现代宇宙学中的数值模拟技术和应用

冯珑珑^{①*}, 朱维善^{②③}^① 中国科学院紫金山天文台, 南京 210008;^② 南京大学天文与空间科学学院, 南京 210093;^③ 教育部现代天文与天体物理重点实验室, 南京 210093

* 联系人, E-mail: fengl@pmo.ac.cn

收稿日期: 2013-01-16; 接受日期: 2013-03-26

国家自然科学基金 (批准号: 11273060, 91230115)

摘要 宇宙尺度上物理过程的多样性和高度非线性使数值模拟成为现代宇宙学必不可少的研究手段, 它不仅细致追踪宇宙结构的形成和演化历史, 同时也为观测和理论模型的检验建立了一个桥梁. 本文将总结计算宇宙学领域技术方法的最新发展, 包括无碰撞粒子 N 体数值模拟技术, 引入重子物理的计算流体方法. 在此基础上, 我们将针对现代宇宙学的核心科学问题, 简要综述数值模拟技术在面向下一代巡天观测, 尤其是暗物质和暗能量探测方面的实际应用. 此外, 我们选择性地讨论了数值模拟在第一代恒星和反馈作用、宇宙中的气体吸积和恒星形成, 以及高红移星系盘的形成研究中所发挥的作用. 因应下一代大规模巡天的开展和超级计算技术的快速进步, 我们也展望了在未来十年计算宇宙学和相关科学可能取得的进展及发展趋势.

关键词 宇宙学, 数值模拟技术, 暗物质, 暗能量, 星系形成和演化

PACS: 78.20.Bh, 47.11.-j, 95.36.+x, 95.35.+d, 98.80.Bp

doi: 10.1360/132013-33

1 引言

数值模拟技术是现代天体物理不可缺少的基本研究手段, 为现代宇宙学及观测检验提供了强有力的数值试验工具. 同时日益增长的研究需求也使天体物理成为超级计算机及计算技术发展的最重要推动者之一. 特别是自 20 世纪 90 年代以来, 计算机技术的迅速提高极大地推动了星系和宇宙学数值模拟工作的发展. 并在现代架构的超级计算平台上, 发展了各种高精度高分辨率的高性能并行数值算法^[1], 使在大规模数值模拟中引入各种复杂物理过程成为可能, 如辐射转移过程, 恒星形成模型, 各种力学、辐射

和化学反馈作用, 吸积和喷流过程等. 而数值模拟和半解析模型的结合, 为理论模型的观测检验提供了基本的手段.

20 世纪 60 年代, 数值模拟技术最早进入宇宙学研究领域^[2,3], 受限于当时的计算机技术水平, 模拟粒子数只有几百或上千, 而目前超大规模的宇宙学模拟已能采用数百亿, 甚至上万亿的暗物质粒子网格来追踪宇宙中的结构形成^[4]. 传统的纯暗物质粒子模拟, 借助密度功率谱分析等多个统计分析工具, 验证了冷暗物质模型对于解释大规模巡天观测所展现的宇宙大尺度结构的优越性, 建立了对暗物质晕及其子结构的密度轮廓、速度弥散以及质量函数的

引用格式: 冯珑珑, 朱维善. 现代宇宙学中的数值模拟技术和应用. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2013, 43: 687–707

Feng L L, Zhu W S. The simulation techniques and applications in modern cosmology (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2013, 43: 687–707, doi: 10.1360/132013-33

高精度描述;与此同时,揭示了冷暗物质模型在小尺度上存在的明显问题,以及温、热暗物质等替代模型的优缺点^[5-12].

数值模拟在现代宇宙学中扮演着双重角色,一方面它提供一个直接的方法去探索宇宙如何从早期几乎是均匀各向同性的状态演化成我们今天观测到的包括各种成团结构的图景,同时也能使宇宙学家去细致比较理论模型和大型观测设备所获得的观测数据.另一方面,暗物质、暗能量探测计划对现代宇宙学理论提出了巨大挑战,它要求计算宇宙学能够提供足够精细的模拟样本,帮助我们从具有多重复杂性的宇宙中精确提取以及辨别暗物质和暗能量的信息,这也是我们进入精确宇宙学年代的最显著特点^[13].

本文首先综述了现代计算宇宙学中的各种模拟技术和涉及的相关物理,然后对其在暗物质和暗能量探测、宇宙大尺度结构、星系的形成和演化等热点课题中的应用进行了简要的介绍.最后,结合主要科学问题和高性能计算机软硬件技术的进步,展望了未来十年的计算宇宙学.

2 纯暗物质模拟: 无碰撞粒子系统

冷暗物质的重要特征是其参与的相互作用非常弱,是中性稳定的非相对论性粒子,通常可以作为无碰撞粒子的自引力体系来处理.在膨胀宇宙背景中,暗物质的动力学演化可以用相空间的分布函数 $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ 来刻画,这里 $\{\mathbf{x}, \mathbf{p}\}$ 为粒子的共动坐标和共轭动量,它满足无碰撞的 Vlasov 方程^[14]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{ma^2} \mathbf{p} \cdot \nabla f - m \nabla \phi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (1)$$

这里 a 为膨胀因子, ϕ 为引力势,它满足 Poisson 方程

$$\nabla^2 \phi = 4\pi G a^2 (\rho(\mathbf{x}, t) - \bar{\rho}). \quad (2)$$

其中 $\bar{\rho}(t)$ 为均匀背景密度,而 $\rho(\mathbf{x}, t)$ 是固有物质密度,可以由对分布函数的动量 $\mathbf{p} = ma^2 \dot{\mathbf{x}}$ 积分获得

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}. \quad (3)$$

原则上,我们可以通过这组方程来追踪暗物质体系的动力学演化.这组方程代表一个 7 维问题,数值

求解需要巨大的内存消耗.一种现实的解决方案是 Monto-Carlo 近似,即用 N 个示踪粒子对分布函数 $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ 进行离散采样,通过单粒子运动方程追踪其轨迹变化

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{1}{a} \mathbf{v}, \quad (4)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{\dot{a}}{a} \mathbf{v} = -\frac{\nabla \phi}{a}. \quad (5)$$

膨胀因子的时间微分可以由 Friedmann 方程给出.方程 (4), (5) 结合 Poisson 方程 (2) 构成了宇宙学 N 体数值模拟的基本方程组,其核心是如何计算多粒子体系的引力势.目前已发展了多种数值算法,将在以下小节中简述.

2.1 粒子方法

对多粒子体系的引力问题,最原始的方法是直接求和法,即每一个粒子所受到的力是其余 $N-1$ 个粒子对其所产生引力的矢量和

$$\mathbf{F}_i = Gm^2 \sum_{j \neq i} \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{(\epsilon^2 + |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2)^{3/2}}. \quad (6)$$

这种方法被称为粒子-粒子(Particle-Particle, PP)方法.为避免粒子相互接近时的两体碰撞效应,在牛顿引力定律中引入软化因子 ϵ ,它等效于把点粒子看成按 Plummer 质量分布的球体. PP 算法的主要优点是不依赖于系统的几何,力的计算精度也可以随问题控制,算法的程序实现也相对容易.但其主要困难是,对于 N 个粒子的体系,在每个时间积分步对引力求和的计算量为 $O(N^2)$,当粒子数很大时,计算的开销非常巨大.受计算资源的限制,该算法以往仅被用于致密恒星系统的演化、星系相互作用和碰撞等粒子数较少的场合^[15].

PP 算法是对粒子间引力作用按 $1/r^2$ 法则的运算操作,而实现此类单一运算功能的专用芯片技术现在已非常成熟.针对 PP 算法的一种加速方案就是基于这一思想.日本东京大学研发了用于 PP 算法的加速芯片 GRAPE (GRAVity PipE),目前已成功开发至第 6 代.配备该芯片的小型计算工作站可以达到普通芯片超级计算机的计算规模.结合其他混合型 N 体算法, GRAPE 已被用于星系和宇宙学中的密集计算场合^[16-19].此外,值得一提的是,在超立方拓扑网格

的计算集群或 GPU 架构的超级计算平台上, 可以使 N 体问题的 $O(N^2)$ 单步时间开销降为 $O(N)^{[20,21]}$.

为克服 PP 算法的庞大计算开销, 同时保留其直接求和的计算精度, 另一种解决方案是所谓的树方法^[22-24]. 该方法的主要思想是, 根据粒子之间的相对距离将其递归分配到等级式树状数据结构中. 常用的分类方法包括二叉树和八叉树结构. 二叉树结构是将最相邻的两个粒子配为一对, 再和最临近的粒子对配成兄弟节点, 持续这一过程就可以得到整个体系的两叉树结构. 目前比较常用的是八叉树结构, 该方法首先将模拟盒子均分为 8 个亚格, 将该过程循环操作直到底层亚格内只包含一个粒子. 在计算某一粒子所受到的引力时, 首先考察该粒子与某高层亚格的距离 d 和该高层亚格的大小 s . 如果 $s/d < \theta$ (θ 是设定的容忍参数), 则该高层亚格内所有粒子对该粒子的引力作用, 可以看成质量为亚格中所有粒子质量和的单个粒子的引力作用; 如果该不等式不成立, 则进入下一级亚格; 遍历八叉树, 即可得到该粒子所受引力作用. 在此情形下, 引力可以通过有心力场的多级展开计算, 通常只保留到四级距. 对树方法, 单个时间步所需要的计算量为 $O(N \log N)$.

2.2 网格方法

简单地讲, 网格方法就是将引力的计算放在网格上进行. 对 Poisson 方程, 其解可以写成积分形式

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \int \mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho(\mathbf{x}', t) d^3 \mathbf{x}'. \quad (7)$$

这里 $\mathcal{G}$ 是牛顿引力的格林函数, 在无限空间 $\mathcal{G} = 1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$. 设 $\{\phi_k(\mathbf{x}) | k \in \mathbf{Z}\}$ 为 $L^2(\mathcal{R})$ 空间中的一组正交基函数, 对离散粒子的密度分布 $\rho(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$, 可以通过这组基展开为

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_l s_l \phi_l(\mathbf{x}), \quad (8)$$

$$s_l = \int \rho(\mathbf{x}) \phi_l(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} = \sum_{i=1}^N \phi_l(\mathbf{x}_i). \quad (9)$$

类似地, 格林函数 $\mathcal{G}$ 可以按基函数做双线性展开

$$\mathcal{G}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \sum_{l,m} g_{l,m} \phi_l(\mathbf{x}) \phi_m(\mathbf{y}). \quad (10)$$

容易证明, 引力势可以写成

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \sum_k \tilde{g}_k \phi_k(\mathbf{x}). \quad (11)$$

其中

$$\tilde{g}_k = \sum_l g_{k,l} s_l. \quad (12)$$

对均匀核 $\mathcal{G}$, $g_{k,l} = g_{k-l}$ 为 Toeplitz 矩阵. 通常在数值上, 矩阵乘法式 (12) 可以通过快速 Fourier 变换获得. 进一步地, 对引力势的插值和数值微分可以得到作用在每个粒子上的引力. 这种算法被称为粒子-网格算法 (Particle-Mesh) 方法, 即通常所说的 PM 算法.

在宇宙学数值模拟中, 模拟区域一般采用均匀网格的立方体, 并引入周期性边界条件. 对于正交基的选择, 质量分配计算中的有限次操作要求基函数具有紧支撑. 常用的质量分配方案包括 NGP (Nearest-Grid-Point), CIC (Clouds-in-Cell), TSC (Triangular-Shaped-Cloud), 它们分别对应于一阶、二阶和三阶 B-spline 样条函数^[25]. 如果计算的网格格点总数为 N_g , 粒子数为 N , 则 PM 算法的计算量为 $O(N) + O(N_g \log N_g)$. 和 PP 算法相比, PM 的核心是引入均匀网格, 由此获得的好处是计算速度快, 并行效率高, 容易实现负载平衡; 但其代价是, 力的计算精度被限制在单个网格尺度上^[26]. 因此, PM 方法主要被应用于宇宙大尺度结构的研究, 以及和欧拉型计算流体算法相结合的混合型数值模拟中.

