,北京 100049;
3. 中山大学 物理与天文学院,广州 510275)

摘要: 宇宙的结构是由初始密度扰动发展而成的。在引力和宇宙膨胀的作用下,初始密度扰动不断增长,经过线性和非线性阶段,逐渐演化为现今的宇宙结构。在一个给定的宇宙学模型下,可以用一系列动力学方程来描述宇宙中暗物质和重子物质的运动及演化历史。在过去的几十年间,随着算法的完善和计算机技术的发展,从最初几十个粒子的纯引力模拟到10¹⁰ 个粒子在秒差距量级的多体加流体动力学模拟,大量不同的数值模拟技术被用来研究宇宙结构的形成和演化。在这个过程中,数值模拟的分辨率和精度不断提高,模型中对重子物质物理过程的描述也越来越完善。这些模拟技术与观测结果相结合,使人们对宇宙的大尺度结构以及星系团的形成和演化有了更深刻的理解,也在一定程度上影响了观测的发展方向和设备研发。不同数值模拟结果在纯引力研究方面得到了较好的统一,但不同的星系模型使得流体模拟的结果存在较大的差异。

关键词:宇宙大尺度结构;星系形成和演化;数值模拟;多体动力学;流体动力学

中图分类号: P159.5 文献标识码: A

1 引 言

从 20 世纪初 Zwicky^[1]首次从星系团中发现大量不可视物质开始,不断累积的天文观测 证据说明,在宇宙中起主导作用的物质是暗的,以及非重子性的,现在一般称之为暗物质 (dark matter, DM)。这些证据主要包括旋涡星系的转动曲线^[2]和引力透镜^[3]等。随后的宇 宙加速膨胀证据^[4, 5]表明,对宇宙总能量的贡献中需要一种特殊的能量,现在称之为暗能量 (dark energy, DE)。对于暗物质,可以提出一系列的理论框架来描述,可将之看作是标准粒 子模型的拓展^[6]。在过去的几十年间,人们根据暗物质的质量发展出多种不同的暗物质模 型,其中最常见的有热暗物质模型 (hot dark matter, HDM)^[7-9]、温暗物质模型 (warm dark matter, WDM)^[10-12]和冷暗物质模型 (cold dark matter, CDM)^[13-15]。根据对密度扰动功率谱

资助项目:国家自然科学基金面上项目 (11473053);国家自然科学基金重点项目 (11233005);国家自然科学基金天文联合基金重点项目 (U1331201);国家重点研发计划 (2017YFB0203300/02);科技部 973 项目 (2015CB857001)

收稿日期: 2017-09-18; 修回日期: 2018-01-03

通讯作者: 唐林, tangl08@shao.ac.cn

小尺度端谱指数 n 的不同修正, CDM 模型又可以分成倾斜冷暗物质模型 (tilted cold dark matter, TCDM)、含宇宙学常数的冷暗物质模型 (Λ cold dark matter, Λ CDM, 即平坦宇宙模型)、冷暗物质开模型 (open cold dark matter, OCDM) 和标准冷暗物质模型 (standard cold dark matter, SCDM) 等。1996 年 Dodelson 等人^[16]对不同的 CDM 模型做了较详细的总结。 重子声波震荡、引力波探测、星系的大尺度分布和星系团的性质等大量的观测结果,都能很好地与平坦宇宙模型 (Λ CDM) 的预测结果相符合,因而确定了 Λ CDM 的理论地位。

由于宇宙学的研究对象在质量和物理尺度上都极其巨大 (质量约为 $10^6 M_{\odot}$, 尺度接近 h^{-1} kpc 或以上,其中 M_{\odot} 为太阳质量,h 为以 $100 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{Mpc}^{-1}$ 为单位的哈勃常数),因此,不能直接在宇宙中进行实验。宇宙大尺度结构的模拟、星系团形成和演化的模拟等宇宙 学数值模拟,为人们研究宇宙提供了一个优秀的实验平台,极大地提高了人们对暗物质的非 线性引力聚集、星系团的形成和演化、单独的星系之间的相互作用,以及星系际气体的认识,加深了对宇宙大尺度结构以及星系形成和演化的理解。此外,宇宙学数值模拟还可以指导新的观测方式的提出和设备的开发,并通过宇宙学数值模拟与观测对比为修改宇宙学的物理基 础提供很好的建议。同时,数值模拟的进步也离不开计算机技术和数值算法的发展。在算法 成熟和完善的前提下,要得到更加强而有效的数值模拟,计算机技术的进一步发展和应用是 首要条件。

20世纪40年代之前,出现了第一代多体引力模拟^[17]。在20世纪60年代,第一次出现 了用数字计算机来模拟天体物理的多体模型^[18-20]。这些模型的粒子个数都非常少,最多只有 100个粒子。在20世纪70年代,人们开始在模型中加入气体粒子来研究星系团的坍缩和演 化^[21-23],其中比较成功的是 Peebles^[22]发展的包含 300个粒子的第一代电子计算机多体数值 模拟。第一次真正意义上的宇宙学大尺度结构数值模拟是 Press 和 Schechter^[24]以及 Haggerty 和 Janin^[25]分别在研究星系团的质量分布和聚集性质时给出的。1977年 Gott^[26]总结了早期数 值模拟对星系形成和演化的研究。

从 20 世纪 80 年代开始,由于天体物理基础理论的突破性进展和计算机技术的迅速发展^[27-31],相对精确的宇宙学模型得以建立,高分辨率的大规模数值模拟得以实现。这一时期的数值算法大多采用直和 (direct sum)算法来计算引力。在有限的计算机能力下,这种方法限制了数值模拟的分辨率、精度和模拟粒子数目。

为了提高计算效率和数值模拟的规模,人们设法修改计算引力的方式。1980 年 Peebles^[32]采用非碰撞的玻尔兹曼方程 (collisionless Boltzmann equation),给出了牛顿力 学在宇宙学中的近似形式,包括牛顿动力学的近似方程和泊松方程,并在此基础上发展出 了两种不同的数值算法——树算法 (tree algorithm)^[33, 34] 和粒子-网格 (particle-mesh, PM) 算 法^[35],由此衍生出了直和算法与树算法的组合算法 (hybrid)、直和算法与粒子-网格算法的 组合算法 (particle-particle/particle-mesh, P³M)^[36]以及树算法与粒子-网格算法的组合算法 (treePM)。

20 世纪 80 年代出现了第一代 CDM 宇宙学多体数值模拟^[15, 37]。随后,各种模拟与观测 结果相结合,进一步证实了 ΛCDM 模型下的宇宙学基础。20 世纪 90 年代,标准宇宙模型的 建立推进了第一代 ΛCDM 宇宙学多体数值模拟的出现,例如,1996 年 Klypin 等人^[38]提出 了一系列标准宇宙背景探测器数值模拟 (COBE-normalized simulation),并在 ACDM 宇宙学 模型下,研究了星系团的小尺度功率谱和相关性函数。随着计算机技术的进一步发展,出现 了更大规模、更高分辨率的多体数值模拟^[39-43]。但是这些多体模拟的结果与观测相比有许多 不符,例如,星系团的大尺度聚集性与观测相比要小得多^[44],银河系的矮卫星星系的大规模 巡天得到的数目明显比纯暗物质数值模拟的预言结果要少得多^[45]。这甚至引起了人们对冷暗 物质模型的怀疑,迫使人们去修正宇宙学模型,或者考虑温暗物质模型,或者在数值模拟中 加入更多的物理过程。对于宇宙学基础的修正,人们更倾向于通过进一步的天文观测来进行, 例如,加大红移星系巡天的规模 (包括巡天的深度和广度两个方面)^[46,47],提高宇宙微波背景 辐射^[48]和宇宙学常数的测量精度^[49-51]等。对于数值模拟的算法,人们试图通过用流体动力学 方程描述气体粒子的运动来进行改进。

最初考虑气体的宇宙学模拟只具有一维性质,气体和暗物质粒子被看作是在一个平面上。这类模拟可以用来研究在大尺度初始密度扰动下的非线性结构的形成^[52, 53],并在模型中简单地加入气体的物理过程^[54]。流体动力学具有很好的拉格朗日 (Lagrangian) 性质,因此人们将在 20 世纪 70 年代发展的平滑粒子流体动力学 (smooth particle hydrodynamics, SPH) 算法^[55, 56] 加入到了多体模型中,发展出了最初的以质量为处理对象的天体物理 SPH 算法^[57, 58]。同时,由于流体动力学方程具有欧拉方程的性质,因此,人们利用欧拉场方程数 值求解场动力学量的近似方式^[59],发展出了以空间为处理对象的欧拉算法^[60-62]。但是应用这 些算法的数值模拟对星系形成和演化的预言仍然与观测存在较大的偏差。在近 20 年内,人们 通过观测逐渐完善了对星系的形成和演化中较重要的物理过程,包括最初的辐射冷却、光子 电离和再结合、辐射转移,到之后发现的超新星和活动星系核反馈,以及恒星和黑洞的形成 和演化等的描述,并逐渐发展出了比较完整的流体动力学宇宙学数值模拟^[63-67]。

本文总结性地描述宇宙学数值模拟的研究和进展。第2章将介绍数值模拟的基础理论, 包括宇宙学基础 (第2.1节)和动力学基础 (第2.2节);第3章将重点介绍数值算法基础;第 4章将对目前流行的数值模拟程序进行比较;第5章将相对完整地总结现代宇宙学中常用的 数值模拟;第6章将对此研究进展做出总结和展望。

2 宇宙学大尺度数值模拟的基础

2.1 宇宙学基础

一个完整的宇宙学描述以及对处理对象的动力学描述,是建立宇宙学数值模拟的基础。 热大爆炸模型^[28, 68]的成功建立,对宇宙的极早期演化给出了一个简单清晰的描述,并提出 了宇宙结构形成和演化的初始条件的概念。这个初始条件现在一般称为宇宙原初密度扰动。 Efstathiou 等人^[30]将高斯随机场应用在描述原初扰动中,引出了原初扰动的数学描述,即两 点相关函数和功率谱。多种形式的暴胀模型都预言了一种幂律形式的原初扰动谱,其谱指数 为1 对应了标度不变的 Harrison-Zel'dovich 谱的扰动^[69, 70]。该扰动谱通过 20 世纪 60 年代天 文学的四大发现之一——微波背景辐射^[71, 72]和富星系团数目的观测得到证实。同时,暗物质 物理模型的不断发展使得人们对宇宙在物质为主时期的演化有了更深的理解^[27, 73-75]。于是, 基于热大爆炸和暗物质模型理论,以宇宙学原理和爱因斯坦广义相对论为理论框架基石,人 们构建了标准的宇宙学模型。根据宇宙学原理,宇宙介质和时空在足够大的尺度上是均匀和 各向同性的,可以用罗伯逊-沃克度规(Robertson-Walker metric)来描述:

$$ds^{2} = c^{2}dt^{2} - a^{2}(t)\left(\frac{dr^{2}}{1 - Kr^{2}} + r^{2}d\theta^{2} + r^{2}\sin^{2}\theta d^{2}\phi\right) \quad , \tag{1}$$

其中, c 为光速, K 是曲率因子, t 为时间, a(t) 是宇宙尺度因子, r, θ , ϕ 组成共动坐标系 统。将这个度规代入爱因斯坦场方程, 就可以得到两个弗里德曼 (Friedmann) 解, 即弗里德 曼方程:

$$8\pi G\rho = 3(\frac{\dot{a}^2}{a} + \frac{3Kc^2}{a^2} - \Lambda),$$
(2)

$$\frac{4\pi G}{3}(\rho + 3\frac{P}{c^2}) = -\frac{\ddot{a}}{a} + \frac{\Lambda}{3},\tag{3}$$

其中, *G* 是引力常数, ρ 是宇宙平均密度, *P* 是压力, *A* 是宇宙学常数。该方程组描 述了 *a*(*t*) 的演化。我们可以进一步定义三 个宇宙学基本参数,来描述宇宙的演化: 宇 宙物质密度参数 $\Omega_m = 8\pi G\rho/3H^2$,哈勃常 数 *H* = \dot{a}/a 和宇宙学常数 *A*。综合球状星 团的年龄估计、宇宙微波背景 (cosmic microwave background, CMB) 观测、富星系 团 (cluster) 数目估计、超新星 (supernova, SNe) 的观测等,低密度的平坦宇宙,即 ACDM 模型与观测结果比较符合^[76]。如 图 1 所示,三种观测结果的重叠区域为 $\Omega_m \approx 1/3, \Omega_A = 2/3$ 的平坦宇宙。图中 Ω_m, Ω_k 和 Ω_A 分别代表宇宙物质密度参数、 宇宙学常数参数和宇宙曲率参数。



0.0

2.2 动力学基础

人们普遍认为,宇宙的当前结构是由于宇宙早期很小的密度扰动发展而成的,现在观测 到的星系、星系团等结构都是由这个扰动在引力作用下增长而最终形成。因此,宇宙的动力 学理论主要涉及在密度扰动的演化下,宇宙物质的运动历史。密度扰动的演化可以分成线性 演化和非线性演化。实际上,第一代天体的形成就意味着非线性演化已经开始,而之前的密 度扰动都可以看成是线性的。在线性区域,牛顿理论可以对广义相对论做出很好的近似。用 线性的动力学来描述密度扰动,从理论上可以得到精确的计算结果,并与微波背景辐射各向 异性的观测结果比较,确定关键宇宙学参数的取值。利用经典的流体力学方程组,如连续性 方程、动力学欧拉方程 (Euler equation) 和泊松方程 (Poisson equation) 等,考虑小扰动和无 碰撞的情况下,在膨胀宇宙中,可以得到密度扰动随时间的演化方程,从而得出判断结构形成的判据——金斯质量和金斯波长。在不同的宇宙时期,考虑不同的状态方程,可以得到不同的演化结果。

密度扰动的非线性演化在简化的情况下,有以下几种应用较广的模型:球对称坍缩模型^[77]、Press-Schechter 质量函数^[24]、椭球模型^[78]和 Zel'dovich 近似^[79, 80]等。由于在非线性演化过程中发生的物理过程十分复杂,因此,不可能用严格的解析方法来描述。随着计算机技术的飞速发展和数学算法的完善,数值模拟越来越多地应用在宇宙学中。

3 宇宙学大尺度数值模拟的算法

在标准宇宙学模型——ΛCDM 模型^[14]下,利用牛顿动力学的宇宙学近似^[32],并用一个 高斯随机场^[30]来描述初始的物质密度涨落,可以建立一个宇宙学的数值模拟,以研究宇宙的 大尺度结构和星系团的形成和演化。该模拟主要分成两种情况: (1) 纯引力的多体近似。这 种处理只考虑暗物质的存在和引力作用。在动力学上可以用非碰撞的玻尔兹曼方程和泊松方 程来处理粒子的运动。由于计算引力的方法不同,可以将算法分成直和算法^[17]、树算法^[33]、 粒子-网格算法^[35]和组合算法^[36]。(2) 加上宇宙中的重子物质。宇宙中的重子物质一般视为 无粘性的流体。在动力学上可以用经典流体动力学方程组来描述粒子的运动。根据处理对 象的不同,可以将算法分成两种: (1) 拉格朗日算法,即以粒子为对象,对粒子质量进行离 散化处理,其中最常用的为 SPH 算法^[55]; (2) 欧拉或网格化 (Eulerian/grid-basd) 算法,即 以空间为对象,对空间进行离散化处理,其中最常用的为自适应精细化网格 (adaptive mesh refinement, AMR) 算法^[60-62]。

