

### 1, 数值模拟简介

#### 1.1 纯暗物质的数值模拟到流体模拟

数值模拟——通过计算机来模拟宇宙中物质的非线性运动过程——诞生于上个世纪 70 年代, 并且随着计算机的发展逐步成为了天文学理论研究的主要工具。大概 10 年之前, 纯暗物质的模拟还是整个数值天文研究领域的重心。随着现在超算能力的提升和成熟的模拟技术, 纯暗物质的数值模拟已渐渐被带重子物质过程的流体模拟取代。流体模拟的优点在于重子物质跟暗物质可以在一致的引力下共同演化, 从而可以给出合理自洽的结果。这是因为重子物质的演化过程对无碰撞的暗物质结构形成, 尤其是在小尺度结构上, 是有一定影响的[详见 Cui & Zhang 2017]。因此通过带重子物质过程的流体模拟来再现星系的形成与演化是现在数值天文的研究中心。

#### 1.2 流体模拟技术

流体的模拟跟只涉及引力作用的无碰撞的暗物质的模拟不同, 它需要去解流体方程, 而可以根据数值解法上的不同可以分为拉格朗日隐式方法和欧拉方法。其中比较通用的平滑粒子流体力学方法[Smoothed Particle Hydrodynamics, Monaghan 1992]是基于拉格朗日方法, 它使用单个粒子来代表流体的一小部分来实现对流体的模拟。使用 SPH 办法并且比较有代表性的程序为 GADGET[Springel 2005], GASOLINE[Wadsley 2004]。而自适应网格细化方法[adaptive mesh refinement (AMR), Berger & Colella 1989]则是基于欧拉方法将流体细分到自适应网格上来解流体方程。使用 AMR 方法并且比较有代表性的程序有 ENZO[Bryon 2014]和 RAMSES[Teyssier 2001]。还有国内学者基于欧拉方法发展的 WIGEON 程序[Feng et al. 2004; Zhu et al. 2013]。这两种解流体方程的方法各有优缺点, 具体可参考[2, 3]。因此 Springel 开发出了基于动网格(moving mesh)技术的 AREPO 程序[Springel 2010]。此外 Hopkins 开发了基于无网格(meshless method)技术(包括 Meshless Finite-Mass, MFM; Meshless Finite-Volume, MFV)的 GIZMO 程序[Hopkins 2015]。

不同模拟程序之间的比较可以追溯到 Santa Barbara Cluster comparison project [Frenk et al. 1999]。最近的 nIFTy cluster comparison project [Sembolini et al. 2016a, b] 比较了超过 10 种不同的模拟程序。通过比较对同一个星系团的非辐射的模拟，他们发现不同与经典的 SPH 方法，改进的 SPH 方法（modern SPH，通常是使用不同的内核）得到了和 mesh/moving mesh 方法的程序一致的结果。

### 1.3, 星系形成的流体数值模拟

在目前标准的星系形成模型中，气体的吸积和反馈扮演着重要的角色。在星系的增长过程中，星系周围的较冷气体（一般低于  $2-3 \times 10^4 \text{K}$ ）逐渐被吸积到星系的周围或所在的暗晕维里半径以内。一般认为[1]，对于低质量星系（暗晕质量小于  $10^{12}$  太阳质量），星系外围的冷气体将直接经由宇宙纤维结构进入到星系中央。对于大质量星系，被吸积的冷气体将首先被暗晕的激波加热，先形成一个热的气体晕，随后经由气体冷却过程（自由-自由辐射，金属线冷却等）而逐步掉入星系中央。在星系中央，冷气体由于引力不稳定性将进一步形成恒星，并且在恒星内部形成了重金属元素。在恒星的演化过程中，恒星的星风和超新星爆炸将气体和金属元素抛入到恒星际介质或者星系周围。此外，几乎所有的星系中心存在一个大质量黑洞，在黑洞增长吸积物质的过程中，大量能量（辐射或者喷流）也将释放到星系中，从而影响星系内部及周围中气体的分布和性质。

上述物理过程非常复杂，属于极端非线性过程，并且他们之间相互影响，具有很强的关联性。在星系形成的研究中，流体数值模拟具有非常重要的作用。相比纯引力的数值模拟，流体模拟包含了复杂的重子过程：气体的激波，湍流过程、重元素电离以及气体辐射过程、恒星星风以及超新星的反馈、黑洞的吸积与反馈。有些模拟还包括了辐射转移、磁场以及宇宙射线。发展一个稳定的流体模拟程序面临巨大的挑战，但是在过去 20-30 年内也取得了很大的进展[2,3; Feng & Zhu, 2013, 中国科学; Naab & Ostriker 2017, AR&AA]。目前比较普遍采用的模拟方法有基于平滑粒子流体力学方法(Smoothed Particle Hydrodynamical, SPH), 比较有代表性的程序为 GADGET[4], Springel 2010], GASOLINE[5, Wadsley 2004], GIZMO[6, Hopkins 2015]。基于自适应网格技术(Adaptive Mesh Refinement)而发展 ENZO[7, Bryon 2014], RAMSES[8], AREPO[9]等程序。还有国内学者基于