2.3 粒子-网格混合型方法

粒子方法本质上是拉格朗日型的算法, 力的计算精度可以根据实际需要调控. 将这种方法结合到 PM 算法中, 就可以弥补 PM 在这方面的不足. 按这种思路衍生了多种粒子-网格混合型算法. 它的基本思想是在波数空间把引力势拆成长程和短程部分, $\Phi_k = \Phi_k^{\text{long}} + \Phi_k^{\text{short}}$, 其中

$$\Phi_k^{\text{long}} = \Phi_k \exp(-k^2 r_s^2). \quad (13)$$

这里 r_s 为长程和短程分界的特征空间尺度. 对短程力部分, 可以在实空间通过 Poisson 方程解出

$$\Phi^{\text{short}}(\mathbf{x}) = -G \sum_i \frac{m_i}{r_i} \text{erfc}\left(\frac{r_i}{2r_s}\right). \quad (14)$$

其中 r_i 为粒子 i 相对 $\mathbf{x}$ 的距离. 这样长程力部分可以通过常规的 PM 方法求得, 而对短程力部分, 可以采取直接求和的 PP 方法或树方法计算. 前者即为所谓 P³M 方法, 它最早被提出并发展应用于等离子体物理问题的模拟^[27], 后被移植到宇宙学的应用上^[28,29]; 而后者被称为 TreePM 方法^[30,31]. 两种方法的实际运行差异主要体现在强成团区, 因 P³M 算法所需的求和次数仍非常可观, 而 TreePM 对成团性则并不敏感, 动力学范围跨度大, 由此可带来计算性能的显著提升.

和纯粒子方法相比, 混合方法可以显著改善程序的计算性能; 相对于网格方法, 混合方法可以显著地消除 PM 算法中小尺度上力的非各向同性 (取 r_s 略大于单个网格的大小), 同时原则上力的计算可以被很好控制以达到任意精度. 因此, 目前国际上流行的宇宙学数值模拟代码大多采用 TreePM 方法, 其中最著名的程式为获得最广泛应用的 GADGET^[32].

2.4 多重网格和运动网格方法

改善 PM 中引力计算精度的另一种解决方案是所谓多重网格方法, 该方法通过识别强成团区即高密度区域, 对网格进行局部加密, 并在细化的网格上应用网格方法求解. 对加密网格的处理有两种做法. 一种是局部网格加密的区域仍保持正立方体几何, 求解采用常规的网格方法, 只是引力势核采用具有孤立边界条件的 Green 函数, 这种方法最典型应用是在 20 世纪 90 年代较为流行的 AP³M, 该程序在标准 P³M 方法中引入了自适应网格, 以降低在强成团区 PP 的计算量^[33].

另一种做法是, 加密区域的几何根据密度判别条件可以是任意形状, Poisson 方程可以看成 Dirichlet 边界问题, 边界值由母网格上引力势的插值获得. 这类问题的求解通常采用可以处理复杂边界的所谓弛豫方法^[25,34], 即在 Poisson 方程中增加时间导数项, 变形成为有源扩散方程, 其弛豫平衡解即为 Poisson 方程的解. 实现这种方法的典型数值模拟程序为 ART^[35]. 此外, 还可以根据密度场的实际分布使计算网格变形, 以保证对高密度区进行更密集的取样, 以提高空间分辨率, 即所谓运动网格方法^[36-38]. 类似

的做法是在非结构网格上求解 Poisson 方程^[39]. 这些方法的主要困难是在不规则网格上不能很好地对引力的精度进行控制, 但它所具有的自适应性和高动态范围仍有相当的吸引力.

3 引入重子物理: 暗物质 - 气体混合型模拟

在宇宙演化不同时期及各种环境下, 如何引入重子气体的冷却、恒星形成过程、电离背景的形成和辐射转移, 超新星和活动星系核的反馈效应, 大尺度湍流的形成和发展等重子物理, 是了解宇宙结构的形成和演化的核心问题, 同时对精确测定暗物质和暗能量的性质也是至关重要的^[1,40,41].

宇宙学尺度上的多成分物质数值模拟的最大的挑战主要来自: (1) 巨大的时空跨度和动力学范围; (2) 暗物质 - 气体 - 恒星 - 辐射多相成分构成的复杂体系; (3) 激波和湍流, 各种流体不稳定性、引力分裂和坍缩、辐射转移、大范围磁场、多成分化学, 超新星爆发动力学反馈等复杂物理过程. 尽管超级计算硬件技术的惊人快速发展, 已使计算规模逐步走向 PETA/EXA 尺度, 但是仍然面临着宇宙学尺度的超大规模模拟在计算量、计算方法, 计算机资源 (内存、存储、I/O、通讯), 数据分析和可视化等各方面带来的巨大的挑战. 而在宇宙学模拟中, 一些特殊的过程使计算变得更为复杂, 一是亚网格尺度 (Sub-Grid Scale) 的物理过程, 如恒星形成和动力学反馈、小尺度湍流; 二是激波 - 湍流相互作用或共存的体系, 其计算格式的基本要求不仅能够捕捉非定常激波, 同时能分辨湍流惯性区的最小尺度, 因此其数值算法必须具备低耗散和低色散数值误差的特征. 前者的一种解决方案是加入亚网格分析模块, 如针对小尺度湍流采用大涡旋模拟 (LES) 中使用的亚网格分析模型 (SGS). 而对于后者, 这仍是计算流体力学未解决的问题. 一种可能的折衷解决方案是采用混合 (Hybrid) 计算格式, 即非激波区采用低耗散的差分格式, 而在存在间断的区域, 采用非线性重构 (TVD, PPM, WENO 等). 另外的解决方案包括采用自适应网格方法 (AMR) 和非结构运动网格方法, 但其仍遇到一些困难, 一是在自适应区域边界的守恒律是否能够保持, 二是在具

体计算中的负载平衡如何实现. 还有一个本质的问题是所谓芝诺困境, 即在自适应区域, 物理动力学时标随网格大小减小, 这时计算时间步长随之指数减小, 这就导致大物理尺度模拟的计算开销非常巨大, 在给定计算资源的情况下, 小尺度上的信息丢失是不可避免的.

3.1 欧拉方法

在膨胀宇宙中, 重子气体的控制方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k) = 0, \quad (15)$$

$$\frac{\partial(\rho u_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_i u_k + P \delta_{ik}) = -\frac{\dot{a}}{a} \rho u_i - \frac{1}{a} \rho \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}[(E + P)u_k] = -\frac{2\dot{a}}{a} E - \frac{1}{a} \rho u_k \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} - \Gamma_{\text{net}}. \quad (17)$$

其中 $E = \frac{P}{\gamma-1} + \frac{1}{2} \rho(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)$, Γ_{net} 是辐射冷却项.

欧拉方法主要基于有限差分或有限体积方法对上述方程组在欧拉网格上进行空间离散, 重子流场由网格点所处空间的物理量信息离散表示. 通过求解流通量导数 $\frac{\partial F}{\partial x_k}$, $F = (\rho u_k, \rho u_i u_k + P \delta_{ik}, (E + P)u_k)$, 再与暗物质粒子一起进行时间迭代推进流场变化. 在具体计算时, 通常利用任意一个网格点及其邻近网格点的物理量, 通过 Taylor 展开, 将微分转变为差分; 或者重构该网格点附近物理量的分布, 求解黎曼问题, 得到流通量的演化. 在暗物质质量的引力势阱作用下, 重子气体的流场结构非常复杂, 普遍包含以激波为代表的间断, 局部马赫数能达到数十, 甚至上百. 因此, 擅长激波捕捉的各种数值格式在欧拉方法的模拟中得到广泛应用. 比较典型的有总变差不增 (TVD) 格式, 基于 Godnov 方法的 MUSCL, PPM 格式, 以及高阶 WENO 格式.

一般的低阶有限差分格式在激波等间断附近的色散误差, 会造成非物理振荡. 对于离散函数 u_j , 总变差 $TV = \sum_j |u_{j+1} - u_j|$ 描述了函数的振荡程度. 总变差不增 (TVD) 格式, 即满足总变差不随时间迭代增长的差分格式, 可以实现对激波的有效捕捉. 自 1983 年 Harten 提出这一概念以来^[43], 出现很多种 TVD 数值差分方法. 而在宇宙学模拟中应用最广的仍是 Harten 1983 最初提出的二阶显性 TVD 格式, 如 Ryu^[44].

而基于 Godnov 方法的高阶格式, 其核心思想是利用精确黎曼解来捕捉流场中的激波与间断. 具体过程是, 首先利用特定的插值方法得到各网格内的物理量分布; 在每个间断处, 根据左右物理状态, 求解黎曼问题得到网格边界流量随时间演化; 依据流通量的平均值变化和离散化的控制方程得到下一时刻网格中心的物理量. MUSCL 与 PPM 格式采用的插值方法分别为一阶线性和二阶抛物线函数, 分别达到二阶与三阶计算精度^[45,46]. 应用广泛的 FLASH 和 ENZO 程式均采用 PPM 格式^[47,48].

WENO 格式利用多个相邻网格点组成数个差分模板 (Stencil), 在每个模板内对所需通量导数进行差分, 依据每个模板内的光滑程度设定各模板权重^[49]. 模板越光滑, 权重越高. 如某一模板中间存在间断, 该模板的权重将非常小. 对各模板内的通量差分进行加权平均, 作为最终的目标网格点处通量差分. 高阶 WENO 有限差分格式, 能实现对复杂流场, 特别是激波和涡等结构及其相互作用实现高精度的捕捉. 这些特点在宇宙学流体现式 WIGEON 的实际运行中有很好的展现^[50].

值得注意的是上述格式的基本方法及理论格式精度都是基于一维方程, 在推广至三维问题时一般采取各维分裂离散迭代. 在实现时, 有时需要在不同时间步上对网格坐标迭代顺序进行交替轮换以保证方法的稳定性和格式精度^[51].

欧拉方法的优点在于能够同时对平滑区域和间断区域进行高精度模拟, 同时具有捕捉强激波, 漩涡, 湍流等复杂流动特性的能力, 缺点是在网格数固定的情况下对高密度区域的分辨率不足. 更大规模的固定网格模拟, 对于计算资源的要求会因为 CFL 条件而非线性增长. 此外, 在极端高马赫数区域, 网格点上气体能量基本为动能贡献, 在数值计算压强, 温度时容易出现大数相减带来的误差, 引入数值不稳定, 导致负压强乃至负密度的出现. 克服方法主要有增加一组追踪内能或熵的控制方程^[44,50,52], 或者改进算法内核, 保证压强和密度的正定.

3.2 拉格朗日方法

拉格朗日方法, 主要是指平滑粒子流体力学方

法, 即 Smoothed Particle Hydrodynamical (SPH) 方法^[53,54]. SPH 方法使用相互作用的粒子来描述流体, 流场函数采用积分表示, 并借助核函数进行近似. 对于连续函数

$$A(\mathbf{r}) = \int A(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (18)$$

引入近似关系

$$\langle A(\mathbf{r}) \rangle = \int A(\mathbf{r}') W(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (19)$$

其中, 内核函数具有以下性质

$$\int W(x) dx = 1, \quad (20)$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(x, h) = \delta(x). \quad (21)$$

常见的内核函数形式有 Gaussian 函数, 样条函数. 将密度场为 $\rho(\mathbf{r})$ 的流体用一组 N 个质量元表示, 而积分近似表达式也可写成形式 $\int \frac{A(\mathbf{r}')}{\rho(\mathbf{r}')} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}', h) \rho(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$. 这样, 流场函数可以近似为

$$\langle A(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{j=1}^N m_j \frac{A_j}{\rho_j} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j, h), \quad (22)$$

对于密度场

$$\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{j=1}^N m_j W(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j, h). \quad (23)$$

因而可以通过 N 个平滑质量单元的质量来构造流场区域的密度场. 如果使用粒子表示质量元, 即成为所谓平滑粒子. 当内核函数可微时, 可以很方便地得到流场函数的微分形式, 以建立 SPH 方法中的流体控制方程.