3.1 纯引力的多体近似算法

在只考虑暗物质和引力的情况下,可以将暗物质理想化为非碰撞的、非相对论的粒子场。 粒子的运动可以由一个时空分布方程 *f*(*x*, *p*, *t*) 来描述,其中 *x* 为共动坐标,*p* 为宇宙学动 量,*t* 为时间。在牛顿近似下,描述粒子运动的非碰撞的玻尔兹曼方程如下:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{ma^2} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - m \nabla \Phi \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0 \quad , \tag{4}$$

其中, Φ 是引力势能, G 为引力常数, m 为粒子质量, a 为宇宙尺度因子。再结合泊松 方程:

$$\nabla^2 \Phi(\boldsymbol{x}, t) = 4\pi G a^2 [\rho(\boldsymbol{x}, t) - \overline{\rho}(t)] \quad , \tag{5}$$

可以得到粒子的运动和演化历史,其中 $\bar{\rho}(t)$ 为宇宙背景密度。式(4)可在膨胀宇宙中通过广义相对论在小尺度上的牛顿近似得到^[32],并由此可得出:

$$\boldsymbol{p} = ma^2 \dot{\boldsymbol{x}} \quad , \tag{6}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -m\nabla\Phi \quad , \tag{7}$$

$$\boldsymbol{v} = a\dot{\boldsymbol{x}}$$
 , (8)

以上三个方程联立就可以得到粒子的运动方程:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} + \boldsymbol{v}\frac{\dot{a}}{a} = -\frac{\nabla\Phi}{a} \quad , \tag{9}$$

其中 v 为粒子的运动速度。于是,两种不同的数学解法发展出了不同的数值算法:用直和法和树算法直接求解粒子的运动方程和用粒子-网格算法求解泊松方程。在牛顿近似下的推导并不能完全展示宇宙学的物理意义。Dodelson^[81]给出了在广义相对论基础下 CDM 模型的玻尔兹曼方程。

3.1.1 直和算法

直接求和是解决多体问题最直接,也是最准确的方法,但在计算过程中会出现两个问题: 首先,算法中定义的粒子并不能代表一个个单独的暗物质粒子,而只是体现了粒子质量的蒙 特卡罗性质,因此只能代表粒子的统计性质;其次,在模拟过程中,粒子的数目不可能与真 实宇宙的粒子数相当,于是就会在相邻粒子间出现虚假的两体相关性。为了减小这类情况的 影响,一般是在模拟中引入一个平滑长度 ϵ 来平滑相邻粒子间的引力,其大小为粒子平均距 离的 0.05 ~ 0.2 倍。由于模拟的计算时间正比于 N² (N 为粒子数目),因此,在大规模计算 时,会出现费时问题。

为了保证计算的精确性,在不修改算法的前提下,人们发展出了一种特殊的硬件技术——GRAPE (gravity pipe)^[82, 83]。它用一种特制的集成电路来计算引力,其速度快于传统的计算方式^[84]。随后的 GRAPE-2 到 GRAPE-6^[85-89]进一步提高了粒子的计算精度和粒子规模,并缩短了计算时间。另外,这个技术也可以与其他算法相结合,如与树算法相结合发展出 GRAPE-1A^[90]等,与 P³M 算法相结合发展出 P3MG3A 程序^[91]和 Phantom-GRAPE^[92]等。

3.1.2 树算法

在不能完美解决大规模和高精度数值模拟计算费时问题的情况下,Appel^[33]以及 Barnes 和 Hut^[34]先后发展出了一种分层的多级展开算法来解决多体问题,具体分层方法参见文献 [34, 63]。该方法称为八叉树 (octree) 结构法。为了得到这个八叉树结构,普遍的做法是:首 先将全空间分成 8 个子空间,每个子空间的边长是原空间的一半;再判断每个子空间内粒子 个数,数目大于 1 的子空间再继续进行八空间的分割;重复以上过程,直到每个子空间都只 包含 1 个或 0 个粒子。由此形成的空间树结构如图 2 所示。另外,也可以通过其他方法来得 到以上树结构,如最近粒子对方法 (nearest-neighbour pairing)^[93, 94]等。但是通过以上的树结 构来计算引力会造成粒子对的相互作用不对称。于是,作为标准树算法的延展,快速多极法 (fast multipole method, FFM)^[95]可以解决用原始树算法计算引力方面存在的问题,从而更 好地满足物理量守恒要求。该算法仍然是用来直接求解粒子的引力势能,例如,求粒子 p 的 引力时,从代表整个空间的根节点开始,并做判断:节点代表的网格大小 l 与粒子 p 到这个 网格的中心质量点的距离 D 的比是否小于一个定值 θ (通常情况下, $\theta \approx 1$)?若满足,就计算 这个网格中所有其他粒子对粒子 p 的引力;反之,则不计算。简单来说,树算法与直和法的 不同点在于,树算法将粒子分成多个层级,只计算相邻层级间的引力,从而将计算的时长减 小为与 *N* lg *N* 成正比。Barnes 和 Hut^[96]公开了他们的模拟程序,从而使树算法得到了广泛 的应用和发展。



图 2 二维下的八叉树结构示意图^[34]

除了以上提及的八叉树算法,还有一类并行的二叉树结构引力 (parallel k-d tree gravity, PKDGRAV) 算法^[97]。在一般的树算法中,引力展开到二阶精度,而在 PKDGRAV 中,引力展开到四阶。在同样的精度下,四阶展开可以得到更准确的质量分布模拟,但需要将根节 点划分为更小的节点,这就需要更大的计算量。然而利用张量的对称性,可以大大简化计算 过程。利用二叉树结构可以很自然地将引力计算扩展到一个并行的、分布式树结构的任意数 量处理器中进行,并且能很好地匹配计算机数据存储中的区域分解 (domain decomposition) 技术。2004 年 Wadsley 等人^[98] 将 PKDGRAV 与 SPH 相组合,发展了 GASOLINE 程序,以解决宇宙学中的流体力学问题。此外,在展开到更高阶引力计算的情况下,Stadel^[97]和 Potter 等人^[99]分别发展了 PKDGRAV2 和 PKDGRAV3,并将其大量应用于各个尺度的天体 物理数值模拟中^[97,100,101]。

树算法有很多的优点^[102]。除了计算速度快之外,其引力的误差可以通过展开的层级数目 来限定,如展开到二级或更高的层级。也可通过增大θ的值来控制引力的计算误差。由于树 结构对全空间都可以覆盖,因此,该算法可以灵活地应用在任何聚集结构中,并能自动改善 模拟的分辨率。由于其不存在任何的几何束缚,因而可以与其他积分方式相结合。但是这个 算法在最初的时候存在两个较大的问题,即所占用的储存空间很大和不能提供初始边界条件。 随着计算机硬件的发展,数据的储存方式有了很大的改进,因此,储存空间的问题得到了较 大的改善。此外,通过埃瓦尔德求和 (Ewald summation)^[103]等其他程序,初始边界条件问题 也得到了解决。

3.1.3 粒子-网格算法

在数值模拟中,粒子的运动历史可以通过求解泊松方程得到。快速傅里叶变换 (fast Fourier transform, FFT) 对于求解泊松方程是一种非常有效和快速的方法^[104, 105]。人们利用 FFT 发展出了一种基于网格化处理求解泊松方程的多体数值算法——粒子-网格算法。用 粒子-网格算法求解粒子运动的具体过程可以分成三步: (1) 向网格中分配质量; (2) 在网 格中求解泊松方程; (3) 根据势能计算引力,并将引力插入到每个粒子位置。Hockney 和 Eastwood^[35]总结了三种向网格中分配粒子质量的方式:最近格点 (nearest grid point, NGP)

$$W(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j) = \int \hat{W}(\frac{\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i}{L}) S(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_j, L) d\boldsymbol{x} \quad , \tag{10}$$

$$\hat{W} = \begin{cases} 1 , & |\boldsymbol{x}| < 0.5 \\ 0 , & |\boldsymbol{x}| \ge 0.5 \end{cases}$$
(11)

其中, W 为权重函数; S 为形状函数, 它由不同的分配方法决定; x 为粒子的坐标, 其不同的下标代表不同的粒子; L = nl, 其中 l 表示网格空间大小, n 为倍数。于是在分配点的密度 ρ_i 为:

$$\rho_i = \frac{1}{L^3} \sum_j m_j W(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i) \quad .$$
(12)

NGP, CIC 和 TSC 方法分别对应于一维、二维和三维 (或求和个数),其对应的形状函数分别 为 δ 函数、 $\hat{W}(\boldsymbol{x}/L)$ 和 1 – $|\boldsymbol{x}/L|$ 。在傅里叶空间,引力势的泊松方程解为:

$$\hat{\boldsymbol{\Phi}}(\boldsymbol{k},t) = \hat{\boldsymbol{g}}(\boldsymbol{k})\hat{\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{k},t) = -4\pi G a^2 \frac{\hat{\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{k},t)}{k^2} \quad , \tag{13}$$

其中, k 为波矢, $\hat{\boldsymbol{\theta}}(\boldsymbol{k},t)$, $\hat{\boldsymbol{g}}(k)$ 和 $\hat{\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{k},t)$ 分别为势能、格林函数和密度函数的傅里叶变换式。 于是,引力可以通过求解方程 $f(\boldsymbol{x}) = -\nabla \boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{x})$ 得到。通过梯度的有限差分形式,可以用数 值方法求解引力。例如,势能展开到二阶时,在 (i, j, z) 处的导数形式可写成:

$$f_{i,j,z}^{(x)} = -\frac{\Phi_{i+1,j,z} - \Phi_{i-1,j,z}}{2L} \quad , \tag{14}$$

展开到四阶时,可写成:

$$f_{i,j,z}^{(x)} = -\frac{4}{3} \frac{\Phi_{i+1,j,z} - \Phi_{i-1,j,z}}{2L} + \frac{1}{3} \frac{\Phi_{i+2,j,z} - \Phi_{i-2,j,z}}{4L} \quad , \tag{15}$$

其中, $f 和 \Phi$ 分别为引力和势能。最后,引力必须通过以下方式插入原来的位置:

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_j) = \sum_i W(\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i) \boldsymbol{f}_i \quad . \tag{16}$$

Hockney 和 Eastwood^[35]详细地描述了以等离子体为模拟对象的粒子-网格算法的具体过程,并给出了每个步骤的数值形式。粒子-网格算法在计算过程中体现了自动的周期边界条件性质,并且在速度上比树算法快,其运算速度正比于 *N* + *N*g lg *N*g,其中 *N*g 是网格点的数目。但是提高速度的代价是降低了格点尺度范围内的引力精度,因此,粒子-网格算法并不适用于高空间分辨率的数值模拟。

3.1.4 组合算法

为了提高算法的精度和运行速度,人们将粒子-网格算法与直和法或树算法相结合,形成了组合算法 P³M/treePM,其中,P³M 是将直和算法应用在小于 2 倍或 3 倍的网格间距的尺度内。Hockney 等人^[106]第一次在等离子体物理中应用这种算法。随后,Hockney 和 Eastwood^[107]首次把这种算法应用在宇宙学中。在宇宙学的应用过程中,组合算法得到了极大的发展^[108, 109]。

P³M 算法通过与直和算法的组合可以较容易地获得高精确度的数值模拟。但是,由于致 密区域内有很强的聚合性,P³M 算法在这些区域的计算很费时,从而造成运算速度的下降。 解决的办法是将长程力与短程力分别处理。另一种可行的解决方案是将粒子-网格算法与树算 法相组合^[110,111](treePM 算法),或利用计算速度更快的硬件设备^[91,112]。粒子-网格算法与树 算法的组合算法应用较广的有两种:一种为传统组合算法 (TPM),它仅在高密度区域利用树 算法来计算短程力,以此提高算法的运行速度;另一种为新型组合算法 (treePM),它通过修 改树算法的引力计算方式来提高运行速度。

另一方面,大量的研究关注于如何修改网格的划分方式,如自适应精细化网格修正法 (adaptive or mesh-refine P³M method)^[113]、AMR 算法^[114-116]、移动网格 (moving mesh)^[117, 118]和非结构网格 (unstructured mesh)^[119]等。这些方法使得粒子-网格算法对空间的划分更适合宇宙粒子在不同区域的运动情况,提高了数值模拟的分辨率和精确度,同时为流体动力学算法的空间网格描述提供了大量有效的工具。图 3 给出了 1970—2005 年多体数值算法在模拟规模上的变化^[39, 120]。从图中最右边的点可以看出,算法的改进要稍快于计算机CPU 能力的提高。这一点对于 2010 年之后的算法表现得更加明显^[120]。



图 3 1970—2005 年多体数值模拟在模拟规模上的变化^[39]

3.2 流体动力学算法

最原始的气体动力学宇宙数值模拟只能做一维模拟^[52, 53, 121],其非线性演化为 Zel'dovich 薄饼近似描述或薄片状 (sheet-like) 描述,并且只包括小部分与星系形成相关的物理过程, 如电离化 (ionization)、复合 (recombination)、辐射和康普顿冷却 (radiative and Compton cooling) 和热导 (thermal conductivity) 等^[54]。发展至今,流体动力学宇宙数值模拟的空间尺 度可以达到 500 Mpc,其粒子质量分辨率可达到 $10^6 M_{\odot}$,空间分辨率可达到约 700 h^{-1} pc, 包含的粒子数目可到达 10^9 量级,包括的物理过程也更加的完善^[122-124]。这主要归功于算法 和计算机技术的发展。同时,随着天文观测的发展,人们对星系形成所依赖的天体物理过程 的理解也越来越深入。在膨胀的宇宙中,描述共动坐标下的理想流体的方程组为:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{a}(v \cdot \nabla)v + \frac{\dot{a}}{a}v = -\frac{1}{a\rho}\nabla P - \frac{1}{a}\nabla\Phi \quad , \tag{17}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\dot{a}}{a}\rho + \frac{1}{a}\nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad , \tag{18}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{1}{a}v \cdot \nabla(\rho u) = -(\rho u + P)\left(\frac{1}{a}\nabla \cdot v + 3\frac{\dot{a}}{a}\right) \quad , \tag{19}$$

其中, *u* 为单位质量的内能, *P* 为单位质量内能对应的压强。以上方程分别为欧拉方程、连续性方程和热力学第一定律,包含了气体粒子为理想态和单原子的假定。在此情况下,气体的物态方程为:

$$P = (\gamma - 1)\rho u \quad , \tag{20}$$

其中, γ 是一个与时间无关, 但与气体粒子状态相关的常数。对于我们假设的理想态和单原 子气体, 一般取 $\gamma = 5/3$ 。 $\nabla \Phi$ 可以通过之前的多体问题求解。Peebles^[32] 详细地给出了从标 准流体力学方程组推导到以上形式的过程。Dodelson^[81]给出了在广义相对论基础下, 流体的 玻尔兹曼方程。