欧拉方法发展的 WIGEON 程序 [10]。这些流体模拟程序各有优缺点，具体可参考[2,3]。可惜的是目前还没有系统的研究来比较这些不同流体程序在模拟星系形成中的表现[11, Kim 2014]。

利用上述一些流体程序，根据研究对象不同，研究者开展了大量流体数值模拟。如为了解决银河系内卫星星系有关的一些疑难[12, Bullock & Boylan-Kolchin 2017, AR&AA]，研究者选取了宇宙学模拟中具有类似银河系形成历史的星系及其暗晕，利用流体模拟，进行了高分辨的模拟，在这方面比较有代表性的有 NIHAO[13], FIRE[14]。这些高精度的模拟，一般关注的是卫星星系的数目、内部的物质结构，特别是恒星形成的反馈过程对星系内部恒星分布的影响。最近几年宇宙学体积下的星系形成流体模拟取得了突出进展，比较有代表性的数值模拟有 Illustris[15], Eagle[16], ILLUSTRIS-TNG, Horizon 及 Horizon-AGN 等。相比单个高分辨模拟，这些模拟的质量和空间分辨率要低，但是他们能够预言星系的大部分统计性质，如恒星质量函数，星系空间分布、冷气体分布等。特别需要指出的是，这些模拟的体积都相对较大，比较适合研究重子物质在宇宙中的分布。

不同的流体模拟程序都是对同样的星系形成过程进行刻画，虽然使用的重子物质模型都可以简单的用气体冷却，恒星形成，超新星反馈和黑洞的形成及 AGN 反馈来描述，但是具体的在数值模拟中的实现过程/方法却不相同。通过强制不同模拟程序使用尽可能统一的重子物质模型，ARGORA project [Kim et al. 2014] 认为不同的模拟程序给出了一致的结果。但是通过对使用不同模拟程序得到 nIFTy cluster 的结果分析，Cui et al. 2016 却发现重子物质模型对于最终结果，尤其是非常小尺度上的结果，有着非常大的不同。这个差异远远大于不同程序的非辐射模拟结果之间的差别。这也就意味着重子物质模型对模拟星系形成的影响远远大于流体模拟的技术细节。

## 2, 重子物质缺失问题及进展

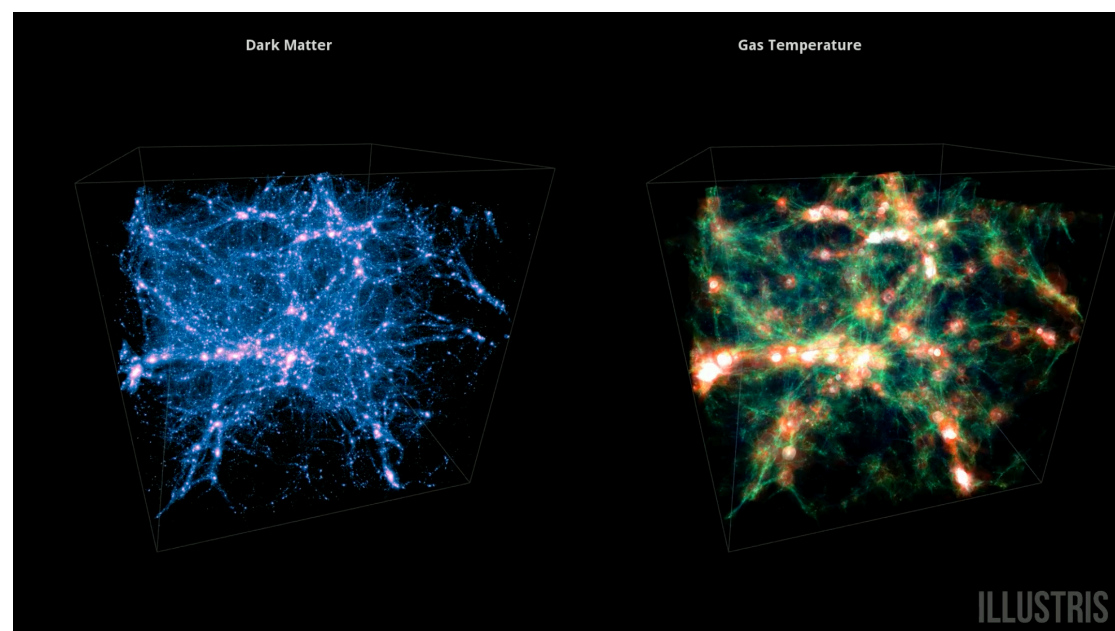
### 2.1 重子物质缺失问题

在标准宇宙学模拟中，宇宙的临界密度为  $3H^2/8\pi/G$ ，目前宇宙的各物质组份占临界密度的比例大致为：暗能量,  $\Omega_{\Lambda}=68\%$ , 暗物质,  $\Omega_m=27\%$ ，普通物质（重子）,  $\Omega_b=5\%$ 。对于星系和观测宇宙学来说，一个重要的任务就是研究这些重子物质在宇宙中的分布。一般来说，这些重子物质一般分为几个成分：恒星，cold gas, cool gas, warm gas, warm-hot gas and hot gas。对于气体