SPH 方法的优点在于能够随密度分布自动调节分辨率, 从而实现对高密度区域的高分辨率解析; 而该方法的粒子属性也相对容易与暗物质的粒子模拟相结合, 便于追踪恒星和星系形成过程. 这些特点使得 SPH 方法成为目前应用最为广泛的宇宙学流体模拟方法, 知名的程式有 Hydra, GADGET, GASOLINE 等^[32,55,56]. SPH 的主要缺点来自于为了捕捉激波而引入的人工黏性以及低密度区域的分辨率不足. 在对比测试以及相关模拟中发现, SPH 方法中的人工黏性会在激波处带来显著弥散, 严重抑制流体不

稳定性乃至星系际介质及星系团内介质中湍流的发展^[57,58]. 由于这些缺陷, 对于 SPH 方法给出的小尺度上的结果需要谨慎对待. 针对这些缺点, 近年来有不少工作对 SPH 算法进行了相应改进. 如基于速度散度设定开关, 降低非激波区域的人工黏性; 改变平滑粒子之间相互作用力的模式 (rpSPH) 等^[59,60]. 这些改进方法在宇宙学模拟中的应用还有待进一步检验.

3.3 自适应网格和非结构网格方法

为了弥补固定网格方法在高密度区域分辨率不足的问题, 自适应网格技术 (Adaptive Mesh Refinement) 也在 20 世纪末被引进宇宙学流体模拟中. 网格优化的主要过程是, 首先设定网格优化判据, 依此对感兴趣的局部计算区域进行标记, 并增加网格密度. 常用的判据是物质密度及其梯度, 流场间断, 气体冷却时间等. 以密度梯度判据为例, 当某一网格上的密度相对于该网格所处网格层级平均密度超过某一阈值, 该网格即会被标记, 加密生成下一层级的子网格. 具体计算时, 需要根据上层网格和同层相邻网格确定特定网格边界条件, 将边界处物理量反馈给上层网格, 递归推进时间演化, 以保持所有网格的时间同步. 如果最初的根网格规模为 128^3 或 256^3 , 考虑到一般使用 5 层或 6 层网格加密, 在最底层网格处, 有效分辨率已可以达到 16384^3 以上.

使用广泛的 FLASH, ENZO 程式都采用了自适应网格技术, 模拟中所需的网格总数一般为 10 倍左右根网格数^[47,48]. 自适应网格技术能够以相对小的资源消耗增长为代价, 显著地提高局部区域的分辨率. 方法存在的问题之一是, 结果可能会受到加密判据的很大影响. 例如采用密度判据, 可能会忽视大尺度上的复杂速度结构, 抑制大尺度的流动不稳定性向加密区域的级联传递. 此时需要借助于亚网格模型, 修正可能的误差^[61].

为了更好地追踪各种复杂形态宇宙结构的形成, 非结构网格方法也成为宇宙学流体模拟的最新发展方向之一. 非结构网格方法利用诸如三角形或四面体等简单形状分别在二维、三维空间中构造网格单元, 镶嵌填充计算区域. 相对于结构网格, 非结构网

格节点位置, 单元大小、形状和网格疏密具有极大的灵活性, 因而能更方便地处理复杂外形, 提高计算精度 [62].

Springel 在 2010 年, 利用 Voronoi 多边形生成非结构动态网格, 在网格单元边界处基于 MUSCL 方法, 线性重构流场物理量在网格单元上的分布, 再通过黎曼问题精确解来求解流体欧拉方程组. 通过这种技术所发展的宇宙学流体模拟程式 AREPO, 可以对流体不稳定性、湍流等复杂流场结构进行有效地捕捉, 并展现出对宇宙结构和星系形成过程的高精度追踪 [63,64].

3.4 重子物理

重子物质进入暗物质晕引力势阱后, 历经辐射冷却和坍缩, 形成恒星, 星系, 星系团等可观测结构. 为了更精确地模拟星系形成过程并与观测对比, 需要引入相应的重子物理过程. 目前主要包括气体辐射冷却与加热, 恒星形成与反馈, 以及磁场效应, 辐射转移等. 事实上, 这些过程的细节所涉及的最小尺度通常比模拟分辨率低很多, 在现有的宇宙学模拟中, 这些物理过程的计算和模拟需要通过在特定假设前提下, 借助模型或经验公式进行.

重子气体的辐射冷却和加热, 通常是根据气体的密度, 温度, 金属丰度等量, 假定气体的电离平衡状态, 从已有的冷却曲线表插值得到. 目前大多采用光学薄以及电离平衡状态的假设, 使用 Sutherland 和 Dopita^[65] 在 1993 年提出的冷却曲线. 如果需要进一步考虑低于 10^4 K 以下的气体冷却, 那么需要更为精细的非电离平衡以及分子冷却模型 [66]. 另外, 一般还会考虑 UV 背景辐射场的影响以及气体加热作用 [67].

当重子气体冷却并坍缩到一定密度时, 需要引入恒星形成及其反馈效应. 由于分辨率不足, 现有的模拟中主要依靠亚网格尺度上的恒星形成模块, 其主要配方为: (1) 局部气体运动为汇聚流, 即速度散度为负 $\nabla \cdot \mathbf{v} < 0$; (2) 气体密度大于某个设定的阈值, 同时满足 Jeans 引力不稳定条件; (3) 冷却时标小于动力学时标. 当以上条件均满足时, 可以认为该网格处的气体, 或者 SPH 模拟中的气体粒子会发生恒星形成 [68]. 这时可将部分气体按恒星形成率转化为一定

数目的恒星粒子. 随后, 所产生的恒星和暗物质粒子一样, 按无碰撞粒子的演化方式处理. 在不同的程式中, 对恒星形成速率的处理存在差异. 使用较多的是 Schmidt 定律, 即恒星形成率正比于气体密度的 $3/2$ 次方, $d\rho_*/dt \propto \rho^{3/2}$; 而有的程式中, 使用与恒星形成时标对应的线性速率. 恒星形成过程中涉及的模型和自由参数较多, 往往需要根据与真实观测对比来调整模拟中选择的模型和参数.

通常假定恒星粒子成分符合一定的初始质量函数分布, 在随后的演化中根据需要会考虑大质量恒星星风, 以及超新星爆发对恒星周围气体的反馈作用 [69]. 现有理论及模拟研究表明, 这类反馈作用, 对于星系形成过程非常关键. 例如调节恒星形成历史, 可以防止过多矮星系的形成, 以及向星系际物质输运金属等. 恒星演化时标一般要小于模拟时间步长, 因此反馈作用的引入与恒星形成须同步进行. 具体做法是, 依据假定的初始质量函数分布, 得到大质量恒星以及超新星所占恒星粒子的质量比例, 向周围气体注入相对应的能量和金属. 因为恒星形成区域密度很高, 冷却率正比于密度平方, 直接往周围气体加入热能会被很快冷却损失, 替代方案是同时考虑动能注入以及辐射压反馈 [70,71].

以上描述的三种物理过程是目前模拟中普遍考虑的重子作用. 另外根据具体问题, 有的模拟工作还会引入更多复杂的过程. 例如星系际磁场的起源及其对宇宙线粒子的作用也是近年来关注的热点之一, 直接模拟工作主要通过求解磁流体力学方程随时间的演化, 方法与求解欧拉方程基本一致. 此外, 辐射转移, 热传导, 重子气体的物理黏性等因素都在逐步进入宇宙学数值模拟中.

需要指出得是, 上述重子物理过程的引入, 非常依赖于接近分辨率尺度上对重子气体的密度, 温度, 流场的模拟精度. 如果在相关尺度上得到的重子气体分布, 动力学性质存在明显偏差, 加入上述重子物理过程, 其结果并不能反应真实物理过程, 甚至存在不同程度的误导性.

4 超大规模数值模拟的宇宙学应用

最早 N 体数值模拟可以追溯到 1975 年

Peebles^[72] 利用 300 个粒子对星系团的模拟, 以及宇宙学意义上的 1500 个粒子的模拟^[73]. 随后的 40 余年, 伴随计算机技术的日益进步, 宇宙学数值模拟更获得了突飞猛进的发展. 迄今为止, N 体数值模拟已接近 Peta 量级, 它对我们追踪宇宙大尺度结构的形成和演化, 从矮星系到星系团的各级尺度上研究暗晕的结构、质量函数、吸积和并合历史、空间成团性以及和环境的相关性等提供了一个强有力的工具. 图 1 通过模拟粒子数-年代关系粗略给出了 N 体数值模拟的发展历程; 图 2 为中国计算宇宙学联盟完成的盘古模拟的可视化图像, 它绘制了红移 $z=0$ 时暗物质的分布以及不断放大的质量为 $3.0 \times 10^{15} M_{\odot}$.

的星系团.

在面向下一代巡天的暗物质和暗能量探测研究中, N 体数值模拟扮演了关键性的角色, 其重要性主要包括以下方面: (1) 有助于我们探讨在不同暗能量模型下的结构形成过程, 并发展新的分析手段以区分和排除不同的暗能量模型; (2) 由于成团过程的高度非线性, 数值模拟是评估这类大型试验中各种统计误差和系统偏差如何影响宇宙学信息提取的最可靠方法; (3) 数值模拟可以被用于仿真实际观测过程 (输入背景源发射光子、大气扰动、望远镜的光学结构、CCD 成像过程、模拟观测数据的预处理) 并构造包含众多星系物理特性 (星系的形状、光度、颜色、

图 1 最大模拟粒子数-年代关系

最大模拟粒子数随年代的变化. N 体数值模拟的发展大致分为三个阶段. 早期的引力计算以直接求和为主, 中期以 P^3M 为主, 自 21 世纪以来, 分布式内存上并行化的 TreePM 成为纯 N 体模拟中引力算法的主流, 而在混合型模拟中, 大多将自适应网格技术应用于 PM. 图中的实线为修正的 Moore 定律, 它给出了每隔 15.8 个月, 模拟粒子数增加一倍的趋势, 略快于传统 Moore 定律的 18 个月.

Figure 1 The size of N -body simulation as a function of running date. The development can be roughly divided into three phases. In the early phase, the computation of gravity was mainly done using the direct summation, it was oriented to P^3M in the middle phase. Since the 21st century, the parallelized TreePM on the distributed memory machines has become the mainstream of algorithms for the gravity solver in pure CDM simulations. The solid line shows that the size of simulations doubles every 15.8 months, which grows faster than typical 18 months in the Moores empirical law.

图2 盘古模拟

在联想深腾 7000 超级计算机 (中国科学院网络信息中心超级计算中心) 上完成的 Λ CDM 模型的模拟. 模拟采用边长为 $1000 \text{ h}^{-1}\text{Mpc}$ 的立方体盒子, 粒子数为 3072^3 , 单个粒子的质量为 $2.49 \times 10^9 \text{ M}_{\odot}$, 引力软化因子取 $7 \text{ h}^{-1}\text{kpc}$

Figure 2 Visualization of the Pangu simulation in the Λ CDM universe done by Computational Cosmology Consortium of China (C4). The simulation was evolved in a periodic cubic box of side length of $1000 \text{ h}^{-1}\text{Mpc}$ using 3072^3 particles, each with a mass of $2.49 \times 10^9 \text{ M}_{\odot}$. The force resolution was taken to be $7 \text{ h}^{-1} \text{ kpc}$. It was performed on the DeepComp 7000 in the supercomputer center of Chinese Academy of Science.

成团性、内禀指向) 的模拟样本, 是针对科学问题进行巡天战略设计的必要手段. 由于下一代巡天覆盖大的空间视角和红移深度, 期望中的暗物质模拟尺度需要跟观测尺度相当以保证大尺度统计特征的可比性, 还要同时能准确描述小质量天体的性质, 它对计算的挑战将是前所未有的.