由于高密度区域存在强引力,这些区域的结构形成和演化表现为非线性。在这些区域会 出现两个很明显的特征: (1)引力不稳定会造成物质密度出现峰值 (density peak),并且粒子 在这些峰值附近会发生极端超声波运动 (supersonic motion),从而造成流体结构的物理量产 生间断,即黎曼间断; (2)与气体相关的动力学区域非常大,例如从几千秒差距的星系到兆 秒差距范围的宇宙结构网状分布。在过去的几十年里,人们发展了很多数值方法来求解以上 方程组^[55,115,117,125,126],以解决上述两个问题。这些数值方法关注不同的方程、假定或限定, 从而选择不同的参量进行数值化处理。大量的研究结果表明^[127,128],不同的参量选择对气体 和卫星星系的吸积有很大的影响。总的来说,这些数值方法可以分成两类: 一类是以粒子为 对象,即对粒子的质量进行离散化处理; 另一类是以空间为对象,即对空间进行离散化或网 格化处理。这两类方法分别反映了流体力学中的拉格朗日描述和欧拉描述。

3.2.1 拉格朗日算法

流体动力学的拉格朗日算法一般称为 SPH 算法^[55, 56]。SPH 算法是多体算法的一种延展,可以很好地嵌入到不同种类的多体宇宙学数值模拟程序中。另外, SPH 算法可以很方便地加

入不同参数来描述与星系和恒星相关的物理机制,因此在研究星系的形成和演化中有很广泛的应用。Monaghan^[129]对早期的 SPH 算法进行了总结,并给出了一套经典的平滑粒子离散化过程。Price^[130]通过一种能够明显体现流体力学拉格朗日性质的描述推导了离散过程,并详细讨论了不同的核函数 (kernel function) 对算法精度的影响。

SPH 算法主要包括两个部分: (1) 密度场的估计; (2) 动力学方程组的离散化处理。SPH 算法通常采用一个球形来进行区域划分。球体内部的粒子对密度的贡献由其距离中心点的距 离来决定,由此在球体内部形成了一个平滑的物质密度分布。这种分布形式不但可以用于描 述密度场,也可以用于描述其他连续物理量,如压强、速度、动量、能量、熵、角动量等。 利用粒子运动的拉格朗日性质对动力学方程进行离散化处理,连续场量 *A*(*x*) 可以由以下积 分差值表达式来描述:

$$A(\boldsymbol{x}) = \int A(\boldsymbol{x}')W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}', L)d\boldsymbol{x}' \quad , \qquad (21)$$

其中, *L* 为网格的大小 (即球体的半径), *W*(*x*, *L*) 是平滑内核函数 (即权重函数)。对于 *W* 有 两个基本的要求:

$$\int W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}', L) \mathrm{d}\boldsymbol{x}' = 1, \qquad (22)$$

和

$$\lim_{L \to 0} W(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}', L) = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \quad .$$
(23)

Price^[130]给出了平滑内核函数的进一步要求,并分析了在不同的W下,粒子连续量的精度。 对于数值计算,以上的积分形式可以表示为:

$$A_a = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} W(\boldsymbol{x}_a - \boldsymbol{x}_b, L) \quad , \tag{24}$$

其梯度形式为:

$$\nabla A_a = \sum_b m_b \frac{A_b}{\rho_b} \nabla W(\boldsymbol{x}_a - \boldsymbol{x}_b, L) \quad .$$
⁽²⁵⁾

其中下标 *a*,*b* 分别代表两个不同的粒子。于是通过以上的转换,再加上一定的恒等式转换, 流体动力学方程组可以离散化为:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_a}{\mathrm{d}t} = -\sum_b m_b \left(\frac{P_b}{\rho_b^2} + \frac{P_a}{\rho_a^2} + \prod_{ab}\right) \nabla \tilde{W}_{ab} \quad , \tag{26}$$

$$\frac{\mathrm{d}u_a}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{2} \sum_b m_b \left(\frac{P_b}{\rho_b^2} + \frac{P_a}{\rho_a^2} + \prod_{ab}\right) \boldsymbol{v}_{ab} \cdot \nabla_a \tilde{W}_{ab} \quad , \tag{27}$$

$$\frac{\mathrm{d}\rho_a}{\mathrm{d}t} = \sum_b m_b \boldsymbol{v}_{ab} \cdot \nabla_a \tilde{W}_{ab} \quad , \tag{28}$$

$$\frac{\mathrm{d}L_a}{\mathrm{d}t} = -\left(\frac{L_a}{\nu\rho_a}\right) \sum_b m_b \boldsymbol{v}_{ab} \cdot \nabla_a \tilde{W}_{ab} \quad , \tag{29}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_a}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v}_a \quad , \tag{30}$$

其中,

$$\tilde{W}_{ab} = \frac{1}{2} [W(\boldsymbol{r}_{ab}, L_a) + W(\boldsymbol{r}_{ab}, L_b)] \quad , \tag{31}$$

 L_{ab} 是 L_a 和 L_b 的平均值。以上方程中引入了可变的平滑长度 L(见式 (29)),并用一个人工 黏度 (\prod_{ab}) 来代表激波,从而将由激波造成的间断区域变成物理量连续的过渡区。SPH 算 法的优点是,它可以自动地适应更致密的区域,同时保持较高的分辨率。此外,与其他算法 相比,其几何性质更灵活,计算速度更快。但是,在低密度区域,SPH 的分辨率却很低,并 且热力学量严重地受核函数的形式所影响。另外,人工黏度的加入造成了不连续区域的精 确度严重下降。通过一系列的改进和完善^[131-133],SPH 算法在宇宙学数值模拟中得到广泛的 应用。

Evrard^[57]将 SPH 算法嵌入到 P³M 算法中,发展出了一个对流体动力学描述比较完整 的宇宙大尺度结构数值模拟。在同一时期,Hernquist 和 Katz^[58]将树算法与 SPH 算法相结 合,发展出了另一类数值模拟。随后,大量的研究者开发出了多种多样的 SPH 程序,包 括 HYDRA^[134], GRAPE-SPH^[135], ASPH^[136], GADGET^[63, 64], GASOLINE^[98], GIZMO^[137]和 AREPO^[126]等,其中,GADGET 数值模拟程序是现代宇宙学数值模拟中应用最广的 SPH 程 序之一。在这个程序中,引力通过树算法 (一般用 GRAPE 来代替) 计算,非碰撞的气体演化 通过 SPH 算法模拟。Springel^[64]在此基础上发展了 GADGET-2 和 GADGET-3 程序。 3.2.2 欧拉算法

欧拉算法的核心是通过有限差分方法 (finite-difference method) 来得到欧拉方程的数值 近似结果^[59]。在宇宙学中,流体具有很特殊的性质,即气体在进入星系或星云的过程中,其 温度会通过激波加热的方式快速地由 10⁴ K 上升到 10⁸ K。流体的物理量在这个过程中会产 生多种不连续的情况,因此,宇宙学的流体动力学欧拉算法大致包括两个部分:基于有限差 分方法的网格划分和如何解决激波及物理量的不连续性。Sod^[138]和 Leveque^[139]分别对早期的 欧拉算法进行了总结。

早期的宇宙学欧拉算法,如 Ryu 等人^[60]、Cen 等人^[61]和 Yuan 等人^[62]的文献中的算法, 都是通过一个结构化或非结构化的网格来代表流体,从而定义热学量或守恒量。运用中心 差分方法,每个网格内物理量的大小可用网格内对应物理量的中值来表示,激波由 SPH 算法中的人工黏度来表示。但以上处理并不能精确地解决边界截断问题,例如黎曼问题 (Riemann problem)^[140],这主要是由于中心差分方法的应用会破坏边界的连续性,而且人工 黏度并不能准确地表示激波。于是,人们发展出一系列的激波捕获方法 (capture shock)来 精确描述激波,并修改其差分方式,以解决边界问题。比较著名并且应用较广泛的差分方 式有全变差递减法 (total variation diminishing scheme, TVD)^[141]、分段抛物线法 (piece-wise parabolic method, PPM)、分段常数法 (piece-wise constant method, PCM) 和分段线性方法 (piece-wise linear method, PLM)^[142, 143]等。这些差分方法通过不同的方式来处理黎曼边界 问题。TVD 方法假定在边界上的流量不随时间变化,PPM/PLM 的边界结果则由戈杜诺夫 方法 (Godunov method)^[144]在边界的四阶组合求解。虽然两者都不能完全消除激波震荡问 题,但由于高阶戈杜诺夫方法的应用,算法的数值精度得到了较大的提高。在此基础上,大量各种形式的差分方法被发展出来,其中应用比较广泛的有在 PPM 基础上发展而来的本征 非震荡方法 (essentially non-oscillatory method, ENO)^[145]和权重本征非震荡方法 (weighted essentially non-oscillatory method, WENO)^[146, 147]等。Shu^[148]对 TVD 和 PPM 方法做了较完整的总结。另外,Trac 和 Pen^[149]对宇宙学的欧拉算法做了引导性的总结,并给出了 TVD 程序的核心内容。

除了更精确地描述激波和修改差分方式,对欧拉算法的改进还包括对网格进行更适合流体的划分。例如,应用第 3.1.3 节中提到的自适应精细化网格和移动网格划分,用欧拉算法可以得到更适应流体的网格,并且获得更高的网格分辨率。Anninos 和 Norman^[150]将自适应精细化网格应用在宇宙学气体动力学中,发展出了 ZEUS 数值模拟程序,从而为全空间的网格细分^[151]提供了基础。

3.2.3 拉格朗日和欧拉算法的综合应用

如第 3.2.2 节所述, 欧拉算法可以很好地解决激波和边界问题。而拉格朗日算法的运行 速度比较快, 且分辨率较高。为了综合这两种方法的优势, 可以将这两种方法进行组合, 从 而优化数值模拟程序。下面将介绍两种应用比较广泛的组合算法。

Gnedin^[117]和 Pen^[118]分别发展出了网格可随流体变化的移动网格方法,并应用在宇宙学 流体数值模拟中。这种方法具有 SPH 和欧拉方法的优点,即高分辨率和完备的激波描述,因 此得到较广泛的应用。另外,Xu^[119]发展了非结构网格方法,并把它应用在欧拉方法中。在 以上两种方法的基础上,Springel^[126]发展出了一种新的宇宙学数值模拟程序——AREPO。这 种数值算法通过泰森多边形曲面细分方法来得到可移动的非结构网格 (moving unstructured mesh),从而解决了移动网格方法中存在的不能处理高聚集区域网格严重变形的问题,同时 也解决了非结构网格方法中存在的不能保持守恒定律的问题。Vogelsberger 等人^[152]通过比较 用 AREPO 和 GADGET 程序模拟得到的单个星系,发现在流体动力学上的不同处理使得用 AREPO 模拟的盘星系更具有盘结构,说明 ARPEPO 相对于 GADGET 拥有更精确的流体 动力学描述。

Hopkins^[137]在 GADGET 和 AREPO 的基础上提出了 GIZMO 数值模拟程序。这个程序 所依赖的基础是一个粒子运动方程,可以通过下述方法得到。通过连续分配每个粒子点周围 的空间,得到一个离散化的流体动力学欧拉方程,并由此进一步得到非网格化的粒子运动方 程。以上离散化过程一般被称为无网格 (mesh-free) 技术,所用的数值方法最初由 Lanson 和 Vila^[153]提出,并由 Gaburov 和 Nitadori^[154]给出了其在天体物理中的实际应用。在 AREPO 程序中,通过泰森多边形曲面细分分割得到立方网格;而在 GIZMO 中,空间的分配是由一 个连续的内核函数得到的。GIZMO 程序的引力计算方法来自于 GADGET,但是有了很大的 改进,其引力软化长度可以固定,也可以随不同的区域发生变化。GIZMO 中的激波通过激 波捕获方法得到,因此可以避免传统 SPH 算法中存在的高精度区域流体不稳定性问题。另 外,这个算法提高了角动量的守恒要求,而且可以演化出完整稳定的气体盘结构。

4 模拟程序的比较研究

根据以上提及的纯引力和流体动力学算法,人们发展了各种数值模拟程序。以这些程序 为核心的多个宇宙学数值模拟对宇宙学观测和理论的验证起到了巨大的作用。宇宙学数值模 拟在统计分析中具有较好的完备性,而且通过其与观测结果对比,如星系的两点相关性^[155]、 质量和光度函数^[156]、星系的空间分布^[157]等,可以修正理论基础和观测手段。另外,在宇宙 学数值模拟中加入不同的星系模型,可以区分不同的物理过程对星系形成和演化的影响,以 及确定星系的真实物理模型。

4.1 Frenk 与 Heitmann 的模拟程序的比较

由于不同的数值模拟采用的方法不同,其模拟的空间分辨率、质量分辨率和结果的精度 都有很大的差异。为了区别不同数值模拟的差异,人们对不同的模拟程序下产生的结果进行 了比较,其中比较著名的有 Heitmann 等人^[158]和 Frenk 等人^[127]所做的比较研究。他们在只 考虑不同的数值方法所造成的引力差异情况下,分别对多个纯引力和流体动力学宇宙学数值 模拟的结果进行了比较。

Frenk 等人^[127] 发展出了一系列名为圣巴巴拉星系团比较项目 (The Santa BarBara Cluster Comparison Project) 的数值模拟,其中包括 12 个不同的宇宙学数值模拟 (11 个流体动力学数值模拟和 1 个纯引力数值模拟),并对由模拟得到的一个 X 射线星系团 (X-ray cluster) 的各种性质进行比较。这些模拟的中心区域分辨率为 5 ~ 400 kpc。他们在不同的红移下对这些模拟进行比较,并得到以下结论:在暗物质性质方面,不同的模拟程序得到的结果很相似;在气体性质方面,不同的数值模拟结果显示,星系团中心区域的气体轮廓和 X 射线光度有很大的差异,这个差异最大可以达到 2 倍,这说明对激波和其他流体力学过程的不同处理会严重影响星系团的形成,特别是中心区域的形成。他们在比较中心区域的气体熵轮廓时,发现了基于 SPH 算法与基于网格算法的数值模拟程序之间的系统偏差。图 4 简单地给出了暗物质的速度离散 $\sigma_{\rm DM}$ 分布和与熵成正比关系的气体温度 $T_{\rm gas}$ 的轮廓。Frenk 等人认为,造成以上不同的主要原因包括两个方面: (1) 对激波和其他流体动力学过程的不同描述,即不同的非连续性和边界问题解决方案 (同时这也造成了不同的模拟空间分辨率); (2) 不同的模拟时间步长。

正如 Heitmann 等人^[158]所言,现代观测宇宙学需要很高的精度,因此,数值模拟需要在 现今重点关注的非线性物理演化区域达到不大于 1% 的精度要求。Heitmann 等人在相同的宇 宙学参数、初始条件和粒子数目等条件下,选取了 10 个当时比较先进的流体动力学数值模拟 的纯引力部分,在统计上应用相同的分析方法,以验证当代宇宙学数值模拟程序是否能够达 到以上要求。他们的分析结果如下。

在大尺度上,不同的数值模拟给出相似的统计结果,例如暗晕的质量函数、功率谱等。 束缚态下相近质量的暗晕在形态上也是相似的,差异可以控制在 5% 以内,这与 Frenk 等人 的结果是一致的。图 5 给出了不同质量的暗晕在不同空间的数密度。可以看出,对 ENZO (红色星形连线)和 FLASH (黄色空心正方形连线)模拟程序而言,两者都表现出在疏松区域