成分，一般根据其温度来划分，如冷气体的温度 $<10^4\text{K}$ ，cool gas 为  $10^4\text{-}10^5$ ，WHIM ( $10^5\text{-}5\times 10^6$ ),hot gas ( $T>5\times 10^6\text{K}$ )。不同的研究者对气体的温度分类略有不同。此外还会再考虑气体的密度来进行分类(e.g., Dave et al. 2010)。目前一个显著的矛盾是在低红移( $z<1.0$ )观测到的重子物质的总含量比标准宇宙学模型中的重子的平均含量( $\Omega_b/\Omega_m$ )要低，大约有 50%还没被发现。早期的流体数值模拟发现(e.g., Cen & Ostriker 1999)，大部分失踪的重子以 WHIM 形式存在于星系周边(CGM)或者 IGM。这些 WHIM 气体应该在 soft X-ray 波段具有发射和吸收性质，因此也是 HUBS 的主要科学目标。

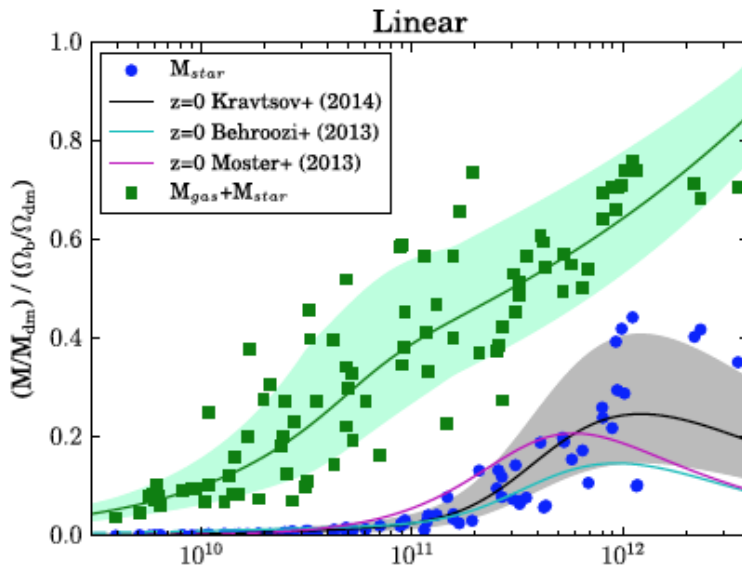
## 2.1 现有流体模拟的研究与预言

从 2000 年左右人们就开始利用宇宙学数值模拟研究不同温度气体的空间分布 [Cen & Ostriker 1999, Dave, Cen & Ostriker 2001]。早期的模拟分辨率较低，并且引入的恒星形成物理过程相对比较粗糙。最近几年宇宙学流体数值模拟取得了很大进展。特别是以 Illustris[Vogelsberger et al. 2014]和 EAGLE[Schaye et al. 2015]为代表的流体模拟在模拟星系的性质方面取得了很大成功，同时给出了重子物质在宇宙较大尺度上的分布性质。图一给出了最新的 ILLUSTRIS 模拟给出的暗物质（左）和气体的温度分布（右）。可以看出热气体（白色区域）与暗物质的高密区（星系群，星系团）的中心位置有很好的对应关系，而温热气体 WHIM（红色及绿色区域）则对应于星系群的外围，以及宇宙纤维结构(Filament)。