高精度暗物质 - 流体混合型数值模拟的主要目标和作用有: 在宇宙学尺度上, 确定发光物质和暗物质质量之间的偏袒机制, 量化重子物理过程如何改变物质的扰动功率谱以及对下一代巡天中的宇宙学参数测量的影响; 在星系团尺度上, 建立一个可靠的基于 X 射线和 Sunyaev-Zeldovich 效应观测的暗晕质量测量和校准方法; 而在星系尺度上, 我们需要了解各种重子过程如何影响暗物质的结构, 以及在暗晕形成及并合过程中, 重子气体如何注入并形成我们今天观测到各种形态的星系.

4.1 暗物质探测

暗物质存在的推断主要来自于涉及引力效应的天文学观测, 如星系的旋转曲线、弥散速度、星系团的 X 射线辐射、引力透镜效应等, 这些观测同时也为我们探索暗物质的空间分布提供了重要的探针. 从基本粒子物理角度, 人们更多关心暗物质粒子的

内禀性质, 并尝试采用直接手段探测其存在, 其中包括加速器上的高能碰撞过程或者暗物质粒子和探测器的相互作用. 目前, 普遍相信暗物质的候选者是一种中性稳定的弱相互作用重粒子, 它可以通过碰撞湮灭产生高能伽马光子、中微子、正反电子、正反质子等. 采用高能天文观测设备如 Fermi LAT 或切伦科夫望远镜探测伽马射线湮灭信号提供了暗物质探测的一种新途径.

暗物质高能伽马射线的湮灭辐射强度正比于其密度的平方, 从理论上可以推测出, 离我们最近的银河系中心可能是最强的湮灭辐射源. 但进一步的分析表明, 银河系中心存在的复杂天体物理过程会造成湮灭信号具有很大的不确定性, 至今尚不能确认来自银河系中心的盈余延展辐射是否来自于暗物质的湮灭. 另一方面, 由于暗物质的空间分布在很大范围内存在不均匀性, 如何将信号搜寻对象扩充到更广泛的天体物理场合成为宇宙学家所关注的课题.

2008 年, Springel 等人^[94] 利用高精度的银河系尺度暗晕的水瓶座模拟, 预测了当前正在太空运转的 Fermi-LAT 天文望远镜对暗物质湮灭信号的探测能力. 其研究表明银河系卫星星系的暗物质湮灭信号以及信噪比不足于让 Fermi-LAT 设备探测到暗物质湮灭信号; 同时也指出, 子结构中信噪比最高的候选体可能是无恒星的一些子暗晕, 并且湮灭辐射的

总光度轮廓形状并不会随暗晕的质量下限改变而发生变化. 进一步地考察来自于 Gao 等人^[95]2011 年完成的一组世界领先的星系团尺度暗晕模拟 - 凤凰模拟计划. 他们比较研究了近邻几类天体的暗物质湮灭信号的可探测性. 结果表明, 相对于银河系卫星星系以及子结构晕, 我们近邻的星系团无论是亮度还是信噪比都要强 10 倍以上. 所以天文学家应该把探测暗物质湮灭信号的最佳目标应定位于近邻星系团.

尽管如此, 冷暗物质的成团质量下限可达 $10^{-6} M_{\odot}$, 而即使是近年来最高精度的水瓶座模拟, 其质量分辨率也仅为 $10^3 M_{\odot}$, 之间相差近 10 个量级. 结合对水瓶座模拟和凤凰模拟的分析, Gao 等人推测暗物质湮灭辐射的主要贡献并非来自暗晕中心的致密区域, 而是来自缓慢变化的子晕的总辐射, 子晕的存在可以使暗晕的总辐射强度提高约 1000 倍. 但是这种分析依赖于对湮灭强度 - 暗晕质量下限关系的外推, 而这种外推是否可行需要更高质量和空间分辨率的数值模拟来检验, 它将决定利用天体物理方法进行暗物质探测的可行性这一悬而未决问题的最终答案.

4.2 暗能量探测

星系的光谱和图像巡天是探索暗能量性质的最有效方法, 基本探针包括重子声波振荡、星系红移畸变、星系团计数和弱引力透镜效应. 目前计划中的巡天包括 DES, DES, BOSS, BigBOSS, LSST, JPAS, Euclid 及中国的南极光学红外巡天望远镜 KDUST.

4.2.1 重子声波振荡

宇宙演化早期, 物质处于高温电离状态, 光子和电子通过 Thomson 散射紧密耦合, 电子 - 重子通过库伦碰撞以及复合 - 电离过程耦合, 在暗物质引力扰动势阱中形成声波振荡. 随着温度降低, 复合过程发生, 重子和光子脱耦, 压力以及声速迅速降低, 声波振荡被冻结在重子流体中, 并通过物质扰动的增长产生一种特殊的空间分布模式, 这就是重子声波振荡^[96](BAO). 它的特征尺度为脱耦时的声速视界, 其共动尺度不随时间变化, 可以作为一把新的宇宙

量天尺, 用来测量宇宙的大小和膨胀速度^[97-99], 它是目前可以获得的系统误差最小的暗能量探针. 在 2005 年, 最早由两个研究组分别在 2dFGRS 和 SDSS 巡天中探测到这种信号^[100,101]. 在 BAO 测量的相关研究中, 纯暗物质数值模拟发挥着重要的作用. 大尺度的数值模拟已揭示出非线性阶段的结构形成和星系本动速度会对重子声波振荡形态造成显著的畸变^[88,102-104], 同时也使我们能够对相关效应产生的系统误差精确量化^[105-107]. 可以预计, 未来的更大尺度和更高分辨率的数值模拟, 不仅可以有助于我们深入理解星系形成过程对 BAO 的影响, 而且能够对各种大型 BAO 实验的可靠性进行定量的评估.

4.2.2 星系红移畸变

星系红移畸变是由本动速度造成的星系成团性的各向异性. 星系红移畸变包含着宇宙距离和本动速度的信息, 可以用于精确测量宇宙结构增长速度, 重建宇宙密度场和速度场的关系^[108]. 结合重子声波振荡, 该测量不仅可以检验引力定律, 在宇宙学尺度上检验广义相对论, 而且可用于区分各种暗能量和修改引力模型^[109-112]. 但是, 如何从中精确地提取宇宙学信息并不容易. 和 BAO 类似, 数值模拟显示小尺度上的非线性成团效应将不可忽略^[113,114], 暗晕内的星系运动将降低视线方向的成团强度. 为提高测量精度, 需要增加波数空间扰动模式的数目, 以有效利用小尺度上的成团信息. 借助于数值模拟技术, 已经发展出可以很好修正系统误差, 包含小尺度成团信息的红移畸变效应的精确估计量^[115,116]. 未来的 BigBOSS 有望在前所未有的红移范围 (红移 0-3), 将结构增长速度的测量推进到前所未有的精度 (约 1%).

4.2.3 弱引力透镜

当遥远星系发出的光穿过前景大尺度非均匀物质时, 由于时空弯曲造成光线偏折, 进而产生星系形状的扭曲, 即所谓剪切形变. 这种形状改变被称为弱引力透镜效应, 它所产生的切变大小与沿视线方向对暗物质扰动功率的积分有关, 因此也与观测者和星系之间的角距离, 以及前景大尺度物质的分布直接相关. 弱引力透镜是公认的强宇宙学探针, 有着广泛的重要应用. 它可以直接测量宇宙的时空扰动,

在广义相对论框架下, 这就相当于直接测量宇宙的物质分布, 从而也是暗物质的绝佳示踪器. 通过分析弱引力透镜对源星系红移的依赖关系, 能够重构出宇宙结构的三维分布, 测量宇宙结构增长速度, 从而限制暗能量和引力的性质^[117]. 弱引力透镜的测量受到多种系统误差的影响, 其中影响最大的是潮汐场引起的星系的内禀指向^[118], 以及大气扰动引起的点扩散函数的椭率变形^[119]. 此外, 在弱引力透镜的理论计算上, 也存在两个基本困难, 一是中等或强成团区的非线性效应, 它是弱引力透镜效应的主要来源, 它增加了模型预言上的难度; 再就是小尺度重子物理的影响^[120], 其复杂性在一定程度上影响了我们对小尺度物质分布的估计. 新一代弱引力透镜巡天对测量、数据处理和统计以及理论计算提出了苛刻的要求, 对各种可能的系统误差以及小尺度物理引起的改正, 高精度数值模拟结合光线追踪技术提供了一种有效的仿真手段, 它所扮演的角色是无可替代的.

4.2.4 星系团丰度

星系团是宇宙中尺度和质量最大的维里化系统. 根据暗物质主导的等级成团模型, 在一定质量范围内的星系团计数, 即质量函数, 取决于相应尺度上的物质密度扰动场的分布形式, 同时其时间演化由密度场的线性扰动增长因子所决定. 因此, 星系团质量函数可以用于测定宇宙学参数、消除其他宇宙学测量的参数简并, 检验宇宙大尺度结构形成模型^[121–124]. 此外, 质量函数的高质量端对原初扰动的非高斯性和早期暗能量的性质较为敏感, 可以作为其指示器^[125–128]. 精确测量质量函数的关键是如何估计星系团的维里质量, 目前主要依靠星系团内气体的X射线辐射和引力透镜方法. 对于前者, 它敏感依赖于星系团中X射线气体的辐射、化学和热力学状态及其空间分布, 而其可能的不确定性主要来自于星系团内部的重子物理过程, 如核心区的AGN反馈, 并合过程产生的遗迹, 大尺度湍流的动力学效应等^[129–131]. 对这些过程的理解同样需要引入流体力学模拟实验, 并以此为基础建立简化的分析模型. 此外, 质量函数测量中的另一个重要环节是团搜寻技术, 纯暗物质模拟有助于获得对投影效应, 星系团质量中心偏置、星系团质量-丰度关系等的精确量化

描述^[132–134].

4.3 星系的形成和演化

4.3.1 第一代天体的形成及其反馈效应

普遍接受的宇宙结构生成的理论框架是以暗物质为主导的, 基于引力不稳定性的等级成团模型. 在冷暗物质模型中, 宇宙结构由下至上发展, 大的暗物质晕通过较小暗物质晕的吸积和并合逐渐形成, 而重子气体则在暗物质晕的引力势阱中沉积、凝聚、冷却并坍缩形成发光天体. 宇宙中第一代发光天体的形成大约发生在红移 $z \sim 15 - 30$ 之间. 物理上, 它的诞生完全取决于一组简单的初始条件, 原则上可以通过数值实验精确地追踪. 之后的天体形成过程将受到来自于第一代天体的反馈效应(如电离辐射和加热产生的辐射反馈, 金属丰度增加造成的化学反馈, 可以产生动力学效应的星际磁场, 超新星爆发的动力学反馈)的影响, 复杂程度大大增加. 因此, 第一代重子天体的形成标志着宇宙演化由简单性转入复杂多样的物理状态, 这同时意味着重子的介入及其反馈过程的研究将对我们了解星系形成起到关键性的作用^[135].

第一代恒星形成过程的基本物理图像是, 宇宙中密度扰动首先在暗物质中得到充分发展, 形成暗物质晕. 当气体落入暗物质晕的引力势阱时, 其引力能释放并部分转化为气体的内能. 此时气体的状态尚不足以满足Jeans不稳定条件而产生引力坍缩, 还需要通过辐射冷却降低其温度和压强, 并进一步收缩凝聚. 从复合时期直到第一代天体的形成, 宇宙的化学状态相对简单, 主要物质成分主要包括氢和氦原子. 可以产生有效辐射冷却的机制包括Lyman α 辐射, 它所对应的气体温度大约在 10^4 K, 对应质量为 $10^8 M_{\odot}$. 暗晕的维里温度. 当温度低于 10^4 K时, 氢原子的冷却效率大大降低, 最有效的冷却方式为氢分子的转动或振动能级之间的跃迁辐射, 而氢分子的形成则需通过宇宙中残余自由电子的催化作用而进行. 随着第一代恒星的形成和紫外辐射的离解作用, 通过氢分子形成恒星的通道很快被阻断. 对氢分子冷却主导的恒星形成, 维里温度低于 10^3 K, 所对应的暗晕质量 $\sim 10^6 M_{\odot}$. 在红移20–30时, 它对应于

高斯分布的宇宙密度场中 $3-4\sigma$ 的密度扰动峰. 如果气体冷却时标小于引力坍缩时标, Jeans 质量降低导致坍缩在更小尺度上发生. 其结果是, 坍缩气体分裂成若干团块, 并最终发展成为原初恒星. 由于恒星形成涉及复杂的引力、气体动力学、化学以及辐射转移等多种物理过程, 数值模拟无疑为理解第一代恒星的形成过程提供了一个理想的数值实验. 考虑到涉及的动力学范围巨大 (10 个量级以上), 目前采用的主要数值算法包括光滑粒子动力学 [136–140] 或自适应欧拉网格方法 [141–145].