注: a) 星系团的暗物质速度离散分布; b) 星系团的气体温度轮廓。图中的实线代表所有程序模拟的平均值,不同的符号代表不同开发者的模拟程序。每幅图的上方给出了不同的模拟程序结果与平均值的残差。



图 4 在圣巴巴拉星系团比较项目中红移为零时星系团的暗物质速度离散分布和气体温度轮廓^[127]

注:每个分图中的下半部分代表其与 GADGET-2 结果之间的比例。

图 5 a) 粒子数目在 $10{\sim}40$ 的暗晕数密度分布;b) 粒子数目在 $4{\sim}2~500$ 的暗晕数密度分布 $^{[158]}$

小质量暗晕的缺乏,只有在致密区域才与 GADGET 和其他的数值模拟结果符合得较好。而 对于 TPM (紫色三角形连线)模拟程序,其小质量的暗晕在疏松和中等密度区域都表现出 很大的差异,完全低于 AMR 模拟程序的结果 (即图中 ENZO 和 FLASH 模型程序的结果)。 treePM 程序对小质量暗晕表现出大约 20% 的偏高,但是当暗晕粒子数目限定在 20~40 范围 时,这个偏高可以去除。由于不同的模拟程序对小区域的分辨率有差异,因此,模拟结果中 小质量的暗晕数目、质量函数、功率谱等也会有较大的差异。对于小质量的暗晕数目,比较 明显的问题出现在 TPM 和 AMR 程序的结果之中,前者在中等密度区域会出现很大的不足; 而后者由于其分辨率较低,全空间出现的小质量暗晕非常少。而更深入的分析可以发现,在 AMR 程序中,由于精细化的网格边界是不连续的,因此引力的精度很低,以致在计算过程 会出现很大的不稳定性。这是大多数 AMR 算法都会出现的问题。以上分析充分说明,纯引 力的宇宙学数值模拟在质量分辨率、空间分辨率和模拟时间步长上都需要提高。同时也可以 发现,收敛性检测对于同一个模拟程序的实验可重复性以及可靠性有着重要的影响。

4.2 天鹰座比较项目和 nIFTy 的模拟程序比较

通过以上模拟程序的比较和其他大量的研究可知^[126, 152, 159-161],在大尺度结构上,不同的 数值算法对宇宙结构的形成已经达到了较好的一致性,但是对于小尺度的结构,特别是在星 系尺度上,以上研究并没有给出很好的结果。因此,研究与星系相关的网格内物理过程对数 值模拟结果的影响非常重要。接下来的模拟程序比较研究相对于 Frenk 等人^[127]和 Heitmann 等人^[158]的工作,应用了更完善的数值算法、网格内物理过程描述和分析方法。

Scannapieco 等人^[162]提出了天鹰座比较项目 (Aquila Comparison Project)。他们对 4 类, 共 13 个模拟程序进行了比较。他们在同一个模拟程序中加入了不同的冷却效应和反馈作用, 以此来研究影响星系形成的各种物理过程。他们模拟了一个银河系大小的星系,比较其形态、 物理尺寸、恒星质量和形成历史,并作了数值收敛性分析。图 6 给出了不同模拟程序得到的 星系的投影图。图中,G3,G3-BH,G3-CR 和 G3-CS 分别代表标准 GADGET 模拟程序、标 准 GADGET 下加入与超大质量黑洞相关的能量反馈作用的模拟程序、标准 GADGET 下加 入与超大质量黑洞相关的能量反馈作用和与宇宙射线的能量沉积相关的反馈作用的模拟程序, 以及仅将标准 GADGET 中的原始冷却反应替换为与金属丰度相关的模拟程序。可以看出, 不同模拟程序的结果差异很明显,其中反馈作用的加入可以得到更接近观测的结果,但是仍 有较大的差距。与之前的结果相比,Scannapieco 等人应用了更优化的模拟程序,在分辨率 上有了很大的提高,对小尺度的描述,特别是对亚网格物理过程的描述更完整,但是仍然不 能得到与观测相符的结果。于是,他们提出,要得到更真实可靠的模拟星系,得到形成完整 盘结构的角动量,可能需要作如下改进:(1)有效地控制重子物质的过冷却效应;(2)缩短在 恒星形成过程中的早期星暴;(3)提高形成过程中的吸积率,并保留晚期的吸积过程。

另外,Sembolini等人^[163]提出了一系列 nIFTy 星系团数值模拟 (nIFTy galaxy cluster simulation),并比较了无辐射^[163]和有辐射^[164]条件下单个模拟星系团的图像、统计性质、星系和卫星暗晕的相似性与多样性^[165]、重子物质对暗晕性质的影响^[166]以及星系团的外区域特点^[167]等。这个研究的目的是确定数值模拟能否在简单的天体物理条件下得到可信的模拟星系,其方法是选取全空间的特定区域,对其进行再模拟,从而提高分辨率和精度。图7给出



注: a) 星系的恒星总质量 $M_{\text{stellar}} = 1.25 \times 10^{11} M_{\odot}$; b) $M_{\text{stellar}} = 6.89 \times 10^{11} M_{\odot}$; c) $M_{\text{stellar}} = 9.38 \times 10^{11} M_{\odot}$; d) $M_{\text{stellar}} = 9.24 \times 10^{11} M_{\odot}$ 。每个分图的上图为正向投影,下图为侧向投影,尺度大小分别为 30 × 30 kpc² 和 30 × 20 kpc²。每个像素的大小为 58.6 pc。下图中的 M_{stellar} 表示星系的恒星总质量。



图 6 由不同模拟程序得到的星系恒星质量密度投影分布图^[162]

注:每个分图的上图代表每个模拟程序与G3-MUSIC的残差。虚线和点线分别代表 2 500 倍宇宙平均密度的半径处 (R_{2 500})和 500 倍宇宙平均密度的半径处 (R₅₀₀)的结果。

图 7 a) 在无辐射机制的数值模拟中得到的暗晕径向熵轮廓; b) 在有辐射机制的数值模拟中得到的暗晕径 向熵轮廓^[163, 164]

了数值模拟在不同的物理条件下得到的熵 S 的分布。

与 Frenk 等人的结果相比,Sembolini 等人的研究偏差较小。在无辐射条件下,不同模拟 程序,特别是网格算法和经典 SPH 算法之间得到的熵内核有很大的差异。而应用现代 SPH 算法,则不同数值模拟结果之间的差异变得较小,同时也比较接近理论预言和观测结果。但 是在考虑冷却、恒星形成、活动星系核 (active galactic nuclei, AGN)反馈等辐射机制情况下, 不同模拟程序之间产生的熵内核不再出现大的差异。同时,为了确定重子物质的影响,Cui 等人^[166]通过比较纯暗物质、无辐射和有辐射的数值模拟结果发现,辐射机制和重子物质对星 系团的中心区域有很大的影响。另外,为了确定不同的模拟程序是否能够产生相似的卫星暗 晕和星系群,Elahi等人^[165]比较了在中心区域和外围区域的暗晕和星系的相似性和多样性, 发现对同一个星系团,通过不同的模拟程序得到的星系群数目、质量和速度离散都有一定的 差异,并且反馈物理过程的加入会加大结果之间的差异。

从以上的模拟程序比较中可以发现,对宇宙粒子,特别是与重子物质有关的物理过程的 研究在不断地发展和深入,研究的宇宙学尺度已从线性区域扩展到小尺度的非线性区域,得 到的结果与观测结果也越来越接近。同时,以上模拟程序的比较研究也为人们在不同时期发 展相对完善的宇宙学大尺度数值模拟提供了理论支撑。因此,接下来我们将按照时间顺序, 介绍最近十几年由于计算机技术的巨大进步而发展的分辨率高、粒子数目巨大的宇宙学大尺 度结构数值模拟,并简单地总结其成果。

5 流行的宇宙学大尺度数值模拟

从 20 世纪 90 年代开始, 宇宙学数值模拟进入大规模时代。这一时期, 宇宙学数值 模拟程序应用了大量高效的数值模拟算法 (如 Gelb 和 Bertschinger^[168, 169], Klypin 等人^[38]、 Jenkins 等人^[170]、Cen 和 Ostriker^[171], Katz 等人^[172]、Evrard 等人^[173] 以及 Jenkins 等人^[174]提 出的模拟程序),并对不同的宇宙学对象进行了研究。但是,由于对宇宙学模型和与星系形成 相关的物理机制的理解还不够深入,这些模拟得到的结果与观测相比差异较大。进入 21 世 纪,通过大量的观测以及与数值模拟的对比分析, ΛCDM 宇宙学模型得到了证实。于是,现 代宇宙学大尺度数值模拟开始快速发展。

5.1 纯引力宇宙大尺度数值模拟

随着引力数值计算方法的不断发展,当代纯引力的宇宙学数值模拟达到了很高的精度。 大量的模拟结果分析使得人们对宇宙非线性演化区域的结构形成有了很深刻的理解,因此, 纯引力的宇宙学数值模拟已经是一个比较成熟的研究课题。

5.1.1 哈勃空间数值模拟

2002 年 Evrard 等人^[175]发展的哈勃空间数值模拟 (Hubble volume simulation) 可以看作 现代大规模宇宙学数值模拟的开端之一,虽然其模拟中仍然包括了一个τ冷暗物质 (τ cold dark matter, τCDM) 模型。这个数值模拟的主要目的是通过模拟星系团在红移空间和实空间 的分布来研究星系团的统计性质,其所应用的数值模拟程序为并行化的 HYDRA 多体模拟程 序^[176]。HYDRA 程序是由标准的多体算法和流体力学算法相组合而成的,其多体算法部分由 P³M 程序组成,流体部分由 SPH 程序组成。在高密度区域,网格划分采用分层的精细化划 分方法,从而避免了由于直接求和而造成的精度严重退化问题。这是对标准 P³M 程序的一 种优化。该模拟空间的边长为 $3h^{-1}$ Gpc,暗物质粒子数目为 10^9 ,每个暗物质粒子的质量为 $m_{\rm DM} = 2.25 \times 10^{12} h^{-1} M_{\odot}$,平滑长度 (空间分辨率)为 $\epsilon = 0.1 h^{-1}$ Mpc,采用的宇宙学参数 为 $\Omega_m = 0.3$, $\Omega_A = 0.7$, $\sigma_8 = 0.9$ 。 σ_8 的值由 CMB 中温度各向异性的振幅所确定。通过对模 拟的星系团做针对 2° 视场红移巡天 (Two-Degree-Field Redshift Survey, 2dF)和斯隆数字化 巡天 (Sloan Digital Sky Survey, SDSS)的限定选择,Evrard 等人得到了在统计上与之相近的 结果,但偏差较大。同时他们发现,星系团的数目和密度轮廓受物质参数的影响较大^[177]。 5.1.2 千禧模拟系列

为了更深入地理解星系的形成和演化,人们需要在很大的物理尺度下研究暗物质晕的统计性质和演化历史。但是,早期的数值模拟在小尺度区域的结果并没有达到很高的统一性, 而且与观测相比有很大的差异。这主要是由于以下两个原因引起的:(1)早期的观测对于星 系和恒星的形成机制以及两者之间相互影响的理解还不太明确,造成人们在数值算法中不能 完善地描述亚网格的物理过程;(2)亚网格物理过程算法的复杂性使得早期数值模拟的精确 描述区域只能定格在暗物质晕阶段。以上两点在之前的数值模拟程序对比研究中有较明显的 体现。为了解决以上问题,2005年 Springel等人^[39]发展了第一代千禧数值模拟 (millenium simulation, MS)及其一系列的延展模拟,包括宝瓶座项目 (Aquarius Project)^[178]、第二代 千禧数值模拟 (millennium-II simulation, MS-II)^[40]和第三代千禧数值模拟 (millenium-XXL simulation, MXXL)^[179]。

MS 大概是应用最广泛的宇宙学多体数值模拟之一。它所应用的模拟程序为 GADGET- $2^{[64]}$,采用的是 treePM 与 SPH 的组合算法。在自由消散的区域,SPH 算法遵从能量和熵守恒,这提高了平滑长度的适用性。粒子引力通过 treePM 算法中的分层多级展开方法计算,其短程力通过树算法计算,长程力通过傅里叶变换计算。treePM 应用在全空间时,可以为MS 模拟提供很高效的运算,从而得到很高的分辨率。GADGET-2 中应用的粒子-网格算法的核心是通过网格化的标准快速傅里叶变换来求解泊松方程,其质量分配为 CIC 方式,网格划分用四点有限差分方式。同时,该算法利用交互跃进式积分 (leapfrog integrator)方式进行时间积分,而且其多体算法部分与 SPH 算法部分的时间步长是不一样的。MS 所采用的宇宙学参数为第一年 WMAP 的结果,即 WMAP-1 的结果,模拟空间的边长为 500 h^{-1} Mpc,粒子数目为 10¹⁰,空间和质量分辨率分别为 5.0 h^{-1} kpc 和 0.86 × 10⁹ $h^{-1}M_{\odot}$ 。另外,暗物质晕及其子结构的并合历史由 FoF (friend-of-friend)和 SUBFIND 算法得到,与星系和恒星相关的物理过程由半解析模型描述。

与哈勃空间数值模拟类似,Springel 等人对不同宇宙时期的数密度函数、星系的两点相 关性和星系的谱函数等星系团的大尺度结构统计性质,以及第一代超新星暗晕进行了研究, 发现在线性区域,可以得到与 2dF 星系红移巡天 (2dF Galaxy Redshift Survey, 2dFGRS) 和 SDSS 相近的结果,而在小区域,特别是在星系尺度的区域,则差异较大,这说明其半解析 模型还不够完善。 为了在高质量和高空间分辨率下研究星系尺度大小的暗物质晕结构,以及使数值 模拟在足够大的空间范围内包含的粒子数目足够多,以便模拟出有代表性的研究样本, Boylan-Kolchin 等人^[40]在 MS 的基础上,提出了拥有更高质量和空间分辨率的 MS-II 数值 模拟。MS-II 所用模拟程序是 GADGET-2^[64]的进阶版本 GADGET-3。相比于 GADGET-2, GADGET-3 对高聚集区域进行了更优化的处理,提高了模拟程序的可容性和内存的利用 效率,因此,对于大数据的处理变得更加高效。另外,在给定的精度下,通过寻求引力和 时间积分之间的组合,改善了程序的运行效率。MS-II 数值模拟应用的宇宙学参数和包含 的粒子数目与 MS 都一样,其模拟空间的边长为 $L_{\rm box} = 100 h^{-1}$ Mpc,粒子质量分辨率为 $6.89 \times 10^6 h^{-1} M_{\odot}$,空间分辨率为 $5.0 h^{-1}$ kpc,初始红移为 z = 127。通过与 MS 的结果进行 对比,Boylan-Kolchin 等人发现,不管是暗晕的质量函数、卫星暗晕的丰度分布、暗晕形成 时间及其与质量的依赖关系,还是线性或非线性相关性、功率谱和暗晕的并合偏差,都表现 出很好的一致性。因此,综合考虑,这两个模拟可以在很宽的空间尺度范围内得出很精确的 统计分析结果。

到 2012 年,大量的星系巡天已经完成或正在进行,得到的观测数据可提高人们对星系形成和演化过程的理解。同时,通过与数值模拟比较,巡天观测的精度也可以得到进一步限定。这对数值模拟提出了很高的要求,即数值模拟的空间边长需要达到 3 Gpc 或更大,包含的粒子数目要达到 10¹¹ 或更多。于是,Angulo 等人^[179]在 MS 和 MS-II 的基础上提出了一个大体积、高分辨率的宇宙学多体数值模拟——MXXL。