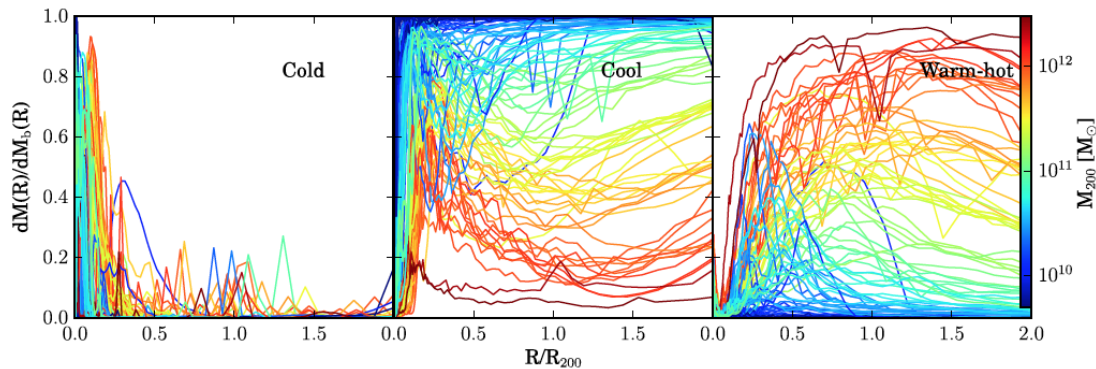


图一： ILLUSTRIS 宇宙学数值模拟给出的暗物质（左）和气体温度分布（右）

利用高精度流体模拟，NIHAO 项目 [Wang et al. 2015] 研究了不同气体成分的物质比例随星系质量的变化关系。相对以前的流体模拟，如 Illustris 模拟，NIHAO 引入了 pre-stellar 的反馈,能有效抑制低质量星系内的恒星形成效率，跟观测更加接近，因此可以利用其来分析不同重子成分的比例和空间分布。Wang 等人[Wang et al. 2017]利用 NIHAO 数值模拟发现，星系中（维里半径以内）总重子物质的比例随着星系质量增加而变大，在银河系的尺度上，大约有 35% 的重子‘丢失’，这些‘丢失’的重子分布在星系的外围。图二给出其不同重子成分的比例。图三给出其不同温度成分气体的分布。可以看出对于冷气体，绝大部分都是分布在星系内部，而对于 WHIM,其空间分布依赖于星系的质量：对于低质量星系 ( $M_{\text{vir}} < 3 \times 10^{10}$  solar mass) 其 WHIM 大部分分布在星系内部，对于银河系质量的星系，其 WHIM 气体可以分布在星系的  $\sim 2-3$  倍维里半径以内。这意味着要探测 WHIM 在近邻大质量星系周围的分布，需要比较大的视场。



图二：星系维里半径内重子物质比例随星系暗晕质量的关系。图片来自 NIHAO-VII (Wang et al. 2017)



图三：星系中不同温度成分气体的空间分布。可以看到冷气体一般分布在星系维里半径以内，而 WHIM 气体可以分布到星系的 2~3 倍维里半径处。图片来自 NIHAO-VII。

上述模拟结果只是给出了热重子的物质比例，不能直接与观测比较。比较有意义的是利用数值模拟给出星系周边 X-ray 亮度的分布。van de Voort & Schaye 2013 利用流体模拟研究了不同质量星系附近的热重子重不同元素发射线（主要集中在 soft X-ray, 0.5-1.2 Kev）的亮度分布。他们发现，对于 WHIM, 如果其金属丰度大于 0.1 倍太阳金属丰度，气体的冷却主要为金属发射线主导。利用 Overwhelmingly Large Simulation project, 他们研究了不同质量星系周围的 soft X-ray 发射线亮度分布。图 4 给出了不同星系质量范围内不同发射线的亮度分布。他们发现，在星系到星系团尺度，OVIII 具有最强的亮度。在星系尺度上，C VI 和 OVII 亮度次之，且具有相同的亮度分布。在星系团尺度上，Ne X 具有较高的亮度。他们指出，对于光度距离 600Mpc 的目标星系( $z = 0.13$ )，如果仪器的探测极限是 0.1 光子/s/cm<sup>2</sup>/sr, 目标源在  $z=0.1$  (光度距离 460 Mpc), 如果目标源为星系群( $\lg M_{\text{vir}} = [13, 14]$ ，单位为太阳质量，以下略同), 则 OVIII 的探测可以到距离星系中心 0.7R<sub>vir</sub> 的距离 (~350Kpc, 大约 3')。如果目标源暗晕质量为  $\lg M = [12, 13]$ ，则在 OVIII 线处可以探测到 0.3R<sub>vir</sub> (~80Kpc, 大约 0.75')。