当第一代恒星形成后, 它所产生的反馈效应将作用于周围环境, 并直接影响后续大范围的恒星以及原星系的形成过程. 例如, 来自第一代天体的第一束光结束了宇宙自脱耦之后的漫长黑暗年代, 同时也是导致宇宙再电离的重要因素. 电离辐射场不仅会导致中性氢数目的降低并压制气体的冷却, 同时还会使暴露在电离辐射场中的小暗晕中的气体被蒸发, 其联合效应阻止了低质量天体的进一步形成. 再者, 恒星形成总是伴随着剧烈的超新星爆炸中的恒星死亡. 大范围的重复超新星爆炸驱动的物质外流导致暗晕及其周边环境中的重子气体被激波加热、蒸发或剥离. 但在另一方面, 第一代恒星核燃烧合成的金属在超新星爆发中被抛射出去, 造成了环境的金属富化. 散布在重子气体中的金属大大提高了气体的辐射冷却效率, 从而导致了恒星形成模式的转化, 形成持续密集的星暴过程, 形成了第一代星系 [146,147].

尽管近年来第一代天体的数值模拟研究已取得长足发展, 但由于问题涉及的特征空间尺度和质量范围巨大, 而引力坍缩的高度非线性, 导致小尺度上的流体动力学过程极其敏感地依赖大尺度上的物理, 目前仍有很多涉及气体过程的基本问题尚未得到解决, 如: (1) 原星系是何时形成的, 它的质量有多大, 几何形状如何? 原星系的增长模式? (2) 原星系的分裂过程是如何发生的? 它涉及何种流体不稳定性, 或者超声速湍流? 分裂团块的形状、大小和角动量? 分裂过程是等级式的吗, 如何终结? (3) 原恒星的吸积过程和反馈作用的影响? 第一代恒星的初始质量谱? 它由何种物理过程所主导? 等等 [148,149]. 此外, 如果引入辐射转移过程将使问题变得更为复杂, 其数值算

法本身就具有挑战性.

4.3.2 星系尺度上的冷气体注入和恒星形成

在星系形成和演化理论中, 星系中气体的注入是理解星系中恒星, 星系盘与中心核球等结构的核心物理过程. 传统的标准模型认为所有吸积进入暗物质晕的气体, 在其下落过程中先被向外膨胀的激波加热到维里温度, 之后再通过辐射冷却落到星系盘上, 这也被称为热吸积模型 [150,151].

观测上, 越来越多的证据表明, 高红移大质量星系有剧烈的恒星形成活动, 而随着红移降低, 这类有剧烈恒星活动的星系, 其特征质量也逐步降低. 和自下而上的暗物质晕的等级成团方式相反, 这种重子物质主导的自上而下的星系演化模式也被称为降序 (Downsizing) 模式 [152]. 另一方面, 利用斯隆数字巡天对近邻星系的分析也揭示出降序演化的特征, 如大质量星系的典型形成时间要早于小质量星系 [153]、高密度环境下的星系形成时间早于低密度的形成时间 [154], 颜色 - 星等图中蓝 - 红序列的颜色双峰性 (Bimodality) [155,156], 核球 - 盘之比从蓝序的盘主导到红序的核球主导的过渡 [155,157]. 而基于紫外对远红外的深场巡天得到的恒星形成历史也给出了相同的结论 [158]. 一个显著的特征是, 在红移 $z \sim 2$ 时, 大质量星系的恒星形成最为显著, 而在其随后的演化中恒星形成率迅速降低. 因此, 理论上我们需要回答的问题是, 在高红移形成恒星的冷气体是通过何种方式在暗物质晕中吸积和沉降的, 在低红移时什么样的物理过程会对冷气体的吸积产生抑制作用, 紫外背景以及超新星、AGN 的反馈作用如何影响气体的冷却过程等.

星系形成的标准热吸积模型在解释星系的演化特征遇到了本质上的困难. 而近年来数值模拟和分析模型指出, 更为合理的气体来源是通过宇宙网络 (Cosmic Web) 中纤维结构的冷气体流获得. 对暗晕中维里激波 (Virial Shock) 的流体稳定性的分析表明 [159], 存在一个临界暗晕质量 M_{shock} , 当暗晕的质量 $M < M_{\text{shock}}$, 冷气体流在暗晕内不能形成稳定的激波, 而直接落入星系盘上, 这种冷气体吸积模式提供了星系盘上恒星形成的最有效方式 [159–163]. 采用 SPH 和基于自适应网格的宇宙学流体动力学的数

值模拟发现, 这种预言的冷流吸积模式是非常普遍的 [161,164,165]. 在高红移处, 由于致密的纤维状气体流的存在, 气体晕中存在着密度落差高对比的区域, 高密度以及快速的辐射冷却使得激波不易形成和传播 [159]. 这种致密的纤维状气体流连接了中心星系的外围和下落的重子物质. 而在低红移的时候情况发生了变化, 虽然气体流中最致密的部分在维里半径内还存在, 但是在暗晕的更内部, 这些气体已经被激波加热到维里温度, 最终的结果是冷吸积和热吸积共同存在以供应星系的气体盘 [161,166–168]. 冷流模型对观测得到的星系分布的双峰性 (Bimodality) 和过渡特征提供了一个更为自然的解释 [169].

4.3.3 高红移盘星系的形成

目前, 单个星系形成的流行理论图像是首先通过吸积形成盘星系, 然后通过星系并和形成球状恒星系统 [170–174]. 星系盘被认为是一个宁静的恒星形成场所, 而通过并和才会有大规模的星暴并最终停止恒星形成, 成为球状的并和遗迹 [175]. 虽然并合确实发生, 但最近的高红移观测和相应的理论表明, 并合并非是导致星系形成和恒星形成的主要方式. 观测显示出高红移星系盘尽管在其不规则形态上和低红移星系盘类似, 但在其物理性质上有显著的差异. 对高红移星系盘, 它的运动学特征意味着一个延展的、团块状的厚转动气体盘, 而光学观测得到的速度弥散 σ 大约在 $20\text{--}80\text{ km s}^{-1}$, 转动/弥散速度比 $v/\sigma \sim 1\text{--}7$, $10\%\text{--}40\%$ 的 UV 辐射来自于 kpc 尺度的巨团块, 恒星形成率估计为几十 $\text{M}_{\odot}\text{yr}^{-1}$, 气体比重平均高达 $40\%\text{--}60\%$. 而对低红移星系盘, 恒星形成率 $< 10\text{ M}_{\odot}\text{yr}^{-1}$, 速度弥散 $\sigma \sim 10\text{ km s}^{-1}$, 气体比重只有 10% 左右. 在另一方面, 数值模拟研究表明, 星系并并不能产生我们所期待的转动盘的型态和运动学性质. 即使在很特殊的条件下, 湿并合的结果可以留下一个气体盘, 但它被包含在质量非常大的球状恒星系统中 [176–180]. 高红移处并合诱发的恒星活动的典型例子是亚毫米波星系 (SMGs), 但其密度显著低于恒星形成星系 (SFGs) [181]. 理论上需要回答的是剧烈恒星活动是如何在高红移 $z \sim 2$ 的星系盘上发生的.

一种可能的图像是, 高红移盘星系的形成因素由冷气体吸积, 盘结构的剧烈不稳定以及核球的形

成和生长共同主导 [182–184]. 关于孤立湍流厚气体盘的动力学演化, 包括盘不稳定性导致的团块分裂、团块向中心核球的转移, 已有系列数值模拟工作 [180,185–189]. 结果显示其演化时标大约在若干动力学时标, 即几百 Myr 的量级上. 目前的高红移星系显示其团块结构大约持续了 3 Gyr, 维持这种结构长时标存在的可能途径就是通过冷气体的长期平滑注入, 即维持气体盘高密度状态产生的不稳定性. 新的团块不断分裂成为恒星形成的场所, 而老团块向中心区域迁移并促使中心核球的增长. 另一方面, 如果吸积以团块形式为主导, 它在湍流气体盘搅合产生高的速度弥散, 并使盘稳定下来. 在这种情形下, 恒星形成和核球就会在第一个 Gyr 完成, 之后的恒星形成将会被抑制. 该模型对理解高红移星系的形成提供一个可能的途径.

尽管如此, 迄今为止关于厚气体盘 – 团块 – 核球 – 冷流吸积的高红移星系的细致模拟工作仍面临很大的困难. 主要原因是该系统涉及的众多物理过程仍有相当的不确定性. 如盘分裂产生的巨团块能否被超新星反馈所破坏, 动力学摩擦的影响, 在向中心迁移过程中的剥离, 和中心核球的并合过程, 核球中心黑洞的增长及其反馈效应, 气体盘大尺度湍流和高超声速吸积流的相互作用等. 更为重要的是, 该问题的长期模拟需要很大的动态范围. 对孤立盘的模拟由于缺少大尺度的气体供给, 限制了对向中心核球迁移和并合等过程的跟踪; 而宇宙学尺度上的模拟 [16,167,190–192] 缺乏足够的分辨率, 无法给出盘的分裂图像. 当引入自适应网格技术后, 相关模拟工作已获得关键性的进展, 对核心物理的了解也更为深入 [193,194].

5 未来的展望

围绕 21 世纪物理学两个最大的疑难 – 暗物质和暗能量, 从地下实验到空间探测, 从对撞机的高能碰撞到大规模的天文巡天观测, 多种探测和实验手段为寻求最终答案提供了众多可能途径. 在天文研究领域, 大规模高精度的数值模拟可以为大型观测计划的实施提供可能的最优化设计. 随着超级计算资源和性能的快速提升和广泛普及, 过去难以实现的对复

杂物理过程的仿真模拟今天已变得相对容易. 在未来十年的计算宇宙学的发展中, 更有望实现 Peta/Exa 尺度的超大规模模拟, 以满足暗能量巡天的科学需求. 即达到与 10000 平方度巡天面积相当的模拟体积, 同时实现与低质量端的星系相对应的质量分辨率, 并以此对非线性成团过程进行精确的数值跟踪, 获得宇宙学参数的精确测量以及误差的协方差矩阵. 此外, 在大尺度上, 将无耗散的暗物质模拟拓展到不同暗能量模型以及另类引力定律主导的宇宙也受到较多的关注, 人们的研究兴趣是结合大尺度的巡天观测, 精确检验可能的暗能量模型和引力理论. 在暗物质探测方面, 由于所需求的质量动态范围需要提升 10–15 个量级, 按 Moore 定律预测, 短期内的计算能力仍远远不够, 需要引入放大 (Zoom-in) 技术逐级获得高精度的数值模拟样本. 在对低质量矮星系以及暗晕子结构的相关研究上, 为避免两体碰撞弛豫以确保模拟的可靠性, 从第一原理的角度, 相空间的数值模拟是必须的. 然而, 这类模拟对计算资源的需求也非常可观^[195], 需要引入新的计算技巧以避免直接的积分^[196].