该模拟采用的模拟程序为 GADGET-3,所用的宇宙学参数与前两个数值模拟一致。不同的是,其模拟空间的边长为 3 h⁻¹Gpc,远远大于前两者;粒子个数为 6 720³,远远超出了当时的数值模拟 (除了 Kim 等人的第三代视界数值模拟 (Horizon Run 3)。与 MXXL 相比,

第三代视界数值模拟的粒子数目多 20%, 但是质量 分辨率只有其 1/200)。MXXL 的体积大概比重子振 荡光谱巡天 (Baryon Oscillation Spectroscopic Survey, BOSS) 所要求的体积大7倍。MXXL 的粒子质量为 $m_{\rm DM} = 6.174 \times 10^9 h^{-1} M_{\odot}$, 是 MS 的 7 倍左右, 但仅 为哈勃空间数值模拟的1/300。MXXL的空间分辨率为 10 h⁻¹kpc。MXXL 的体积太大,很难直接进行流体动 力学运算,但可以通过星系的半解析模型与并合历史来 研究星系的形成和演化。通过与 MS 和 MS-II 的结果进 行比较, Angulo 等人发现, 只有 MXXL 的模拟空间能 够达到并超过功率谱发生翻转时的尺度大小,说明在这 三个模拟中,只有 MXXL 可以对重子声波特性观测提 供很好的样本。在整个非线性区域,三个模拟能够得到 一致的结果。另外,从图 8 中可以直观地看出,在不同 的观测方式下得到的最大星系团是不一样的,说明当应 用特定巡天结果中的最大星系团进行宇宙学结论推导时



注:背景为厚 27 Mpc,宽 2 050 Mpc 的暗物质密度投影。每个圆 形区域为半径 5.5 Mpc,在不同 观测量下得到的最大星系团为中 心的投影。

图 8 MXXL 在红移 z = 0.25 时的暗物 质投影密度分布^[179] 需要很谨慎。

5.1.3 视界数值模拟

视界数值模拟 (Horizon Run, HR) 是韩国高等科学院 (Korea Institute of Advanced Study, KIAS) 为了研究宇宙和星系的形成与演化而发展的一系列多体数值模拟。从 2009 年到 2015 年,他们共发展了 4 个数值模拟,即 HR1^[180], HR2, HR3^[181]和 HR4^[182],其所用的宇宙学参数都为 WMAP-5 的结果,且都是应用 GOTPM (grid-of-oct-trees-particle-mesh)数值模拟程序^[111]。GOTPM 是一个建立在 PM 和八叉树算法基础上的组合算法 (即改进的 treePM 程序),由消息传递接口 (message passing interface, MPI) 进行并行化。引力势由标准 PM 算法中的单个网格决定,并由八叉树网络修正。

HR1, HR2 和 HR3 的模拟空间边长从 6.592 h⁻¹Gpc 不断增加到 10 h⁻¹Gpc,以此来研 究全天的重子声波振荡 (baryon acoustic oscillations, BAO)。与线性扰动理论相比,用 HR2 和 HR3 都能得到与观测相符合的功率谱、相关函数、质量函数和基本的暗物质晕统计性质。 通过提高模拟的分辨率,并将模拟空间边长降低到约 3 h⁻¹Gpc, Kim 等人利用 HR4 的结果 研究星系的形成,以及星系与大尺度结构之间的相互作用,发现近邻宇宙中 FoF 暗物质晕的 质量函数与观测结果相比有严重的偏差。与线性理论相比,重子声波震荡变得更加明显,且 出现在更小的物理尺度上。通过研究暗物质晕的并合历史,Kim 等人发现,在高红移时,只 有少数大质量暗物质晕能够达到它们在红移为零时的质量的一半。

5.1.4 CosmoSim 系列数值模拟

为了更精确地研究暗物质晕的性质,Klypin 等人^[41]发展了一个分辨率比 MS 高一个数量级的纯暗物质数值模拟——Bolshoi。不同于其他的数值模拟,Bolshoi 通过最大旋转速度来定义暗物质晕,并假定所有的暗物质晕都有着相似的内部质量分布。该质量分布可由Navarro-Frenk-White (NFW)分布^[183]来描述,并可以此来研究暗物质晕的基本统计性质,特别是暗晕的聚合特性。该模拟用一个基于自适应精细化树结构 (adaptive refinement tree, ART) 算法的类 AMR 数值模拟程序^[116]。这个模拟程序的网格密度分配通过 CIC 方式完成,同时,每个网格的泊松方程通过带有周期边界条件的快速傅里叶算法得到。算法中的精细化划分是指当网格内的质量密度超过一定值时,将网格再次划分为 2 × 2 × 2 的网格,从而提高空间分辨率。这个数值模拟的宇宙学参数为 WMAP-5 和 WMAP-7 的组合,模拟空间边长为 250 h^{-1} Mpc,粒子个数为 2048³,质量和空间分辨率分别为 $m_{\rm DM} = 1.35 \times 10^8 h^{-1} M_{\odot}$ 和 $\epsilon = 1.0 h^{-1}$ kpc,初始红移为 $z_{\rm init} = 80$ 。

Klypin 等人分析 Bolshoi 的结果后发现,通过最大旋转速度定义的暗晕在大部分统计性 质上都表现出简明的结果,例如,独立暗晕内的子晕数密度与其主晕的速度成单一的幂函数 关系,独立暗晕的数密度分布呈现出带有指数形式的截断的幂函数分布等。最重要的是,他 们得到了一个关于暗晕聚合性质的新的结论,即在高红移下,暗晕的聚合性下降到约 4.0 后 变得平滑,最后又随着暗晕质量的上升而上升。

Prada 等人^[42]在 Bolshoi 数值模拟的基础上发展了一个更大空间的数值模拟—— MultiDark/BigBolshoi。这个模拟与 MS, MS-II 和 Bolshoi 数值模拟相结合,可以对大尺度范围 内的暗晕统计性质进行解释,并证实不同模拟之间的一致性。MultiDark 应用的数值模拟程序、初始条件和对暗晕的定义都与 Bolshoi 一致。两者的不同是,在 MultiDark 模拟中模拟的空间边长提高为 $L_{\rm box} = 1\,000\,h^{-1}{
m Mpc}$,因此,其分辨率下降为 $m_{\rm DM} = 8.63 \times 10^9\,h^{-1}M_{\odot}$, $\epsilon = 7.0\,h^{-1}{
m kpc}$ 。通过与 Bolshoi, MS 和 MS-II 的结果进行比较,并用暗晕的最大旋转速度 来定义聚合度,Prada 等人证实了他们的模拟在高红移下,随着暗晕质量的上升,暗晕的 聚合性具有从平滑到上升的特性,并且与质量和红移成函数关系。从图 9 可以看出,在红 移为零时,MS 与 MS-II 的结果符合得很好;在高红移时,两者有明显的差异。而 Bolshoi 和 MultiDark 的结果在不同红移下都符合得很好。当与密度场的线性均方值 $\sigma(M,z)$ 相联系 时 (其中 M 为暗晕质量),暗晕的聚合性呈现出一个 U 型的形状,并且在 $\sigma \approx 0.7$ 时达到最 小值。



注: V_{max} 和 V₂₀₀ 分别表示暗晕最大旋转速度和 200 倍宇宙平均密度半径处的旋转速度; M₂₀₀ 为 200 倍宇宙平 均密度半径以内的暗晕总质量。

图 9 a) MS (实心圆) 和 MS-II (空心圆) 在不同红移下的速度比与暗晕位力质量的关系; b) Bolshoi (实心 圆) 与 MultiDark (空心圆) 在不同红移下的速度比与暗晕位力质量的关系; c) 不同红移下的速度比与密度场的线性均方值 σ 的关系^[42]

在以上两个数值模拟基础上,通过更新宇宙学参数,提高或降低模拟空间,Prada 等人^[184]和Rodríguez-Puebla 等人^[185]发展了Bolshoi-Planck, MultiDark-Planck, Small MultiDark-Planck 和 Big MultiDark-Planck 等一系列数值模拟。这些有着相同数据结构形式的数值模拟,被称为CosmoSim 数值模拟。

5.1.5 其他纯暗物质多体数值模拟

另外,为了研究宇宙的不同性质,人们还发展了大量如 Horizon-4Ⅱ 那样的宇宙学纯暗物 质多体数值模拟^[186]。Horizon-4Ⅱ 是 Wozniak 和 Horizon Consortium^[187]提出的 Horizon 项目 中的一个纯暗物质数值模拟,它所用的模拟程序为 RAMSES。用这个模拟可以计算全天空的 收敛性,而且在像素分辨率大约为 0.74 (′)² 时可以得到类似于 WMAP 的宇宙微波背景信号。 另外,Teyssier 等人^[186]发现,小波指数大约为 1 000 时线性与非线性演化发生了转变,并认 为只有在波指数小于 200 的情况下,才能得到可靠的模拟星系。 Alimi 等人^[188]和 Courtin 等人^[189]通过暗能量字宙学数值模拟系列 (dark energy universe simulation series, DEUSS) 研究了不同的暗能量模型对非线性区域的功率谱和暗物质晕质量 函数的影响。这一系列数值模拟所采用的程序为 RAMSES^[190]。Alim 等人^[191]还在此基础上 发展了全空间暗能量宇宙学数值模拟 (dark energy universe full universe run project, DEUSS FUR)。

Habib 等人^[192]和 Heitmann 等人^[193]应用 HACC (Hybrid/Hardware Accelerated Cosmology) 程序发展出了名为 Multi-petaflop Sky 和 Q Continuum 的宇宙学数值模拟,以研究暗能量、重子声波振荡、亮红星系 (luminous red galaxy, LRG) 等的性质。

Watson 等人^[194]发展了一个在当时规模最大的宇宙学数值模拟——Jurop 哈勃空间数 值模拟 (Juropa Hubble Volume Universe Simulation, Jubilee Simulation),并首次给出了数 据分析结果。该模拟所用数值模拟程序为 CUBEP³M^[195]。Watson 等人主要关注宇宙网络 (cosmic web)、宇宙结构的聚集性质 (clustering properties) 和暗晕统计 (halo statistics) 性质, 并且进一步提出了一个关于 ISW 效应 (integrated Sachs-Wolfe effect) 的项目^[196, 197]。

为了更完整地研究类似 BAO、宇宙空洞 (cosmic void) 结构、暗能量等在可见宇宙的统 计性质,并对观测提供理论支撑和对比数据,数值模拟需要更大的模拟空间和更高的分辨率。 为此,Skillman 等人^[198]提出了一系列夜空数值模拟 (the Dark Sky Simulation),其所用的数 值模拟程序为 2HOT^[199],这是在散列八叉树算法 (hashed oct-tree algorithm, HOT) 的基础 上发展出来的一个自适应树算法模拟程序。

5.2 流体动力学宇宙大尺度数值模拟

高分辨率的纯暗物质数值模拟在 ACDM 宇宙学模型中仍然存在大量的问题,如卫星星系缺失问题 (missing satellite problem)和小质量星系中心的暗物质密度分布问题,而且不能用数值模拟方法模拟出各种形态的星系。另外,早期的宇宙大尺度流体动力学数值模拟由于星系和恒星模型的不成熟,得到的结果与观测数据有很大的差异。大部分模拟得到的星系质量函数与观测结果相比有很大的偏差,模拟得到的星系质量都太大,而且太过致密,恒星形成得太早,不能连续地重现星系团中气体的热动力学性质^[162]等。以上原因及计算机技术限制了流体动力学模拟的广泛应用。利用半解析模型对单个或少量在纯引力数值模拟下得到的暗物质晕进行再模拟时,得到了很多有价值的结果^[200,201]。流体动力学模拟有着其他方法所不具备的优点:(1)不需要大量的简单假设,从而减小了得出过于武断的结论的风险;(2)因为流体动力学模拟可以自洽地演化暗物质和重子物质的运动历史,所以可自动地包括重子物质对无碰撞的物质的反作用。在过去的十几年中,流体动力学模拟与观测结果的一致性得到了很大的提高^[202-204]。随着计算机技术的发展,更重要的是,随着星系形成和演化模型的数值描述的极大进步^[205,206],流体动力学数值模拟开始得到了很广泛的应用。下面将介绍当代计算宇宙学中比较流行的流体力学数值模拟,并简要地总结通过这些模拟得到的结果。

5.2.1 Mare Nostrum 宇宙数值模拟

Gottlöber 等人^[207]于 2006 年完成的一系列 Mare Nostrum 宇宙 (Mare Nostrum Universe) 数值模拟是当时世界上最大的流体动力学数值模拟之一,其最初的目的是研究星系团中的暗

物质和气体的分布,其所采用的宇宙学参数为 WMAP-1 的结果,与哈勃空间数值模拟的参数一致。数值模拟的空间边长为 $500 h^{-1}$ Mpc,包括的暗物质和重子气体粒子个数都为 1024^3 ,质量分辨率分别为 $8.3 \times 10^9 h^{-1} M_{\odot}$ 和 $1.5 \times 10^9 h^{-1} M_{\odot}$,空间分辨率为 $15 h^{-1}$ kpc,所用数值模拟程序为当时应用最广泛的 GADGET-2^[64]。用这个数值模拟,他们得到了超过 2×10^6 个粒子数目大于 20 的暗晕,其中包括了 4 060 个质量大于 $10^{14} h^{-1} M_{\odot}$ 的星系团。利用三轴关系来比较不同质量的暗晕形状,Gottlöber 等人发现,质量越大的暗晕表现出更大的椭圆性,而且暗物质的分布比气体的分布有更大的椭圆性。之后的研究^[208] 证实了这一特性。另外,利用 Mare Nostrum 数值模拟的数据研究星系团的射电辐射和强引力透镜等也得到了一定的结果。由于这是一个不包括辐射和恒星形成的流体动力学数值模拟,由第 4 章中的流体力学比较可知,暗晕中心区域的结构与真实的最亮团星系 (brightness cluster galaxy, BCG) 有很大的区别,而且气体粒子的分布和比例也不一致。但是,在星系团的外部区域,不论是对粒子分布或是温度轮廓,不同数值模拟,或者同一类带有不同辐射描述的数值模拟都给出了相似的结果^[209]。因此,要精确地研究星系团的内部区域结构,要求加入更多的物理过程,例如 AGN 反馈等。图 10 给出了暗物质和气体粒子空间分布的主轴间比例,其中 a_1 , a_2 和 a_3 为暗晕的三轴椭球的三个主轴,且满足 $a_1 \ge a_2 \ge a_3$ 关系。



图 10 暗物质和气体粒子空间分布的主轴间比例^[207]

在 Mare Nostrum 流体动力学数值模拟的基础上,Yepes 等人^[210]提出了研究星系形成 的 Mare Nostrum 星系形成数值模拟项目 (The Mare Nostrum Galaxy Formation Simulation Project)。它与另一个模拟——Horizon-Mare Nostrum^[211]数值模拟在同样的宇宙学参数、初 始条件、模拟空间大小和粒子数目下,用同一个超级计算机完成了模拟计算,并进行了对比 研究。他们通过比较星系的演化验证了不同模拟程序得到的结果的精确度。