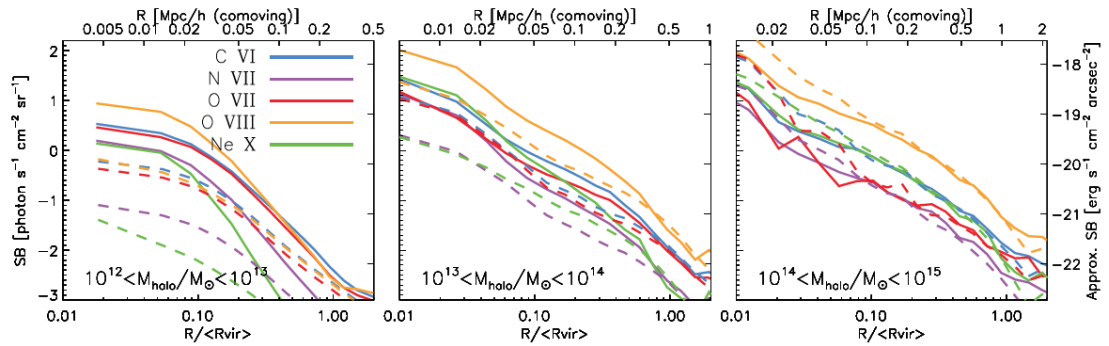


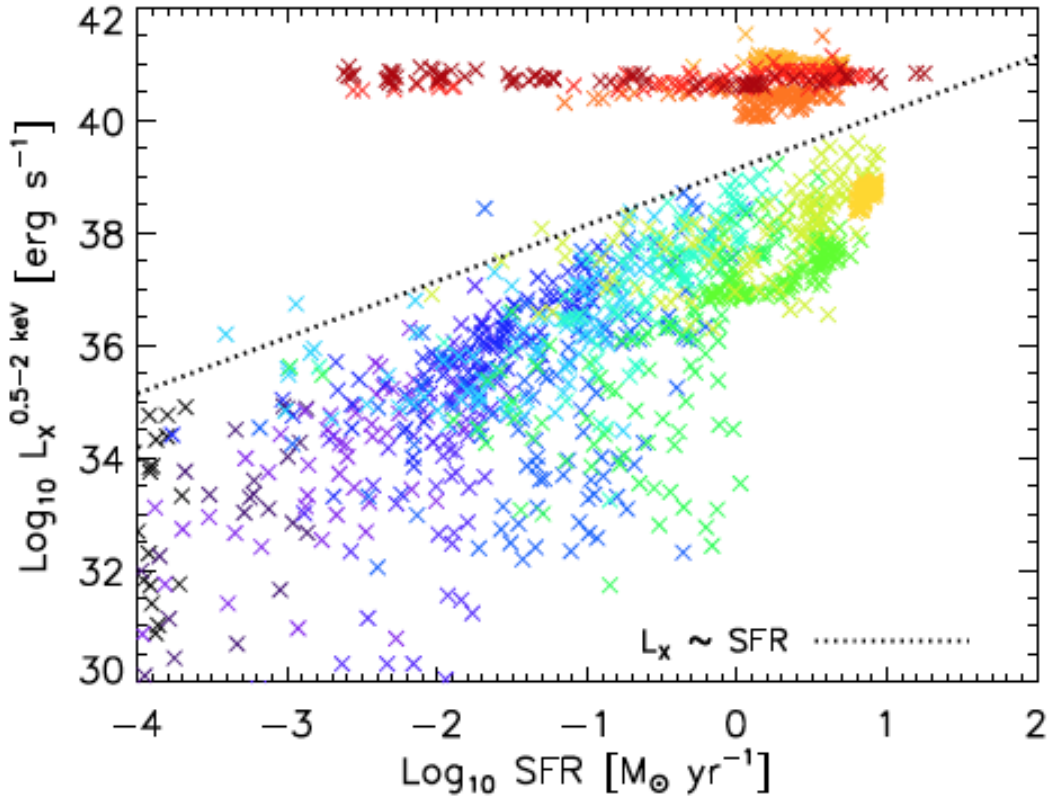
图 4: 不同重元素发射线表明亮度曲线[van den Voort & Schaye 2013]。图中比较了 AGN 反馈对发射线亮度的影响。实线表示没有 AGN 反馈，虚线为包括 AGN 反馈。可以看出不同的发射线其亮度随星系质量有明显的依赖关系。同时，在星系群尺度上，AGN 反馈将减少 OVIII 等发射线的强度。

## 2.2 热气体分布对星系性质和反馈过程的依赖

利用 X-ray 对星系周围气体的观测可以给出其 WHIM 气体和金属的分布,为了能对星系形成的物理过程,特别是星系形成过程中的恒星反馈,物质外流和 AGN 等给予限制,我们需要研究星系在 soft X-ray 的性质与星系在光学波段或者其他(如射电)波段性质的关联。利用宇宙学的流体数值模拟,已经有研究者已经开展了相关研究。

van de Voort 等 [2016, MNRAS, 463, 4533] 利用 FIRE 数值模拟对一批星系中的 soft X-ray[0.5-2 Kev]的辐射进行了研究,特别考察了其 soft X-ray 流量,  $L_x$  与星系的恒星反馈和恒星形成率的关系。他们发现对于恒星质量在  $10^9 \sim 10^{11}$  太阳质量的星系,其  $L_x$  与恒星质量和暗晕质量的关系可以很好的用幂率关系来描述,其指数都接近 2.7。这比给予热平衡的假设得到的  $L_x$  与暗晕质量关系的指数  $4/3$  要陡。他们指出,这主要是恒星的超新星反馈大大降低了低质量星系内的重子物质,特别是热气体的含量,并且在模拟中,这些低质量星系内的 x-ray 亮度主要是由具有较高速度的外流物质引起的。他们还比较了  $L_x$  与星系的恒星形成率关系,发现其对星系的暗晕质量由很强的依赖关系,如图 5 所示。他们发现,对于处在低质量暗晕内的星系(蓝色,绿色的点),其 soft X-ray 的亮度与恒星形成率有很好的相关,即恒星形成率越高,  $L_x$  越大。这主要是由于这些星系内的  $L_x$  主要是由外流物质引起的,而外流物质含量与恒星形成率有很强的相关(正比)。对于处在大质量暗晕内的星系(红色点),其  $L_x$  亮度与恒星形成率基本无关,这主要是这些暗晕内的  $L_x$  主要是由暗晕内的热气体贡献,其主要来源于流入暗晕内热气体被激波加热所致(热平衡韧致辐射)。