至于包括重子物质的混合型宇宙学数值模拟, 对重子所参与的物理过程的细致描述将是关注的焦点. 我们需要了解的核心科学包括重子物理如何影响暗物质的分布以及扰动功率谱, 星系和暗物质的偏袒分布的物理起源, 如何校准依据星系团的 X 射线辐射和 Sunyaev-Zeldovich 效应的质量估计, 星系尺度上恒星形成过程, 盘星系的形成和演化, 等等; 而其中需要考虑的各种可能因素包括辐射冷却、恒星形成和反馈、AGN 反馈、气体外流、磁场和各向异性热

传导, 大尺度激波和湍流的作用、宇宙线等. 在计算流体方法上, 由于现有 SPH 技术缺乏对激波、湍流等复杂流场的处理能力, 自适应网格和运动网格技术在星系尺度的流体过程研究有望发挥更大的作用. 值得一提的是, 适应于大动态范围的物理正定保持的, 低耗散低色散的高阶格式 (如正定保持的 WENO) 也将获得更广泛的宇宙学应用^[197,198].

精确宇宙学时代的数值模拟对高性能计算硬软件技术提出了挑战性的应用需求. Peta/Exa 尺度的模拟规模不仅要求十万核以上的超级计算机, 同时为适应密集型的计算需求, 异构计算部件已在现代超级计算机中被大量采用. 体系架构的改变, 以及长时间稳定的模拟运算对软件设计提出更高的要求, 它包括高度的负载均衡和并行化、可扩展性、容错性、异构计算等. 为提高软件的易用性, 框架软件技术已被计算宇宙学广泛应用. 当前知名的框架软件主要包括: 美国 LLNL 研制的结构自适应网格应用框架 SAMRAI, 美国 UIUC 开发的高性能计算框架 Charm++ 以及在此基础上形成的 N-BODY 模拟软件 CHaNGa, 美国 NASA 的 PARAMESH, 美国 LLNL 的 Overture 等. 有理由相信, 面向 PETA/EXA 尺度计算宇宙学中的技术瓶颈将随着现代信息技术的日益更新而逐步得到克服.

可以预计, 在未来十年, 伴随大规模巡天观测投入实际运行, 高性能计算机软硬件技术的高速发展, 计算宇宙学仍是充满挑战和激动人心的领域, 并将在回答暗物质、暗能量、暗宇宙中的结构形成等重大科学问题上发挥重要的作用.

致谢 感谢高亮、康熙、林伟鹏、王龙、李国亮研究员的有益讨论, 以及单桂华、谢茂金博士为本文绘制的盘古模拟演示图.

参考文献

- 1 Dolag K, Borgani S, Schindler S, et al. Simulation techniques for cosmological simulations. *Space Sci Rev*, 2008, 134: 229–268
- 2 Larson R B. A model for the formation of a spherical galaxy. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1969, 145: 405–422
- 3 Press W H, Schechter P L. Formation of galaxies and clusters of galaxies by self-similar gravitational condensation. *Astrophys J*, 1974, 187: 425–438
- 4 Ishiyama T, Nitadori K, Makino J. 4.45 Pflops Astrophysical *N*-body simulation on K computer—The gravitational trillion-body problem. In: the SC '12 Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 2012. New York: ACM, 2012.

- 5 Navarro J F, Frenk C S, White S D M. A universal density profile from hierarchical clustering. *Astrophys J*, 1997, 490: 493–508
- 6 Bertschinger E. Simulations of structure formation in the universe. *Ann Rev Astron Astrophys*, 1998, 36: 599–654
- 7 Moore B, Ghigna S, Governato F, et al. Dark matter substructure within galactic halos. *Astrophys J*, 1999, 524: L19–L22
- 8 Klypin A, Kravtsov A V, Valenzuela O, et al. Where are the missing galactic satellites? *Astrophys J*, 1999, 522: 82–92
- 9 Jenkins, Frenk C S, White S D M, et al. The mass function of dark matter haloes. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2001, 321: 372–384
- 10 Jing Y P, Y. Triaxial modeling of halo density profiles with high-resolution N -body simulations. *Astrophys J*, 2002, 574: 538–553
- 11 Gao L, White S D M, Jenkins A, et al. The subhalo populations of Λ CDM dark haloes. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2004, 355, 819–834
- 12 Springel V, Frenk C S, White S D M. The large-scale structure of the universe. *Nature*, 2006, 440: 1137–1144
- 13 Kuhlen M, Vogelsberger M, Angulo R. Numerical simulations of the dark universe: State of the art and the next decade. *Phys Dark Univ*, 2012, 1: 50–93
- 14 Peebles P J E. *The Large-Scale Structure of the Universe*. Princeton: Princeton University Press, 1980
- 15 Makino J, Hut P. Performance analysis of direct N -body calculations. *Astrophys J Suppl Ser*, 1988, 68: 833–856
- 16 Ito T, Makino J, Fukushima T, et al. A special-purpose computer for N -body simulations: GRAPE-2A. *Pub Astron Soc Japan*, 1993, 45: 339–347
- 17 Fukushima T, Makino J. On the origin of cusps in dark matter halos. *Astrophys J Lett*, 1997, 477: L9–L12
- 18 Steinmetz M. GRAPESPH: Cosmological smoothed particle hydrodynamics simulations with the special-purpose hardware GRAPE. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1996, 278: 1005–1017
- 19 Makino J, Fukushima T, Koga M, et al. GRAPE-6: Massively-parallel special-purpose computer for astrophysical particle simulations. *Pub Astron Soc Japan*, 2003, 55: 1163–1187
- 20 Serna A, Alimim J M, Chieze J P. Adaptive smooth particle hydrodynamics and particle-particle coupled codes: Energy and entropy conservation. *Astrophys J*, 1996, 461: 884–896
- 21 Schive H Y, Chien C H, Wong S K, et al. Graphic-card cluster for astrophysics (GraCCA) performance tests. *New Astron*, 2008, 13(6): 418–435
- 22 Barnes J, Hut P. A hierarchical $O(N \log N)$ force-calculation algorithm. *Nature*, 1986, 324: 446–449
- 23 Barnes J, Hut P. Error analysis of a tree code. *Astrophys J Suppl Ser*, 1989, 70: 389–417
- 24 Hernquist L, Bouchet F, Suto Y. Application of the Ewald method to cosmological N -body simulations. *Astrophys J Suppl Ser*, 1991, 75: 231–240
- 25 Hockney R W, Eastwood J W. *Computer Simulation Using Particles*. Bristol: Adam Hilger, 1988
- 26 Efsthathiou G, Davis M, Frenk C S, et al. Numerical techniques for large cosmological N -body simulations. *Astrophys J Suppl Ser*, 1985, 57: 241–260
- 27 Hockney R W, Goel S P, Eastwood J W. Quiet high-resolution computer models of a plasma. *J Comp Phys*, 1974, 14: 148–158
- 28 Efsthathiou G, Eastwood J W. On the clustering of particles in an expanding universe. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1981, 194: 503–525
- 29 Couchman H M P. Mesh-refined P3M - A fast adaptive N -body algorithm. *Astrophys J*, 1991, 368: L23–L26
- 30 Xu G. A new parallel N -body gravity solver: TPM. *Astrophys J Suppl Ser*, 1995, 98: 355–366
- 31 Bode P, Ostriker J P, Xu G. The tree particle-mesh N -body gravity solver. *Astrophys J Suppl Ser*, 2000, 128: 561–569
- 32 Springel V. The cosmological simulation code GADGET-2. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2005, 364: 1105–1134
- 33 Evrard A E, MacFarland T J, Couchman H M P, et al. Galaxy clusters in hubble volume simulations: Cosmological constraints from sky survey populations. *Astrophys J*, 2002, 573: 7–36
- 34 Press W H, Teukolsky S A, Vetterling W T, et al. *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing*. New York: Cambridge University Press, 1992
- 35 Kravtsov A V, Klypin A A, Khokhlov A M. Adaptive refinement tree: A new high-resolution N -body code for cosmological simulations. *Astrophys J Suppl Ser*, 1997, 111: 73–94
- 36 Gnedin N Y. Softened lagrangian hydrodynamics for cosmology. *Astrophys J Suppl Ser*, 1995, 97: 231–257
- 37 Pen U L. A linear moving adaptive particle-mesh N -body algorithm. *Astrophys J Suppl Ser*, 1995, 100: 269–280
- 38 Gnedin N Y, Bertschinger E. Building a cosmological hydrodynamic code: Consistency condition, moving mesh gravity, and SLH-P 3M. *Astrophys J*, 1996, 470: 115–130
- 39 Xu G. Hydrodynamic and N -body schemes on an unstructured, adaptive mesh with applications to cosmological simulations. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1997, 288: 903–919
- 40 Baugh C M. A primer on hierarchical galaxy formation: The semi-analytical approach. *Rep Prog Phys*, 2006, 69: 3101–3156
- 41 Benson A J. Galaxy formation theory. *Phys Rep*, 2010, 495: 33–86
- 42 Silk J, Mamon G A. The current status of galaxy formation. *Res Astron Astrophys*, 2012, 12: 917–946
- 43 Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J Comp Phys*, 1983, 49: 357–393
- 44 Ryu D, Ostriker J P, Kang H, et al. A cosmological hydrodynamic code based on the total variation diminishing scheme. *Astrophys J*, 1993, 414:

1–19

- 45 van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme: V-A second-order sequel to Godunov's method. *J Com Phys*, 1979, 32: 101–136
- 46 Colella P, Woodward P R. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamical simulations. *J Comp Phys*, 1984, 54: 174–201
- 47 Fryxell B, Olson K, Ricker P, et al. FLASH: An adaptive mesh hydrodynamics code for modeling astrophysical thermonuclear flashes. *Astrophys J Suppl Ser*, 2000, 131: 273–334
- 48 O'Shea B W, Bryan G, Bordner J, et al. Introducing Enzo, an AMR cosmology application. arXiv:astro-ph/0403044
- 49 Shu C W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. In: *Advanced numerical approximate of nonlinear hyperbolic equations, Lecture notes in mathematics*. Cetraro: Springer Berlin Heidelberg, 1998. 1697: 325–432
- 50 Feng L L, Shu C W, Zhang M. A hybrid cosmological hydrodynamic/ N -body code based on a weighted essentially nonoscillatory scheme. *Astrophys J*, 2004, 612: 1–12
- 51 Strang G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J Num Anal*, 1968, 5(3): 506–517
- 52 Bryan G, Norman M L, Stone J M, et al. A piecewise parabolic method for cosmological hydrodynamics. *Comput Phys Commun*, 1995, 89: 149–168
- 53 Gingold R A, Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics—Theory and application to non-spherical stars. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1977, 181: 375–389
- 54 Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics. *Ann Rev Astron Astrophys*, 1992, 30: 543–574
- 55 Couchman H M P, Thomas P A, Pearce F R. Hydra: An adaptive-mesh implementation of P 3M-SPH. *Astrophys J*, 1995, 452: 797–813
- 56 Wadsley J W, Stadel J, Quinn T. Gasoline: A flexible, parallel implementation of TreeSPH. *New Astron*, 2004, 9: 137–158
- 57 Agertz O, Moore B, Stadel J, et al. Fundamental differences between SPH and grid methods. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2007, 380: 963–978
- 58 Dolag K, Vazza F K, Brunetti G, et al. Turbulent gas motions in galaxy cluster simulations: The role of smoothed particle hydrodynamics viscosity. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2005, 364: 753–772
- 59 Price D J, Federrath C. A comparison between grid and particle methods on the statistics of driven, supersonic, isothermal turbulence. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2010, 406: 1659–1674
- 60 Abel T. rpSPH: A novel smoothed particle hydrodynamics algorithm. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2011, 413: 271–285
- 61 Iapichino L, Schmidt W, Niemeyer J C, et al. Turbulence production and turbulent pressure support in the intergalactic medium. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2011, 414: 2297–2308
- 62 Mavriplis D J. Unstructured grid techniques. *Ann Rev Fluid Mech*, 1997, 29: 473–514
- 63 Springel V. E pur si muove: Galilean-invariant cosmological hydrodynamical simulations on a moving mesh. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2010, 401: 791–851
- 64 Keres D, Vogelsberger M, Sijacki D, et al. Moving-mesh cosmology: Characteristics of galaxies and haloes. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2012, 425: 2027–2048
- 65 Sutherland R S, Dopita M A. Cooling functions for low-density astrophysical plasmas. *Astrophys J Suppl Ser*, 1993, 88: 253–327
- 66 Abel T, Anninos P, Zhang Y, et al. Modeling primordial gas in numerical cosmology. *New Astron*, 1997, 2: 181–207
- 67 Haardt F, Madau P. Radiative transfer in a clumpy universe. II. the ultraviolet extragalactic background. *Astrophys J*, 1996, 461: 20–37
- 68 Katz N, Weinberg D H, Hernquist L. Cosmological simulations with TreeSPH. *Astrophys J Suppl Ser*, 1996, 105: 19–35
- 69 Thacker R J, Couchman H M P. Implementing feedback in simulations of galaxy formation: A survey of methods. *Astrophys J*, 2000, 548: 728–752
- 70 Veilleux S, Cecil G, Bland-Hawthorn J. Galactic winds. *Ann Rev Astron Astrophys*, 2005, 43: 769–826
- 71 Dalla V C, Schaye J. Simulating galactic outflows with kinetic supernova feedback. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2008, 387: 1431–1444
- 72 Peebles P J E. Structure of the coma cluster of galaxies. *Astron J*, 1970, 75: 13–20
- 73 Groth E J, Peeble P J E. N -body studies of the clustering of galaxies. *Bull Am Astron Soc*, 1975, 7: 425
- 74 Miyoshi K, Kihara T. Development of the correlation of galaxies in an expanding universe. *Astron Soc Jpn Publ*, 1975, 27(2): 333–346
- 75 White S D M. The dynamics of rich clusters of galaxies. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1976, 177: 717–733
- 76 Aarseth S J, Gott J R, Turner E L. N -body simulations of galaxy clustering. I-initial conditions and galaxy collapse times. *Astrophys J*, 1979, 228: 664–683
- 77 Davis M, Efstatihou G, Frenk C S, et al. The evolution of large-scale structure in a universe dominated by cold dark matter. *Astrophys J*, 1985, 292: 371–394
- 78 White S D M, Frenk C S, Davis M, et al. Clusters, filaments, and voids in a universe dominated by cold dark matter. *Astrophys J*, 1987, 313: 505–516
- 79 Carlberg R G, Couchmann H M P. Mergers and bias in a cold dark matter cosmology. *Astrophys J*, 1989, 340: 47–68