5.2.2 OWLS 数值模拟

Schave 等人^[212]为了研究星系模型对恒星形成历史和恒星形成率的影响,提出了超大 尺度数值模拟项目 (the Over Whelmingly Large Simulations Project, OWLS),其中包括了 一系列不同空间大小、分辨率和星系形成模型的数值模拟。不同于半解析和之前的流体动 力学模拟对星系模型的简化和经验性描述,OWLS 数值模拟发展出了一套包含较完整物 理过程的星系形成模型,并通过多次模拟研究在不同的物理条件下,恒星的形成与红移和 星系团质量的依赖关系。OWLS 数值模拟所采用的模拟程序为 GADGET-3, 宇宙学参数 为 WMAP-3 的结果。它包括 11 个不同空间大小和分辨率的数值模拟,以此来确定空间 大小和分辨率对模拟结果的影响。OWLS 模拟主要包括两类数值模拟,对应的模拟空间 边长分别为 $25 h^{-1}$ Mpc 和 $100 h^{-1}$ Mpc,包含的粒子数都为 2×512^{3} (其中暗物质和气体粒 子各占一半)。模拟空间较小的数值模拟具有较高的分辨率,其暗物质和气体粒子质量分 辦率分别为 $m_{\rm DM} = 6.34 \times 10^6 h^{-1} M_{\odot}, m_{\rm gas} = 1.35 \times 10^6 h^{-1} M_{\odot};$ 模拟空间较大的数值模 拟具有较低的分辨率,其暗物质和气体粒子质量分辨率分别为 $m_{\rm DM} = 4.06 \times 10^8 h^{-1} M_{\odot}$, $m_{\text{gas}} = 8.66 \times 10^7 h^{-1} M_{\odot}$ 。从这个数值模拟的结果可以发现,加入 AGN 反馈作用可以使得 数值模拟能够连续地模拟出近邻星系团中的星族和热等离子体的性质。此外,从该模拟还得 到了不同红移下恒星形成率的变化趋势,即在高红移处,恒星的形成由暗晕的形成所限定; 在中等红移处,恒星形成率达到最大;然后由于低密度气体中的低冷却率、气体的枯竭和来 自恒星与黑洞的自调节作用引起的停止效应,恒星形成率逐渐下降。另外,高红移时的恒星 形成率还受宇宙学参数和再电离的光子加热所影响。恒星形成率的极大值及其所处的红移和 在低红移段恒星形成率下降的陡度都依赖于恒星和黑洞的反馈作用。总的来说,星系中的恒 星形成是在两个机制的相互作用下进行的: (1) 恒星和黑洞的反馈作用, 其作用是抑制恒星 的形成; (2) 气体冷却和吸积, 其作用是促进恒星的形成。由于模拟的空间大小有限, OWLS 数值模拟并不能对大质量星系团进行有效的研究。图 11 给出了 OWLS 数值模拟中一个小质 量暗晕在模拟空间中的缩放图。

为了解决以上问题,并应用更精确的宇宙学参数,Le Brun 等人^[213]提出了 Cosmo-OWLS 流体动力学宇宙大尺度数值模拟,以促进对星系团天体物理过程和非线性结构形成的理解。这个数值模拟采用 WMAP-7 和普朗克卫星 (Planck Satellite) 的宇宙学参数,并在其中加入 了最重要的非引力物理过程,即超新星爆发和 AGN 反馈作用,以便在大尺度上得到合成的 模拟观测,同时采用观测中的分析技术,得到星系团的统计性质,并与真实观测结果比较。综合来说,Cosmo-OWLS 的分辨率只有 OWLS 的 1/8,但是通过一致性分析,可以发现两者的统计性质对质量大于 $10^{13} h^{-1} M_{\odot}$ 的暗晕都是相符合的。通过比较加入不同星系模型的 数值模拟结果,Le Brun 等人发现,AGN 反馈作用对于重建观测的热气体比例、暗晕质量的 强相关性和星系团的高质光比是必要的。在特定的 AGN 模型下,数值模拟可以重建质量范 围为 $10^{13} M_{\odot} < 10^{15} M_{\odot}$ 的暗晕中热气体的观测统计性质 (其中 M_{500} 为 500 倍宇宙 平均密度对应的暗晕半径内的暗晕总质量),而且也可以在 $0.05 < R/R_{500} < 1.5$ 的半径范围 内重建暗晕的密度和熵分布。于是,采用在观测基础上得到的物理模型,Cosmo-OWLS 数值 模拟可以得到与观测相对应的星团族群。由此得到的模拟巡天可以促进对真实天体物理和宇



注: a) 图像大小为 10 h^{-1} Mpc; b) 图像大小为 1 h^{-1} Mpc; c) 图像大小为 0.1 h^{-1} Mpc。对应的数值模拟空间边长为 25 h^{-1} Mpc, 暗晕粒子数为 512³, 暗晕所处红移为 2, 200 倍宇宙平均密度对应的暗晕半径内的暗晕总质量为 $M_{200} = 10^{12.2} M_{\odot}$ 。图中 lg ρ/ρ_b 对应于投影密度,其中 ρ_b 为对应红移下的宇宙平均重子物质密度。

图 11 在 OWLS 数值模拟中的一个暗晕的缩放图^[212]

宙学巡天的理解,同时量化选择效应。

5.2.3 Illustris 数值模拟

2014 年, Vogelsberger 等人^[66]提出了 Illustris 数值模拟,并对暗物质和可见物质的相 关演化进行了研究。这个模拟从宇宙大爆炸 (big bang) 之后的 1.2×10^7 a 开始,追踪了 超过 1.2×10^{10} 个可分辨的粒子,由此模拟出了大量可靠的椭圆和漩涡星系,重现了在大 尺度下星系团中星系的分布和重子物质的统计性质,以及在小尺度下与星系相关的重子 物质特性。Illustris 数值模拟中最高的分辨率 (Illustris-1) 可以达到 $m_{gas} = 1.26 \times 10^6 M_{\odot}$, $m_{DM} = 6.26 \times 10^6 M_{\odot}$, $\epsilon_{gas} = 710$ pc, $\epsilon_{DM} = 1.42$ kpc,其中包括 2×1820^3 个暗物质和流体 粒子,模拟空间边长为 106.5 Mpc。综合大量的流体动力学数值模拟,Vogelsberger 等人发 展出了比较完善的星系模型,其中包括气体冷却、恒星际介质模型、在一定密度限定下的随 机恒星反馈和恒星演化模型、气体再循环、化学增丰、来自超新星的反馈、超大质量黑洞动 力学和 AGN 反馈作用等。该模拟所用的宇宙学参数为 WMAP-9 的结果。他们所采用的模拟 程序为 AREPO^[126],这是一个修正的移动网格类数值模拟程序,包含了流体动力学方程欧拉 特性和拉格朗日特性,并用泰森多边形曲面细分法来进行空间离散。引力由 treePM 方式得 到,其短程力通过多层的八叉树算法得到。

他们用 Illustris 数值模拟得到了超过 40 000 个能清晰分辨的星系,其中包括早型的、晚型的和不规则的星系,而且得到了很可靠的恒星形成率、星系光度函数和重子转化效率,并且其星系的内部速度满足恒星和重子的 TF (Tully-Fisher)关系。这个模拟重建了观测的早型和晚型星系,并且预言了暗晕质量函数受重子的影响,以及超新星和 AGN 反馈对暗晕质量的影响。随后,人们利用 Illustris 数值模拟进行了大量的研究,例如对星系的形态演化、卫星星系性质、大尺度的中性氢特性、星系内部的分子气体和金属性粒子的分布、星系的旋转速度轮廓等的研究。Illustris 已经成为当今应用最广泛的宇宙学流体动力学数值模拟之一。图 12 给出了 Illustris 数值模拟中两个星系的演化。



在标准宇宙学模型下,人们认为宇宙的质量-能量密度是由未知形式的暗物质和暗能量 所决定的。为了验证以上理论,需要对宇宙中的恒星、离散气体和吸积的黑洞等可见物质进 行准确的预测。此外,为了进一步研究星系的形成和演化,数值模需要模拟出能够与真实星 系相似,并且结构足够清晰的星系,从而与真实宇宙进行对比。为了达到以上目的,人们发 展了 IllustrisTNG 数值模拟^[214-218]。根据模拟体积的不同,IllustrisTNG 数值模拟可以分成 TNG50 (模拟空间边长为 50 *h*⁻¹Mpc), TNG100 (模拟空间边长为 100 *h*⁻¹Mpc) 和 TNG300 (模拟空间边长为 300 *h*⁻¹Mpc) 三种。

5.2.4 MB 数值模拟

Di Matteo 等人^[219]提出了一个流体动力学宇宙大尺度数值模拟——MB (massive black) 数值模拟。这个高分辨率数值模拟能够在研究星系内区域质量分布的同时,研究千兆秒 差距尺度的结构演化,因此,能够用来研究第一代类星体 (quasar)。MB 数值模拟采用 的宇宙学参数为 WMAP-5 的结果,暗物质和气体粒子数总共为 2 × 3200³ 个,模拟空 间边长为 533 h^{-1} Mpc,引力平滑长度为 $\epsilon = 5 h^{-1}$ kpc,气体和暗物质粒子质量分别为 $m_{gas} = 5.7 \times 10^7 h^{-1} M_{\odot}, m_{DM} = 2.8 \times 10^8 h^{-1} M_{\odot}, 所用模拟程序为 GADGET2 的进阶版$ P-GADGET3 程序。该程序主要改进了引力和 SPH 算法的线程利用,使得模拟程序能够应用在千万亿次级的超算机上。Di Matteo 等人通过分析数值模拟结果发现,在以上条件下能够得到第一代包含大质量黑洞的类星体。但是数值模拟的反馈作用并不能有效地控制冷气体, $使其停止注入到星系的中心区域。直到暗晕的质量大于 <math>10^{12} M_{\odot}$ 时,中心区域的冷气体吸积 才会停止。研究表明,冷气体驱动过程在宇宙早期是普遍存在的。此外,Di Matteo 等人对 高红移类星体的形成和周围环境,以及中心超大质量黑洞的吸积过程也进行了研究。

Khanda 等人^[220]在 MB 的基础上,发展出了 MB-II 数值模拟。MB-II 的模拟空间边长为 100 h^{-1} Mpc,与 Horizon-AGN, Illustris 和 EAGLE 这三个当时最好的数值模拟相当,因此可以互相比较,从而得到更完善的结果。MB-II 所采用的宇宙学参数比 MB 更精确,为 WMAP-7 的结果;质量分辨率比 MB 要高一个数量级,分别为 $m_{\text{DM}} = 1.1 \times 10^7 h^{-1} M_{\odot}$ 和 $m_{\text{gas}} = 2.2 \times 10^7 h^{-1} M_{\odot}$;空间分辨率为 $\epsilon = 1.85 h^{-1}$ kpc,同样比 MB 高得多。另外,他们还提供了 MB-II 纯暗物质模拟 (MB-II-dark matter only),以研究重子物质对宇宙学统计性质的影响。这两个模拟所用的数值模拟程序和亚网格物理过程与 MB 都相同。图 13 给出了 MB-II 数值模拟的可视化图。



注: O) z = 1.0 时整个空间的投影; I), II), III) 分别为三个不同的 FOF 模拟星系团的气体粒子分布; a)—f) 为对应的恒星成分分布。

图 13 MB-II 数值模拟的可视化图^[220]

MB-II 数值模拟中的暗晕质量函数比纯暗物质的 MB-II 模拟中的结果要高 20% ~ 30%。 用 MB-II 可以得到与观测相一致的星系在暗晕中的数密度分布和星系的聚合性质,并且所得 到的星系的能谱分布除了比观测结果在振幅上要低,其他的都符合。MB-II 模拟得到的星系 恒星质量函数在高红移处与观测符合得很好;而在低红移处,小质量端的结果与观测相比太 陡,说明 MB-II 模拟中的小质量星系太多,而这类星系主要是恒星形成率很低的星系。一个 可能的解释是,在数值模拟过程中,对于恒星形成模型和反馈作用的描述还不够完善。 5.2.5 EAGLE 数值模拟

Schaye 等人^[221]在 2015 年提出了一系列与 Illustris 模拟的分辨率和粒子数目都相当的 流体动力学宇宙大尺度数值模拟 EAGLE (Evolution and Assembly of Galaxies and Their Environments) 项目。类似于同期的其他流体动力学模拟,这个项目的主要目的是研究星系 的形成,及其与周围气体环境的共同演化。相对于其他模拟,EAGLE 数值模拟中的亚网格 物理过程模型中增加了来自大质量恒星和吸积黑洞的反馈作用。另外,它所用的数值模拟算 法也比其他模拟更完善^[222]。EAGLE 数值模拟的亚网格物理过程模型中的总反馈效率来自巡 天观测中红移 z = 0 时的结果,因此可以重建精确度很高的观测结果。

EAGLE 数值模拟所用模拟程序为 GADGET-3 的改进版本,它主要对 SPH 的形式、时间步长和亚网格物理过程进行了改进,其中的物理过程是根据 OWLS 数值模拟发展演化而来,并作部分修改,包括了 11 个元素之间的辐射冷却、恒星形成和质量丢失、来自恒星形成的能量反馈、依赖超大质量黑洞的气体吸积和并合、AGN 反馈作用等。它所采用的宇宙学参数为普朗克卫星于 2013 年的观测结果。EAGLE 总共包括了四个不同空间大小的模拟,其中最大的模拟空间边长为 100 Mpc,粒子数目为 2 × 1504³ (气体和暗物质粒子的数目相当,且各占一半),气体粒子质量为 $m_{\rm gas} = 1.81 \times 10^6 M_{\odot}$,暗物质粒子质量为 $m_{\rm DM} = 9.7 \times 10^6 M_{\odot}$,空间分辨率达 700 pc。

Schaye 等人通过对模拟数据的初步分析,在误差控制范围内重建出了预期的观测星系恒 星质量函数,并且在低红移下,得到的星系恒星形成率、TF关系、星系星云的恒星总光度 和星际介质的空间分布等都与观测结果比较一致。此外,所得到的气体和恒星质量-丰度关系 在中等和大质量端与观测一致,但在低质量端偏差较大。虽然气体的比例和温度太高,但是 可以通过调节 AGN 反馈的效率来匹配。图 14 给出了 EAGLE 数值模拟的部分星系样本。



注:每个图所对应的模拟空间边长都为 60 kpc。对于盘星系 (图中右边两组星系),都给出了径向和面向的投影。除了第三个椭圆星系 (图中左上方左起第三个星系)质量为 $1 \times 10^{11} M_{\odot}$ 和左下角的并合星系质量为 $8 \times 10^{10} M_{\odot}$ 外,其他所有星系的恒星质量范围为 $5 \times 10^{10} M_{\odot} \sim 6 \times 10^{10} M_{\odot}$ 。

图 14 从空间边长为 100 Mpc 的 EAGLE 数值模拟中提取的 z = 0 时的部分星系样本 $^{[221]}$

5.2.6 其他流体动力学宇宙大尺度数值模拟

Horizon-AGN 数值模拟^[223]主要研究星系的旋转与宇宙网络中的纤维结构在方向上的关系。这在观测和纯引力模拟中得到过一定的结论,但是在精确性和星系的多样性上存在较大的不完整性。同时,该模拟通过模拟出更具多样性的星系验证了以下结论:大质量暗晕的旋转近似垂直于所在纤维结构的方向,这是由于大质量的暗晕是由并合所得到的;低质量的暗晕由于并不是由并合产生,其质量增长由气体吸积提供,因此它们的旋转方向平行于纤维结构。