图五：星系周围 soft X-ray 亮度与星系的恒星形成率的关系。红色点表示大质量星系(暗晕质量大于  $10^{13}$  solar mass，其他点为低质量星系(暗晕质量 $<10^{12}$  solar mass)。图片来自 van den Voort et al. 2016, MNRAS。

Nelson 等人(2018, MNRAS, 477, 450)利用下一代 Illustris 流体模拟（相比 Illustris 修改了反馈模拟，并具有更大的宇宙学体积）研究了不同重元素在不同电离度下的空间分布。图 6 给出了他们模拟中红移 0 时刻一个切片中重元素的分布。上面是 OVII 的分布，可以看出其很好得示踪了大尺度结构和塌缩暗晕的分布。也可以看出，在暗晕中心，OVII 的含量较低，主要是在那里 O 元素处于更高的电离态，如 OVIII。下面的图为其中某个区域放大以后，可以看到其他元素的分布，如 OVIII 主要分布在暗晕的内部。



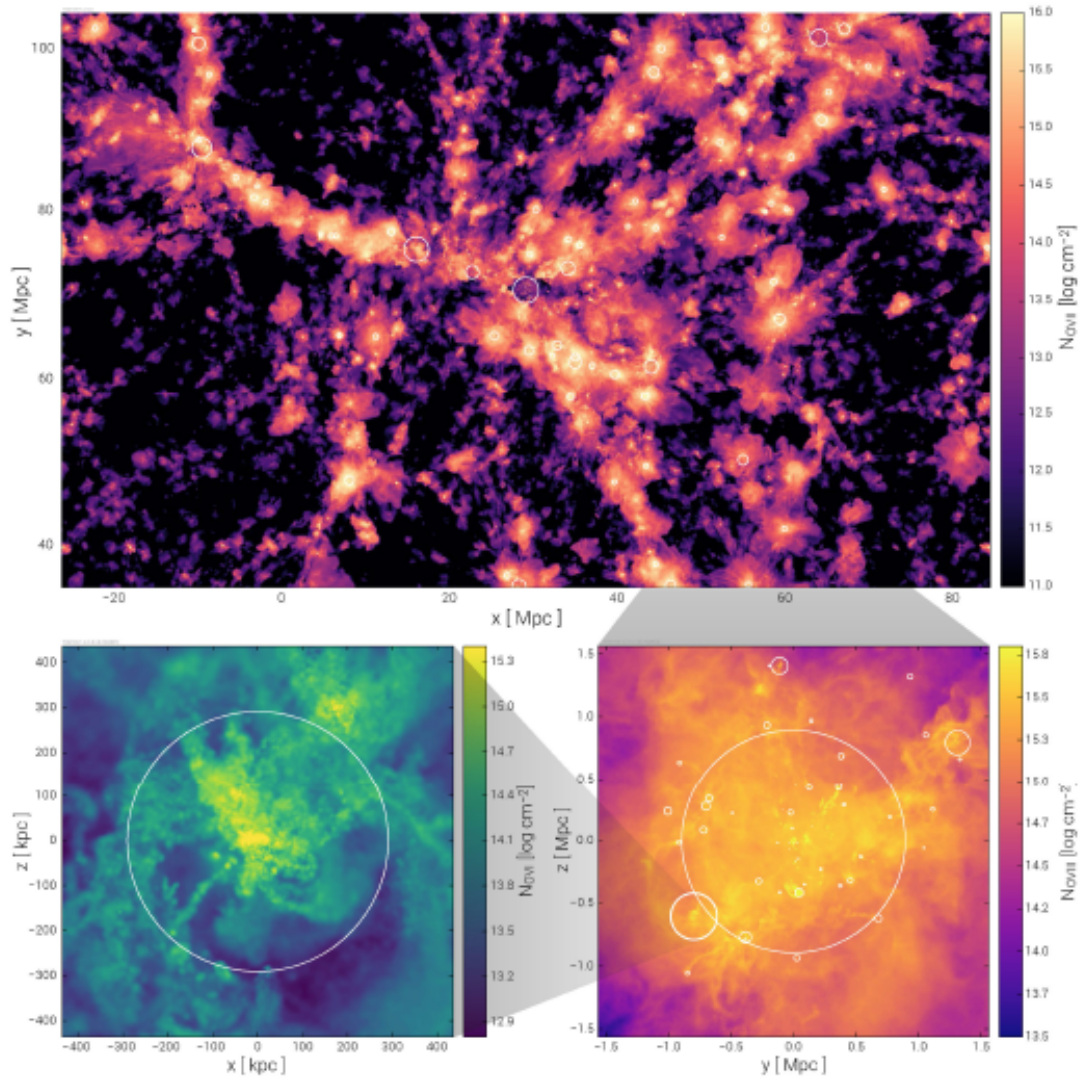


图 6: ILLUSTRIS-TNG 模拟中 O 元素在不同电离态的分布。图片来自 Nelson et al. 2018, MNRAS, 477, 450。

Nelson 等还给出了不同质量暗晕内不同电离态元素的总质量和柱密度分布，如图 7 所示。可以看出，对于低质量暗晕 ( $M_{\text{vir}} < 10^{12}$  solar mass)，其气体总质量随暗晕质量上升较快，反应了反馈对星系内总重子含量的影响。根据暗晕质量不同，不同电离态元素的分布也有所变化。如 O VIII 在  $10^{13}$  太阳质量处最大，而 O VII 在处在一个比较广的质量分布范围内。

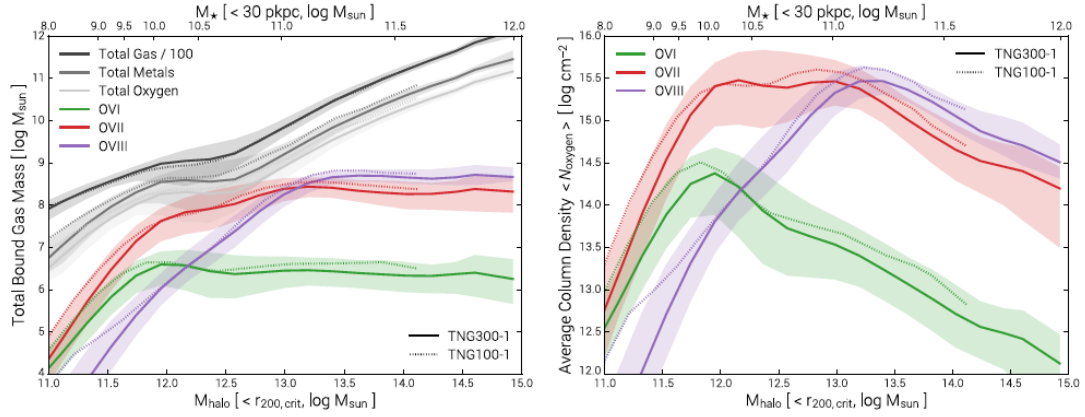


图 7, ILLUSTRIS-TNG 模拟中不同电离态元素的质量、柱密度与暗晕质量的关系。