- 80 Suto Y, Sugihara T. Redshift-space correlation functions in the cold dark matter scenario. *Astrophys J Lett*, 1991, 370: L15–L18
- 81 Warren M S, Quinn P J, Salmon J K, et al. Dark halos formed via dissipationless collapse. I-shapes and alignment of angular momentum. *Astrophys J*, 1992, 399: 405–425
- 82 Gelb J M, Bertschinger E. Cold dark matter 1: The formation of dark halos. *Astrophys J*, 1994, 436: 467–490
- 83 Jenkins A, Frenk C S, Pearce F R, et al. Evolution of structure in cold dark matter universes. *Astrophys J*, 1998, 499: 20–40
- 84 Governato F, Babul A, Quinn T, et al. Properties of galaxy clusters: Mass and correlation functions. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1999, 307: 949–966
- 85 Bode P, Ostriker J P, Turok N. Halo formation in warm dark matter models. *Astrophys J*, 2001, 556: 93–107
- 86 Colberg J M, White S D M, Yoshida N, et al. Virgo consortium, clustering of galaxy clusters in cold dark matter universes. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2000, 319: 209–214
- 87 Wambsganss J, Bode P, Ostriker J P. Giant arc statistics in concord with a concordance Λ cold dark matter universe. *Astrophys J Lett*, 2004, 606: L93–L96
- 88 Springel V, White S D M, Jenkins A, et al. Simulations of the formation, evolution and clustering of galaxies and quasars. *Nature*, 2005, 435: 629–636
- 89 Li M, Pan J, Gao L, et al. Bulk flow of halos in Λ CDM simulation. *Astrophys J*, 2012, 761: 151–161
- 90 Teyssier R, Pires S, Prunet S, et al. Full-sky weak-lensing simulation with 70 billion particles. *Astron Astrophys*, 2009, 497(2): 335–341
- 91 Angulo R E, Springel V, White S D M, et al. Scaling relations for galaxy clusters in the millennium-XXL simulation. *ArXiv e-print 1203.3216*
- 92 Kim J, Park C, Rossi G, et al. The new horizon run cosmological N -body simulations. *J Korean Astron Soc*, 2011, 44: 217–234
- 93 Alimi J, Bouillot V, Rasera Y, et al. DEUS full observable Λ CDM universe simulation: The numerical challenge. *ArXiv e-print 1206.2838*
- 94 Springel V, Wang J, Vogelsberger M, et al. The aquarius project: The subhaloes of galactic haloes. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2008, 391: 1685–1711
- 95 Gao L, Navarro J F, Frenk C S, et al. The phoenix project: The dark side of rich galaxy clusters. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2012, 425: 2169–2186
- 96 Eisenstein D J, Hu W. Baryonic features in the matter transfer function. *Astrophys J*, 1998, 496: 605–614
- 97 Seo H, Eisenstein D J. Probing dark energy with baryonic acoustic oscillations from future large galaxy redshift surveys. *Astrophys J*, 2003, 598: 720–740
- 98 Blake C, Glazebrook K. Probing dark energy using baryonic oscillations in the galaxy power spectrum as a cosmological ruler. *Astrophys J*, 2003, 594: 665–673
- 99 Linder E V. Baryon oscillations as a cosmological probe. *Phys Rev D*, 2003, 68: 83504
- 100 Cole S, Percival W J, Peacock J A, et al. The 2dF galaxy redshift survey: Power-spectrum analysis of the final data set and cosmological implications. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2005, 362: 505–534
- 101 Eisenstein D J, Zehavi I, Hogg D W, et al. Detection of the baryon acoustic peak in the large-scale correlation function of SDSS luminous red galaxies. *Astrophys J*, 2005, 633: 560–574
- 102 Seo H, Eisenstein D J. Baryonic acoustic oscillations in simulated galaxy redshift surveys, *Astrophys J*, 2005, 633: 575–588
- 103 Angulo R E, Baugh C M, Frenk C S, et al. Constraints on the dark energy equation of state from the imprint of baryons on the power spectrum of clusters. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2005, 362: L25–L29
- 104 Angulo R E, Baugh C M, Frenk C S, et al. The detectability of baryonic acoustic oscillations in future galaxy surveys. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2008, 383: 755–776
- 105 Eisenstein D J, Seo H, Sirko E, et al. Improving cosmological distance measurements by reconstruction of the baryon acoustic peak. *Astrophys J*, 2007, 664: 675–679
- 106 Padmanabhan N, White M. Calibrating the baryon oscillation ruler for matter and halos. *Phys Rev D*, 2009, 80: 63508
- 107 Mehta K T, Seo H, Eckel J, et al. Galaxy bias and its effects on the baryon acoustic oscillation measurements. *Astrophys J*, 2011, 734: 94–105
- 108 Kaiser N. Clustering in real space and in redshift space. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1987, 227: 1–21
- 109 Blake C, Davis T, Poole G B, et al. The WiggleZ dark energy survey: Testing the cosmological model with baryon acoustic oscillations at $z=0.6$. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2011, 415: 2892–2909
- 110 Guzzo L, Pierleoni M, Meneux B, et al. A test of the nature of cosmic acceleration using galaxy redshift distortions. *Nature*, 2008, 451: 541–544
- 111 Samushia L, Percival, W J, Raccanelli A. Interpreting large-scale redshift-space distortion measurements. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2012, 420: 2102–2119
- 112 Beutler F, Blake C, Colless M, et al. The 6dF galaxy survey: $z=0$ measurements of the growth rate and σ_8 . *Mon Not Roy Astron Soc*, 2012, 423: 3430–3444
- 113 Hatton S, Cole S. Modelling the redshift-space distortion of galaxy clustering. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1998, 296: 10–20
- 114 Jennings E, Baugh C M, Pascoli S. Modelling redshift space distortions in hierarchical cosmologies. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2011, 410:

- 2081–2094
- 115 Tinker J L. Redshift-space distortions with the halo occupation distribution- II. analytic model. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2007, 374: 477–492
- 116 Reid B A, White M. Towards an accurate model of the redshift-space clustering of haloes in the quasi-linear regime. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2011, 417: 1913–1927
- 117 Schmidt F. Weak lensing probes of modified gravity. *Phys Rev D*, 2008, 78: 43002
- 118 Mandelbaum R, Hirata C M, Ishak M, et al. Detection of large-scale intrinsic ellipticity-density correlation from the sloan digital sky survey and implications for weak lensing surveys. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2006, 367: 611–626
- 119 Heymans C, Waerbeke L V, Bacon D, et al. The shear testing programme-I. weak lensing analysis of simulated ground-based observations. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2006, 368: 1323–1339
- 120 Jing Y P, Zhang P J, Lin W P, et al. The influence of baryons on the clustering of matter and weak-lensing surveys. *Astrophys J Lett*, 2006, 640: L119–L122
- 121 Henry J P, Evrard A E, Hoekstra H, et al. The X-ray cluster normalization of the matter power spectrum. *Astrophys J*, 2009, 691: 1307–1321
- 122 Mantz A, Allen S W, Rapetti D, et al. The observed growth of massive galaxy clusters-I. statistical methods and cosmological constraints. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2010, 406: 1759–1772
- 123 Vikhlinin A, Kravtsov A V, Burenin R A, et al. Chandra cluster cosmology project III: Cosmological parameter constraints. *Astrophys J*, 2009, 692: 1060–1074
- 124 Benson B A, de Haan T, Dudley J P, et al. Cosmological constraints from Sunyaev-Zel’dovich-selected clusters with X-ray observations in the first 178 square degrees of the south pole telescope survey. *arXiv:1112.5435*
- 125 Mullis C R, Rosati P, Lamer G, et al. Discovery of an X-ray-luminous galaxy cluster at $z=1.4$. *Astrophys J Lett*, 2005, 623: L85–L88
- 126 Hoyle B, Jimenez R, Verde L. Implications of multiple high-redshift galaxy clusters. *Phys Rev D*, 2011, 83: 103502
- 127 Foley R J, Andersson K, Bazin G, et al. Discovery and cosmological implications of SPT-CL J2106-5844, the most massive known cluster at $z > 1$. *Astrophys J*, 2011, 731: 86–94
- 128 Brodwin M, Ruel J, Ade P A R, et al. SPT-CL J0546-5345: A massive $z > 1$ galaxy cluster selected via the Sunyaev-Zel’dovich effect with the south pole telescope. *Astrophys J*, 2010, 721: 90–97
- 129 Zhu W S, Feng L L, Fang L Z. Vorticity of intergalactic medium velocity field on large scales. *Astrophys J*, 2010, 712: 1–13
- 130 Zhu W S, Feng L L, Fang L Z. Dynamical effect of the turbulence of the intergalactic medium on the baryon fraction distribution. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2011, 415: 1093–1104
- 131 Lau E T, Kravtsov A V, Nagai D. Residual gas motions in the intracluster medium and bias in hydrostatic measurements of mass profiles of clusters. *Astrophys J*, 2010, 705: 1129–1138
- 132 Cohn J D, White M. Issues in joint SZ and optical cluster finding. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2009, 393: 393–405
- 133 Rozo E, Wu H, Schmidt F. Stacked weak lensing mass calibration: Estimators, systematics, and impact on cosmological parameter constraints. *Astrophys J*, 2011, 735: 118–131
- 134 Angulo R E, Springel V, White S D M, et al. Scaling relations for galaxy clusters in the millennium-XXL simulation. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2012, 426: 2046–2062
- 135 Loeb A. First light in the universe. *Springer*, 2007, 13: 1–160
- 136 Bromm V, Coppi P S, Larson R B. Forming the first stars in the universe: The fragmentation of primordial gas. *Astrophys J*, 1999, 527: L5–L8
- 137 Bromm V, Coppi P S, Larson R B. The formation of the first stars. I. The primordial star-forming cloud. *Astrophys J*, 2002, 564: 23–51
- 138 Bromm V, Yoshida N, Hernquist L, et al. The formation of the first stars and galaxies. *Nature*, 2009, 459: 49–54
- 139 Fuller T M, Couchman H M P. Simulation of primordial object formation. *Astrophys J*, 2000, 544: 6–20
- 140 Yoshida N, Abel T, Hernquist L, et al. Simulations of early structure formation: Primordial gas clouds. *Astrophys J*, 2003, 592: 645–663
- 141 Abel T, Anninos P, Norman M L, et al. First structure formation. I. primordial star-forming regions in hierarchical models. *Astrophys J*, 1998, 508: 518–529
- 142 Abel T, Bryan G L, Norman M L. The formation and fragmentation of primordial molecular clouds. *Astrophys J*, 2000, 540: 39–44
- 143 Abel T, Bryan G L, Norman M L. The formation of the first star in the universe. *Science*, 2002, 295: 93–98
- 144 Anninos P, Norman M L, Clarke D A. Hierarchical numerical cosmology with hydrodynamics: Methods and code tests. *Astrophys J*, 1994, 436: 11–22
- 145 Anninos P, Zhang Y, Abel T, et al. Cosmological hydrodynamics with multi-species chemistry and nonequilibrium ionization and cooling. *New Astron*, 1997, 2: 209–224
- 146 Ciardi B, Ferrara A. The first cosmic structure and their effects. *Space Sci Rev*, 2005, 116: 625–705
- 147 Ferrara A. Cosmological feedback from the first stars, first light in the universe. *Springer*, 2007, 36: 161–258