原初或第一代星系的研究对于理解早期宇宙结构的形成和演化有很重要的作用,为此, Feng 等人^[224, 225] 提出了一个流体动力学宇宙大尺度数值模拟——BlueTides 数值模拟。这个 模拟的空间边长为 400 h^{-1} Mpc,所包括的暗物质和气体粒子个数为 2 × 7040³。这是当时包 含粒子数目最多的流体动力学数值模拟,其空间分辨率为 $\epsilon = 1.5 h^{-1}$ kpc。该模拟所用的模 拟程序与 MB 数值模拟相同,为 P-GADGET3,所用的恒星反馈模型类似于 Illustris。Feng 等人通过该数值模拟得到,当 8 $\leq z \leq 10$ 时,恒星形成率与观测能很好地符合;星系光度函 数在 $-18 \sim -22.5$ 范围内与观测符合得很好;8 $\leq z \leq 10$ 时,大多数大质量星系为盘星系。

随着观测尺度和精度的不断提高,人们对 CMB 和低红移的大尺度结构的理解也不断深入。此外,大量星系巡天为大尺度结构的研究提供了大量星系和星团样本,加深了人们对不同层次结构形成和演化中的物理过程的理解,因此,全空间的流体力学宇宙大尺度数值模拟仍在不断发展,例如,最新的相关性比较大的两个数值模拟——大质量系统的重子和暗晕数 值模拟项目 (Baryons and Haloes of Massive System Project, BAHAMAS Project)^[226]和大质 量星系团和星团内结构数值模拟项目 (Massive Clusters and Intercluster Structures Project, MACSIS Project)^[227]。

在之前的研究和数值模拟发展过程中,人们发现数值算法中的反馈作用,特别是恒星的反馈对模拟出与观测相匹配的物理结果有着重大的作用,因此,McCarthy等人^[226]采用OWLS/Cosmo-OWLS的模拟程序和星系形成模型,并运用与 EAGLE 和 Illustris 相似,但 针对不同的宇宙学物理量的校准策略 (calibration strategy),得到了与观测一致的近邻宇宙 星系恒星质量函数 (galaxy stellar mass fuction, GSMF),发展了 BAHAMAS 数值模拟。虽 然 Cosmo-OWLS 的 GSMF 与观测的结果差异较大,但是 BAHAMAS 数值模拟通过调节星 系形成模型中 AGN 反馈参量和恒星反馈风的速度,得到了与观测一致的结果。

6 总结与展望

Bertschinger^[228]在 1998 年详细地总结了宇宙学数值模拟的发展。2008 年,Dolag 等人^[229]对宇宙学数值模拟的算法进行了更新和总结,对由此发展出的模拟程序比较研究做了总结性的说明,并总结了星系形成模型的发展对于数值模拟的促进作用。随着 21 世纪初期观测技术的迅速发展,数值模拟的结果可以在小尺度上与观测做比较详细的对比。Kuhlen 等人^[230]以暗物质和暗能量的研究为出发点,对宇宙学数值模拟在各个尺度上的发展做出了

较全面的总结。随着宇宙学数值模拟的规模、精度和分辨率的不断提高,数值模拟结果在大 尺度结构上已经可以与观测结果相一致,但在小尺度,特别是在星系尺度上,数值模拟还不 能给出相符合的结论 (相对来说,数值模拟的结果比半解析模型要准确,也比较有可信度)。 Primack^[231] 在总结宇宙结构研究的过程中着重介绍了模拟中的小尺度问题。

宇宙学大尺度数值模拟从最初的只能通过直和法来计算少量粒子的引力,发展到现代的 通过多样的树结构和网格化结构简化计算过程,来研究粒子数达109量级以上的粒子运动, 主要得益于数值算法的不断改进和计算机技术的快速发展。宇宙学大尺度数值模拟的基础是 宇宙学原理和爱因斯坦理论的标准宇宙学模型,所采用的数值算法是通过不同的方法数值求 解玻尔兹曼方程和流体力学方程,以得到不同粒子间的相互作用,包括引力、气体动力学作 用和辐射等。在观测基础上,人们在数值模拟中加入不同时期的星系形成模型,得到了越来 越接近真实宇宙的数值结果。但在这个过程中,也发现了越来越多的问题,例如星系的光度 函数在高质量端的不一致,星系的原始形态问题等。由于人们还未直接探测到暗物质和暗能 量,因此,在数值模拟中,人们仍然只能简单地处理它们,以致模拟结果中出现了卫星星系 缺失、小质量星系中心的暗物质密度分布和大质量子结构缺失等问题。ACDM 宇宙学模型虽 然得到了普遍公认,而且通过在数值模拟中加入可靠的星系形成物理模型 (其中的重要过程 为各种反馈作用),可以在一定程度上修正上述的问题,但是,由于暗物质和暗能量的未知 性,仍然需要更精确的巡天观测和各种模型基础下的数值模拟来验证可能的暗物质和暗能量 形式,其至修改引力模型。可以预见,随着下一代大规模巡天观测项目的实施和高性能计算 机技术的发展,宇宙学数值模拟仍将得到大力发展,并将在暗物质和暗能量的研究中发挥重 要的作用。

值得一提的是,在观测结果的限制下,重构宇宙场以得到与真实宇宙一致的结构,从而研究星系的形成和演化,可能是另一个重点的研究方向,如 Wang 等人^[232]提出的重构初始密度场研究近邻宇宙项目 (Exporing the Local Universe with the Reconstructed Initial Density Field Project, ELUCID Project) 数值模拟。他们将大尺度星系红移巡天得到的质量密度场重建为线性密度场,并应用在数值模拟中,以重建近邻宇宙的演化。他们所得到的模拟结果可用来与观测结果直接比较,具有很好的应用前景。

参考文献:

- [1] Zwicky F. Helvetica Physica Acta, 1933, 6: 110Z
- $\left[2\right]$ Corbelli E, Salucci P. MNRAS, 2000, 311: 441
- $[3]\,$ Taylor A N, Dye S, Broadhurst T J, et al. ApJ, 1998, 501: 539
- $\left[4\right]$ Riess A G, Filippenko A V, Challis P, et al. AJ, 1998, 116: 1009
- $[5]\,$ Perlmutter S, Aldering G, Goldhaber G, et al. ApJ, 1999, 517: 565
- [6] Bertone G, Hooper D, Silk J. Phys Rep, 2005, 405: 279
- [7] Melott A L. Physical Review Letters, 1982, 48: 894
- [8]~ White S D M, Frenk C S, Davis M. ApJ, 1983, 274: L1
- [9]~ White S D M, Davis M, Frenk C S. MNRAS, 1984, 209: 27P

- [10] Pagels H, Primack J R. Physical Review Letters, 1982, 48: 223
- [11] Dodelson S, Widrow L M. Physical Review Letters, 1994, 72: 17
- [12] Viel M, Lesgourgues J, Haehnelt M G, et al. Phys Rev D, 2005, 71: 063534
- [13] Peebles P J E. ApJ, 1982, 263: L1
- [14] Blumenthal G R, Faber S M, Primack J R, et al. Nature, 1984, 311: 517
- $[15]\,$ Davis M, Efstathiou G, Frenk C S, et al. ApJ, 1985, 292: 371
- [16] Dodelson S, Gates E I, Turner M S. Science, 1996, 274: 69
- [17] Holmberg E. ApJ, 1941, 94: 385
- $[18]\,$ von Hoerner S. ZAp, 1960, 50: 184V
- $[19]\,$ von Hoerner S. ZAp, 1963, 57: 47V
- $[20]\,$ Aarseth S J. MNRAS, 1963, 126: 223
- [21] Larson R B. MNRAS, 1969, 145: 405
- [22] Peebles P J E. AJ, 1970, 75: 13
- [23] White S D M. MNRAS, 1976, 177: 717
- [24] Press W H, Schechter P. ApJ, 1974, 187: 425
- [25] Haggerty M J, Janin G. A&A, 1974, 36: 415
- [26] Gott J R III. ARA&A, 1977, 15: 235
- $[27]\,$ Trimble V. ARA&A, 1987, 25: 425
- [28] Guth A H. Phys Rev D, 1981, 23: 347
- [29] Bond J R, Szalay A S. ApJ, 1983, 274: 443
- [30] Efstathiou G, Davis M, White S D M, et al. ApJS, 1985, 57: 241
- [31] Dekel A. ApJ, 1982, 261: L13
- [32] Peebles P J E. The Large-Scale Structure of the Universe. Princeton, N J: Princeton University Press, 1980: 435
- [33] Appel A W. SIAM J Sci Stat Comp, 1985, 6: 85
- [34] Barnes J, Hut P. Nature, 1986, 324: 446
- [35] Hockney R W, Eastwood J W. Computer Simulation Using Particles. Bristol: Hilger, 1988: 15
- [36] Efstathiou G, Eastwood J W. MNRAS, 1981, 194: 503
- [37] Melott A L, Einasto J, Saar E, et al. Physical Review Letters, 1983, 51: 935
- [38] Klypin A, Primack J, Holtzman J. ApJ, 1996, 466: 13
- [39] Springel V, White S D M, Jenkins A, et al. Nature, 2005, 435: 629
- [40] Boylan-Kolchin M, Springel V, White S D M, et al. MNRAS, 2009, 398: 1150
- [41] Klypin A A, Trujillo-Gomez S, Primack J. ApJ, 2011, 740: 102
- [42] Prada F, Klypin A A, Cuesta A J, et al. MNRAS, 2012, 423: 3018
- [43] Riebe K, Partl A M, Enke H, et al. Astronomische Nachrichten, 2013, 334: 691
- [44] Efstathiou G. MNRAS, 1992, 256: 43P
- [45] Moore B, Ghigna S, Governato F, et al. ApJ, 1999, 524: L19
- [46] Tegmark M, Strauss M A, Blanton M R, et al. Phys Rev D, 2004, 69: 103501
- [47] Colless M, Dalton G, Maddox S, et al. MNRAS, 2001, 328: 1039
- [48] Schlegel D J, Finkbeiner D P, Davis M. ApJ, 1998, 500: 525
- [49] Balbi A, Ade P, Bock J, et al. ApJ, 2000, 545: L1
- [50] Lewis A, Bridle S. Phys Rev D, 2002, 66: 103511
- [51] Bennett C L, Halpern M, Hinshaw G, et al. ApJS, 2003, 148: 1
- [52] Doroshkevich A G, Shandarin S F, Saar E. MNRAS, 1978, 184: 643
- [53] Shapiro P R, Struck-Marcell C, Melott A L. ApJ, 1983, 275: 413
- [54] Shapiro P R, Struck-Marcell C. ApJS, 1985, 57: 205
- [55] Lucy L B. AJ, 1977, 82: 1013
- $\left[56\right]$ Gingold R
 A, Monaghan J J. MNRAS, 1977, 181: 375
- [57] Evrard A E. MNRAS, 1988, 235: 911

- [58] Hernquist L, Katz N. ApJS, 1989, 70: 419
- [59] Richtmyer R D, Morton K W. Difference Methods for Initial-Value Problems. 2nd ed. New York: Interscience, 1967: 10
- [60] Ryu D, Vishniac E T, Chiang W H. ApJ, 1990, 354: 389
- [61] Cen R Y, Ostriker J P, Spergel D N, et al. ApJ, 1991 , 383: 1
- [62] Yuan W, Centrella J M, Norman M L. ApJ, 1991, 376: L29
- [63] Springel V, Yoshida N, White S D M. New Astronomy, 2001, 6: 79
- $[64]\,$ Springel V. MNRAS, 2005, 364: 1105
- [65] Schaller M, Dalla Vecchia C, Schaye J, et al. MNRAS, 2015, 454: 2277
- [66] Vogelsberger M, Genel S, Springel V, et al. MNRAS, 2014, 444: 1518
- [67] Nelson D, Pillepich A, Genel S, et al. Astronomy and Computing, 2015, 13: 12
- [68] Linde A. Inflationary Cosmology, 2008, 738: 1
- [69] Harrison E R. Phys Rev D, 1970, 1: 2726
- [70] Zeldovich Y B. MNRAS, 1972, 160: 1P
- [71] Penzias A A, Wilson R W. ApJ, 1965, 142: 419
- [72] Smoot G F, Bennett C L, Kogut A, et al. ApJ, 1992, 396: L1
- [73] Cowsik R, McClelland J. Physical Review Letters, 1972, 29: 669
- [74] Lee B W, Weinberg S. Physical Review Letters, 1977, 39: 165
- [75] Bond J R, Efstathiou G, Silk J. Physical Review Letters, 1980, 45: 1980
- [76] Bahcall N A, Ostriker J P, Perlmutter S, et al. Science, 1999, 284: 1481
- [77] Mo H J, White S D M. MNRAS, 2002, 336: 112
- [78] Sheth R K, Tormen G. MNRAS, 2002, 329: 61
- [79] Lin C C, Mestel L, Shu F. ApJ, 1965, 142: 1431
- [80] Zel'dovich Y B. A&A, 1970, 5: 84
- [81] Dodelson S. Modern cosmology. Amsterdam, Netherlands: Academic Press, 2003: 84
- [82] Sugimoto D, Chikada Y, Makino J, et al. Nature, 1990, 345: 33
- [83] Ito T, Makino J, Ebisuzaki T, et al. Computer Physics Communications, 1990, 60: 187
- [84] Hut P, Makino J. Science, 1999, 283: 501
- [85] Ito T, Ebisuzaki T, Makino J, et al. PASJ, 1991, 43: 547
- [86] Okumura S K, Makino J, Ebisuzaki T, et al. PASJ, 1993, 45: 329
- [87] Makino J, Taiji M, Ebisuzaki T, et al. ApJ, 1997, 480: 432
- [88] Kawai A, Fukushige T, Makino J, et al. PASJ, 2000, 52: 659
- [89] Makino J, Fukushige T, Koga M, et al. PASJ, 2003, 55: 1163
- [90] Makino J. PASJ, 1991, 43: 621
- [91] Brieu P P, Summers F J, Ostriker J P. ApJ, 1995, 453: 566
- [92] Tanikawa A, Yoshikawa K, et al. New Astronomy, 2013, 19: 74
- [93] Jernigan J G, Porter D H. ApJS, 1989, 71: 871
- [94] Press W H, Flannery B P, Teukolsky S A. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing. Cambridge: Cambridge University Press, 1986: 20
- [95] Greengard L, Rokhlin V. Journal of Computational Physics, 1987, 73: 325
- [96] Barnes J E, Hut P. ApJS, 1989, 70: 389
- [97] Stadel J G. PhD Thesis. Washington: University of Washington, 2001: 6
- [98] Wadsley J W, Stadel J, Quinn T. New Astronomy, 2004, 9: 137
- [99] Potter D, Stadel J, Teyssier R. Computational Astrophysics and Cosmology, 2017, 4: 2
- [100] Diemand J, Kuhlen M, Madau P. ApJ, 2007, 667: 859
- [101] Diemand J, Kuhlen M, Madau P, et al. Nature, 2008, 454: 735
- [102] Hernquist L. ApJS, 1987, 64: 715
- [103] Ewald P P. Annalen der Physik, 1921, 369: 253
- [104] Cooley J W, Tukey J W. Mathematics of Computation, 1965, 19(90): 297