最后简单讨论以下星系形成的中其他过程，如恒星反馈、AGN 反馈，恒星初始质量函数(IMF)对金属元素分布的影响。Nelson 给出了 OVI 的覆盖因子(covering factor)对不同反馈模型的依赖。尽管 OVI 不在 soft X-ray 波段，但是其结构对于我们理解利用金属的吸收线限制反馈模拟也有一定的借鉴意义。图 8 给出 covering factor 对不同恒星反馈和 AGN 反馈模型的依赖。具体细节这里不表，但可以看出，不同的反馈模型给出的重元素空间分布相差非常大，也意味着必须利用观测来对这些反馈模型进行进一步的限制。van den Voort & Schaye 2013 也研究了 AGN 反馈对发射线亮度的影响。他们发现(见图四),在星系及星系群尺度上，AGN 的反馈将减少发射线的亮度。对于 OVIII, NVII 其在星系中心区域的亮度将减少大约 1 个量级!。需要指出的是，这个结果依赖于他们的具体 AGN 反馈模拟，需要进一步与其他研究结果进行比较。Roncarelli et al. 2012 发现引入 top heavy 的恒星 IMF 也会增加 OVII 等元素的比例。

总的来说，目前利用数值模拟来研究 WHIM 气体及其 soft X-ray 性质的分布取得了较大进展，但是还需要进一步研究。首先，对于宇宙学模拟和单个高分辨模拟，各有优缺点，如宇宙学模拟对星系尺度上的细节过程处理不够，分辨率不够高；但是能提供整体的反馈效率和恒星形成的关系；高分辨模拟能够详细模拟星系内部的物质循环过程，但是样本少，物理参数缺乏统计限制。此外，不同流体模拟由于采取的物理模型，模拟精度不一样，导致其预言的 soft X-ray 性质有较大的差别。即使对于同一个模拟，不同星系的环境、物理状态不一样，也会导致其外流物质，WHIM 性质对反星系性质的依赖不一样(e.g., Muratov et al. 2015)。因此还需要开展大量数值模拟来理解 WHIM 在 soft x-ray 波段的性质与星系反馈之间的物理联系。HUBS 将有望在 WHIM 的观测方面起到独特的作用，进一步加