- 148 Bromm V, Larson R B. The first stars. *Ann Rev Astro Astrophys*, 2004, 42: 79–118
- 149 Glover S. The formation of the first stars in the universe. *Space Sci Rev*, 2005, 117: 445
- 150 Silk J. On the fragmentation of cosmic gas clouds. I—the formation of galaxies and the first generation of stars. *Astrophys J*, 1977, 211: 638–648
- 151 Rees M, Ostriker J P. Cooling, dynamics and fragmentation of massive gas clouds - clues to the masses and radii of galaxies and clusters. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1977, 179: 541–559
- 152 Cowie L L, Songalia A, Hu E M, et al. New insight on galaxy formation and evolution from keck spectroscopy of the Hawaii deep fields. *Astron J*, 1996, 112: 839–864
- 153 Panter B, Jimenez R, Heavens A F, et al. The star formation histories of galaxies in the sloan digital sky survey. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2007, 378: 1550–1564
- 154 Thomas D, Maraston C, Bender R, et al. The epochs of early-type galaxy formation as a function of environment. *Astrophys J*, 2004, 621: 673–694
- 155 Blanton M R, Eisentstein D, Hogg D W, et al. Relationship between environment and the broadband optical properties of galaxies in the sloan digital sky survey. *Astrophys J*, 2005, 629: 143–157
- 156 Baldry I K, Glazebrook K, Brinkmann J, et al. Quantifying the bimodal color-magnitude distribution of galaxies. *Astrophys J*, 2004, 600: 681–694
- 157 Kauffmann G, Heckman T M, White S D M. et al, The dependence of star formation history and internal structure on stellar mass for 105 low-redshift galaxies. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2003, 341: 54–69
- 158 Zheng X Z, Bell E F, Papovich C, et al. The dependence of star formation on galaxy stellar mass. *Astrophys J*, 2007, 661: L41–L44
- 159 Birnbiom Y, Dekel A. Virial shocks in galactic haloes? *Mon Not Roy Astron Soc*, 2003, 345: 349–364
- 160 Katz N, Keres D, Dave R, et al. How do galaxies get their gas? In: *The Distrubution of Baryons at $z=0$* , volume 281 of *Astron-physics and Space Science Library*. The IGM/Galaxy Connection (Rosenberg J L, Putman M E, ed), 2003. 185–192
- 161 Keres D, Katz N, Weinberg D H, et al. How do galaxies get their gas? *Mon Not Roy Astron Soc*, 2005, 363: 2–28
- 162 Keres D, Katz N, Fardal M, et al. Galaxies in a simulated Λ CDM universe-I. cold mode and hot cores. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2009, 395: 160–179
- 163 Dekel A, Birnboim Y. Galaxy bimodality due to cold flows and shock heating. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2006, 368: 2–20
- 164 Fardal M, Katz N, Gardner J P, et al. Cooling radiation and the $L_y \propto$ luminosity of forming galaxies. *Astrophys J*, 2001, 562: 605–617
- 165 van de Voort F, Schaye J, Booth C M, et al. The rates and modes of gas accretion on to galaxies and their gaseous haloes. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2011, 414: 2458–2478
- 166 Neistein E, Dekel A. Constructing merger trees that mimic N -body simulations. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2008, 383: 615–626
- 167 Ocvirk P, Pichon C, Teyssier R. Bimodal gas accretion in the horizon-mare nostrum galaxy formation simulation. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2008, 390: 1326–1338
- 168 Brook A M, Governato F, Quinn T, et al. The role of cold flows in the assembly of galaxy disks. *Astrophys J*, 2009, 694: 396–410
- 169 Cattaneo A, Dekel A, Devriendt J, et al. Modelling the galaxy bimodality: Shutdown above a critical halo mass. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2006, 370: 1651–1665
- 170 Toomre A, Toomre J. Galactic bridges and tails. *Astrophys J*, 1972, 178: 623–666
- 171 White S D M, Rees M J. Core condensation in heavy halos—A two-stage theory for galaxy formation and clustering. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1978, 183: 341–358
- 172 Fall S M. Dissipation, merging and the rotation of galaxies. *Nature*, 1979, 281: 200–202
- 173 Blumenthal G R, Faber S M, Primack J R, et al. Formation of galaxies and large-scale structure with cold dark matter. *Nature*, 1984, 311: 517–525
- 174 Mo H J, Mao S, White S D M. The formation of galactic discs. *Mon Not Roy Astron Soc*, 1998, 295: 319–336
- 175 Hopkins P F, Bundy K, Hernquist L, et al. Observational evidence for the coevolution of galaxy mergers, quasars, and the blue/red galaxy transition. *Astrophys J*, 2007, 659: 976–996
- 176 Springel V, Hernquist L. Formation of a spiral galaxy in a major merger. *Astrophys J*, 2005, 622: L9–L12
- 177 Robertson B, Bullock J S, Cox T J, et al. A merger-driven scenario for cosmological disk galaxy formation. *Astrophys J*, 2006, 645: 986–1000
- 178 Robertson B E, Bullock J S. High-redshift galaxy kinematics: Constraints on models of disk formation. *Astrophys J*, 2008, 685: L27–L30
- 179 Governato F, Brook C B, Brooks A M, et al. Forming a large disc galaxy from a $z < 1$ major merger. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2009, 398: 312–320
- 180 Bournaud F, Elmegreen B G. Unstable disks at high redshift: Evidence for smooth accretion in galaxy formation. *Astrophys J*, 2009, 694: L158–L161
- 181 Wall J V, Pope A, Scott D. The evolution of submillimetre galaxies: Two populations and a redshift cut-off. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2008, 383: 435–444

- 182 van den Bergh S, Abraham R G, Ellis R S, et al. A morphological catalog of galaxies in the hubble deep field. *Astrophys J*, 1996, 112: 359–268
- 183 Elmegreen B G, Elmegreen D M. Stellar populations in 10 clump-cluster galaxies of the Hubble ultra deep field. *Astrophys J*, 2005, 627: 632–646
- 184 Bournaud F, Daddi E, Elmegreen B G. Observations and modeling of a clumpy galaxy at $z = 1.6$. spectroscopic clues to the origin and evolution of chain galaxies. *Astron Astrophys*, 2008, 486: 741–753
- 185 Noguchi M. Early evolution of disk galaxies: Formation of bulges in clumpy young galactic disks. *Astrophys J*, 1999, 514: 77–95
- 186 Immeli A, Samland M, Gerhard O, et al. Gas physics, disk fragmentation, and bulge formation in young galaxies. *Astron Astrophys*, 2004, 413: 547–561
- 187 Immel A, Samland M, Westera P, et al. Subgalactic clumps at high redshift: A fragmentation origin? *Astrophys J*, 2004, 611: 20–25
- 188 Bournaud F, Elmegreen B G, Elmegreen D M. Rapid formation of exponential disks and bulges at high redshift from the dynamical evolution of clump-cluster and chain galaxies. *Astrophys J*, 2007, 670: 237–248
- 189 Elmegreen B G, Bournaud F, Elmegreen D M. Bulge formation by the coalescence of giant clumps in primordial disk galaxies. *Astrophys J*, 2008, 688: 67–77
- 190 Dekel A, Birnboim Y, Engel G, et al. Cold streams in early massive hot haloes as the main mode of galaxy formation. *Nature*, 2009, 457: 451–454
- 191 Springel V, Hernquist L. Cosmological smoothed particle hydrodynamics simulations: A hybrid multiphase model for star formation. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2003, 339: 289–311
- 192 Governato F, Willman B, Mayer L, et al. Forming disc galaxies in Λ CDM simulations. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2007, 374: 1479–1494
- 193 Ceverino D, Dekel A, Bournaud F. High-redshift clumpy discs and bulges in cosmological simulations. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2010, 404: 2151–2169
- 194 Ceverino D, Dekel A, Mandelker N, et al. Rotational support of giant clumps in high- z disc galaxies. *Mon Not Roy Astron Soc*, 2012, 420: 3490–3520
- 195 Yoshikawa K, Yoshida N, Umemura M. Direct integration of the collisionless Boltzmann equation in six-dimensional phase space: Self-gravitating system. *Arxiv e-print* 1206.6152
- 196 Hahn O, Abel T, Kaehler R. A new approach to simulating collisionless dark matter fluids. *Arxiv e-print* 1210.6652
- 197 Zhang R, Zhang M, Shu C W. High order positivity-preserving finite volume WENO schemes for a hierarchical size-structured population model. *J Comput Appl Math*, 2011, 236: 937–949
- 198 Zhang X, Shu C W. Positivity-preserving high order finite difference WENO schemes for compressible Euler equations. *J Comput Phys*, 2012, 231: 2245–2258

The simulation techniques and applications in modern cosmology

FENG LongLong^{1*} & ZHU WeiShan^{2,3}

¹ Purple Mountain Observatory, Chinese Academy of Sciences, Nanjing 210008, China;

² School of Astronomy and Space Science, Nanjing University, Nanjing 210093, China;

³ Key Laboratory of Modern Astronomy and Astrophysics, Nanjing University, Nanjing 210093, China

The diversity and highly nonlinearity in physical processes occurred on cosmic scales has made the simulation technique an essential and powerful tool of modern cosmology researches. It can not only be applied to track the formation and evolution of the cosmic structures, and also bridges the gap between the astronomical observations and theoretical models. This article is going to give a short review of state of the art of computational cosmology, including the N -body simulation techniques for collisionless particles and computational hydrodynamics with baryonic physics. Moreover, we will target the core scientific questions in modern cosmology, and present a brief summary of applications of extremely large simulations in next generation sky survey especially designed for detections of dark matter and dark energy. In addition, we describe a few highlights of numerical simulation in studying the formation of the first stars, the first galaxies, cold gas accretions and star formation as well as galactic disk formation at high redshifts. In accordance to the upcoming large sky surveys and the rapid progresses made in supercomputing technology, we give an outlook for the next decade, a perspective of what computational challenges will be met, and what exciting headway can be expected in computational cosmology and relative sciences.

beam on elastic foundation, Newton's second law of motion, Hamilton principle, inextensional condition, second-order moment

PACS: 78.20.Bh, 47.11.-j, 95.36.+x, 95.35.+d, 98.80.Bp

doi: 10.1360/132013-33