- [105] Hockney R W. Journal of the ACM, 1965, 12(1): 95
- [106] Hockney R W, Goel S P, Eastwood J W. Journal of Computational Physics, 1974, 14: 148
- [107] Hockney R W, Eastwood J W. Computer Simulation Using Particles. New York: McGraw-Hill, 1981: 30
- [108] Gelb J M. BAAS, 1991, 23: 897
- [109] Martel H. ApJ, 1991, 366: 353
- [110] Xu G. ApJS, 1995, 98: 355
- [111] Dubinski J, Kim J, Park C, et al. New Astronomy, 2004, 9: 111
- [112] Fukushige T, Taiji M, Makino J, et al. ApJ, 1996, 468: 51
- [113] Couchman H M P. ApJ, 1991, 368: L23
- [114] Berger M J, Colella P. Journal of Computational Physics, 1989, 82: 64
- [115] Jessop C, Duncan M, Chau W Y. Journal of Computational Physics, 1994, 115: 339
- [116] Kravtsov A V, Klypin A A, Khokhlov A M. ApJS, 1997, 111: 73
- [117] Gnedin N Y. ApJS, 1995, 97: 231
- [118] Pen U L. ApJS, 1998, 115: 19
- [119] Xu G. MNRAS, 1997, 288: 903
- [120] 冯珑珑, 朱维善. 中国科学: 物理学力学天文学, 2013, 43(6): 687
- $\left[121\right]$ Bond J R, Centrella J, Szalay A S, et al. MNRAS, 1984, 210: 515
- [122] Hopkins P F. MNRAS, 2013, 428: 2840
- [123] Wiersma R P C, Schaye J, Smith B D. MNRAS, 2009, 393: 99
- $\left[124\right]$ Few C G, Courty S, Gibson B K, et al. MNRAS, 2012, 424: L11
- [125] Mavriplis D J. Annual Review of Fluid Mechanics, 1997, 29: 473
- [126] Springel V. MNRAS, 2010, 401: 791
- [127] Frenk C S, White S D M, Bode P, et al. ApJ, 1999, 525: 554
- [128] Sijacki D, Vogelsberger M, Kereš D, et al. MNRAS, 2012, 424: 2999
- [129] Monaghan J J. ARA&A, 1992, 30: 543
- [130] Price D J. Journal of Computational Physics, 2012, 231: 759
- [131] Price D J. Journal of Computational Physics, 2008, 227: 10040
- [132] Cullen L, Dehnen W. MNRAS, 2010, 408: 669
- [133] Read J I, Hayfield T. MNRAS, 2012, 422: 3037
- [134] Couchman H M P, Thomas P A, Pearce F R. ApJ, 1995, 452: 797
- [135] Steinmetz M. MNRAS, 1996, 278: 1005
- [136] Owen J M, Villumsen J V, Shapiro P R, et al. ApJS, 1998, 116: 155
- [137] Hopkins P F. MNRAS, 2015, 450: 53
- [138] Sod G A. Numerical Methods in Fluid Dynamics. Cambridge: Cambridge Univ Press, 1985: 1
- [139] Leveque R J. Mathematics of Computation, 1992, 57: 196
- [140] Courant R, Friedrichs K O. Pure and Applied Mathematics. New York: Interscience, 1948: 1
- [141] Harten A. Journal of Computational Physics, 1983, 49: 357
- [142] Colella P, Glaz H M. Journal of Computational Physics, 1985, 59: 264
- [143] Colella P, Woodward P R. Journal of Computational Physics, 1984, 54: 174
- [144] Godunov S K. Mat Sb, 1959, 47(89): 271
- [145] Harten A, Engquist B, Osher S, et al. Journal of Computational Physics, 1987, 71: 231
- [146] Jiang G S, Shu C W. Journal of Computational Physics, 1996, 126: 202
- [147] Levy D, Puppo G, Russo G. https://arxiv.org/pdf/math/9911089v1.pdf, arXiv:math/9911089v1, 1999
- [148] Shu C W. Lecture Notes in Mathematics, 1998, 1697: 285
- [149] Trac H, Pen U L. PASP, 2003, 115: 303
- [150] Anninos W Y, Norman M J. ApJ, 1994, 429: 434
- [151] Bryan G L, Norman M L. https://arxiv.org/pdf/astro-ph/9710187.pdf, arXiv:astro-ph/9710187, 1997
- [152] Vogelsberger M, Sijacki D, Kereš D, et al. MNRAS, 2012, 425: 3024
- [153] Lanson N, Vila J P. SIAM J Numer Anal, 2008, 46: 1912

- [154] Gaburov E, Nitadori K. MNRAS, 2011, 414: 129
- [155] Shi F, Yang X H, Wang H, et al. ApJ, 2016, 833: 241
- [156] Yang X H, Mo H J, van den Bosch F C, et al. ApJ, 2007, 671: 153
- [157] Dong X C, Lin W P, Kang X, et al. ApJ, 2014, 791: L33
- [158] Heitmann K, Lukić Z, Fasel P, et al. Computational Science and Discovery, 2008, 1: 015003
- [159] Kang H, Ostriker J P, Cen R, et al. ApJ, 1994, 430: 83
- [160] O'Shea B W, Nagamine K, Springel V, et al. ApJS, 2005, 160: 1
- [161] Tasker E J, Brunino R, Mitchell N L, et al. MNRAS, 2008, 390: 1267
- [162] Scannapieco C, Wadepuhl M, Parry O H, et al. MNRAS, 2012, 423: 1726
- [163] Sembolini F, Yepes G, Pearce F R, et al. MNRAS, 2016, 457: 4063
- [164] Sembolini F, Elahi P J, Pearce F R, et al. MNRAS, 2016, 459: 2973
- [165] Elahi P J, Knebe A, Pearce F R, et al. MNRAS, 2016, 458: 1096
- [166] Cui W, Power C, Knebe A, et al. MNRAS, 2016, 458: 4052
- [167] Arthur J, Pearce F R, Gray M E, et al. MNRAS, 2017, 464: 2027
- [168] Gelb J M, Bertschinger E. ApJ, 1994, 436: 467
- [169] Gelb J M, Bertschinger E. ApJ, 1994, 436: 491
- [170] Jenkins A, Frenk C S, Pearce F R, et al. ApJ, 1998, 499: 20
- $[171]~{\rm Cen}$ R, Ostriker J P. ApJ, 1992, 399: L113
- [172] Katz N, Hernquist L, Weinberg D H. ApJ, 1992, 399: L109
- $\left[173\right]$ Evrard A E, Summers F J, Davis M. ApJ, 1994, 422: 11
- [174] Jenkins A, Frenk C S, Pearce F R, et al. https://arxiv.org/pdf/astro-ph/9610206.pdf, arXiv:astro-ph/9610206, 1996
- [175] Evrard A E, MacFarland T J, Couchman H M P, et al. ApJ, 2002, 573: 7
- [176] Pearce F R, Couchman H M P. New Astronomy, 1997, 2: 411
- [177] Kay S T, Liddle A R, Thomas P A. MNRAS, 2001, 325: 835
- [178] Springel V, Wang J, Vogelsberger M, et al. MNRAS, 2008, 391: 1685
- [179] Angulo R E, Springel V, White S D M, et al. MNRAS, 2012, 426: 2046
- [180] Kim J, Park C, Gott J R III, et al. ApJ, 2009, 701: 1547
- [181] Kim J, Park C, Rossi G, et al. Journal of Korean Astronomical Society, 2011, 44: 217
- [182] Kim J, Park C, L'Huillier B, et al. Journal of Korean Astronomical Society, 2015, 48: 213
- [183] Navarro J F, Frenk C S, White S D M. ApJ, 1996, 462: 563
- [184] Prada F, Scóccola C G, Chuang C H, et al. MNRAS, 2016, 458: 613
- [185] Rodríguez-Puebla A, Behroozi P, Primack J, et al. MNRAS, 2016, 462: 893
- [186] Teyssier R, Pires S, Prunet S, et al. A&A, 2009, 497: 335
- [187] Wozniak H, Horizon Consortium. Mem Soc Astron Italiana, 2009, 80: 357
- [188] Alimi J M, Füzfa A, Boucher V, et al. MNRAS, 2010, 401: 775
- [189] Courtin J, Rasera Y, Alimi J M, et al. MNRAS, 2011, 410: 1911
- [190] Teyssier R. A&A, 2002, 385: 337
- [191] Alimi J M, Bouillot V, Rasera Y, et al. https://arxiv.org/pdf/1206.2838.pdf, arXiv:1206.2838, 2012
- [192] Habib S, Morozov V, Finkel H, et al. https://arxiv.org/pdf/1211.4864.pdf, arXiv:1211.4864, 2012
- [193] Heitmann K, Frontiere N, Sewell C, et al. ApJS, 2015, 219: 34
- [194] Watson W A, Iliev I T, Diego J M, et al. MNRAS, 2014, 437: 3776
- [195] Harnois-Déraps J, Pen U L, Iliev I T, et al. MNRAS, 2013, 436: 540
- [196] Watson W A, Diego J M, Gottlöber S, et al. MNRAS, 2014, 438: 412
- [197] Hotchkiss S, Nadathur S, Gottlöber S, et al. MNRAS, 2015, 446: 1321
- [198] Skillman S W, Warren M S, Turk M J, et al. https://arxiv.org/pdf/1407.2600.pdf, arXiv:1407.2600, 2014
- [199] Warren M S. https://arxiv.org/pdf/1310.4502.pdf, arXiv:1310.4502, 2013
- $\left[200\right]$ Cooray A, Sheth R. Phys Rep, 2002, 372: 1
- [201] Baugh C M. Reports on Progress in Physics, 2006, 69: 3101

- [202] Davé R, Hernquist L, Katz N, et al. ApJ, 1999, 511: 521
- [203] McDonald P, Seljak U, Cen R, et al. ApJ, 2005, 635: 761
- [204] Rahmati A, Schaye J, Pawlik A H, et al. MNRAS, 2013, 431: 2261
- [205] Hopkins P F, Kereš D, Oñorbe J, et al. MNRAS, 2014, 445: 581
- $\left[206\right]$ Saitoh T
 R, Makino J. ApJ, 2013, 768: 44
- [207] Gottlöber S, Yepes G, Wagner C, et al. https://arxiv.org/pdf/astro-ph/0608289.pdf, arXiv:astro-ph/0608289, 2006
- [208] Gottlöber S, Yepes G. ApJ, 2007, 664: 117
- [209] Forero-Romero J E, Gottlöber S, Yepes G. ApJ, 2010, 725: 598
- [210] Yepes G, Martinez-Vaquero L, Khalatyan A, et al. Dark Galaxies and Lost Baryons, 2008, 244: 393
- [211] Ocvirk P, Pichon C, Teyssier R. MNRAS, 2008, 390: 1326
- [212] Schaye J, Dalla Vecchia C, Booth C M, et al. MNRAS, 2010, 402: 1536
- [213] Le Brun A M C, McCarthy I G, Schaye J, et al. MNRAS, 2014, 441: 1270
- [214] Marinacci F, Vogelsberger M, Pakmor R, et al. https://arxiv.org/pdf/1707.03396.pdf, arXiv:1707.03396, 2017
- [215] Naiman J P, Pillepich A, Springel V, et al. https://arxiv.org/pdf/1707.03401.pdf, arXiv:1707.03401, 2017
- [216] Springel V, Pakmor R, Pillepich A, et al. https://arxiv.org/pdf/1707.03397.pdf, arXiv:1707.03397, 2017 arXiv:1707.03497 arXiv:1707.0347 arXiv:1707.0347 arXiv:1707.0347 arXiv:1707.0347 arXiv:1707.0347 arXiv:
- [217] Pillepich A, Nelson D, Hernquist L, et al. https://arxiv.org/pdf/1707.03406.pdf, arXiv:1707.03406, 2017
- [218] Nelson D, Pillepich A, Springel V, et al. https://arxiv.org/pdf/1707.03395.pdf, arXiv:1707.03395, 2017
- [219] Di Matteo T, Khandai N, DeGraf C, et al. ApJ, 2012, 745: L29
- $\left[220\right]$ Khandai N, Di Matteo T, Croft R, et al. MNRAS, 2015, 450: 1349
- [221] Schaye J, Crain R A, Bower R G, et al. MNRAS, 2015, 446: 521
- $\left[222\right]$ Crain R A, Schaye J, Bower R G, et al. MNRAS, 2015, 450: 1937
- $\left[223\right]$ Dubois Y, Pichon C, Welker C, et al. MNRAS, 2014, 444: 1453
- $\left[224\right]$ Feng Y, Di Matteo T, Croft R, et al. ApJ, 2015, 808: L17
- $\left[225\right]$ Feng Y, Di Matteo T, Croft R, et al. MNRAS, 2016, 455: 2778
- [226] McCarthy I G, Schaye J, Bird S, et al. MNRAS, 2017, 465: 2936
- $\left[227\right]$ Barnes D
 J, Kay S T, Henson M A, et al. MNRAS, 2017, 465: 213
- $\left[228\right]$ Bertschinger E. ARA&A, 1998, 36: 599
- [229] Dolag K, Borgani S, Schindler S, et al. Space Sci Rev, 2008, 134: 229
- [230] Kuhlen M, Vogelsberger M, Angulo R. Physics of the Dark Universe, 2012, 1: 50
- [231] Primack J R. https://arxiv.org/pdf/1505.02821.pdf, arXiv:1505.02821, 2015
- [232] Wang H Y, Mo H J, Yang X, et al. ApJ, 2014, 794: 94

The Frontier of Studies on Cosmological Structure Numerical Simulation

TANG Lin^{1,2}, LIN Wei-peng^{1,3}

(1. Key Laboratory for Research in Galaxies and Cosmology, Shanghai Astronomical Observatory, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200030, China; 2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China; 3. School of Physics and Astronomy, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: The cosmic structure formation and evolution is driven by the gravitational action combined with the primordial density perturbation and multiple physical processes. With the

interaction between gravity and cosmic expansion, the primordial density perturbation continuously increased, and evolved into the current cosmic structure by linear and nonlinear evolution. Given a cosmological model, the history of dark matter and baryonic matter can be traced by a series of idealized dynamical equations. In the past several decades, there have been a great deal of numerical techniques to study the cosmic formation and evolution, from original pure gravitational numerical simulations with dozens of particles to modern hydrodynamical simulations with 10^{10} particles and pc-scale resolution region. This development is contributed by the perfection of numerical algorithms and progress of computational techniques, causing the resolution and accuracy of simulation much higher. With the benefit from a large amount of galaxy surveys, astronomers have a deeper understanding for the physical processes affecting galaxy formation, which improves the sub-grid physical processes description in algorithms. Combined these simulation results with that of observations, people have a more profound understanding for large scale structure of the universe, formation and evolution of the galaxy clusters. Those results also affect the development direction of observation and equipment research. The comparisons between different simulation codes confirm that results from the pure gravitational simulations are similar, but different hydro-dynamical simulations show much inconsistent conclusions, because of difference of the galaxy formation model. The history of large scale cosmological numerical simulation and a large kind of modern numerical simulations are reviewed in this paper.

Key words: cosmic structure; galaxy formation and evolution; numerical simulation; N-body dynamics; hydrodynamics