深我们对星系形成过程的理解。

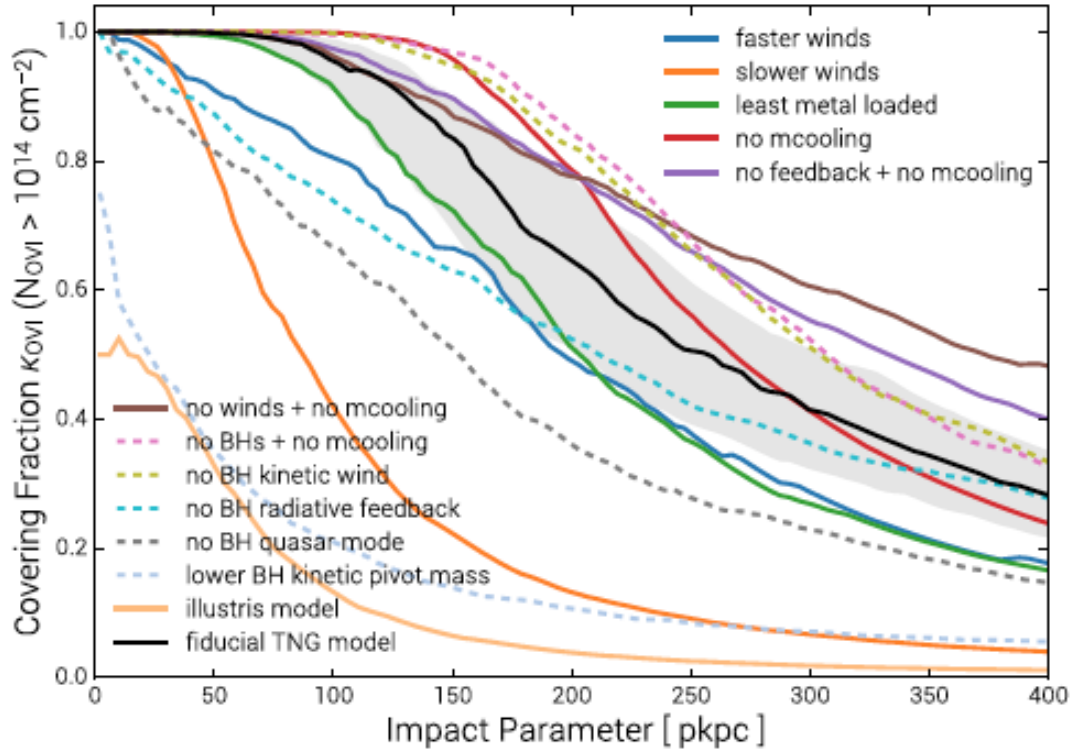


图 8: 不同的星风和黑洞反馈模型对 OVI 元素覆盖因子(covering factor)的影响。来自 ILLUSTRIS-TNG 数值模拟。

### 3, HUBS 与流体模拟

在流体模拟中, 重子物质具有不同的组分, 如不同年龄的恒星, 不同温度、密度的气体。同时, 气体中含有丰富的重元素, 如 C, N, O, Ne, Fe, 等, 他们会处在不同的电离态。为了利用观测来研究这些重子物质的分布, 需要对流体数值模拟数据进行后期处理。如为了研究热气体中不同金属元素的电离态及辐射, 需要利用一些程序进行后期数据处理, 如 the Astrophysical Plasma Emission Code (APEC, Smith 2001), 或 CLOUDY (Ferland et al. 1998) 来计算不同元素的电离度及其辐射强度, 这样可以预言气体在不同波段, 如与 HUBS 相关的 soft X-ray, 的观测性质 [Fang et al. 2005]。

如前所述, 利用流体数值模拟研究宇宙中的热重子, 特别是与 HUBS 密切相关

的 WHIM 气体的分布，还需要开展大量的研究工作。国内在流体数值模拟方面开展的工作不多，而且集中在星系的光学性质方面和星系际介质在宇宙网络结构的分布方面(Wang et al. 2015; Zhu & Feng 2017)。在利用流体模拟研究 WHIM 气体方面，才刚刚开始(Wang et al. 2017)。我们认为，国内在数值模拟方面，与 HUBS 相关的科学工作可以从如下方面开展：

- 1, 星系中的关键物理过程对不同尺度上(星系内部，星系之间，宇宙网络结构)WHIM 气体的分布
- 2, WHIM 气体分布与星系性质（光学、射电等）之间的关联
- 3, WHIM 气体的 X-ray 性质与 21cm, SZ 效应的联合分布与测量
- 4, 建立 soft X-ray 的模拟成图和光谱，为仪器关键指标提供科学建议

## 规划实施

下面简单概述如何完成上述的 4 个科学目标。紫金山天文台康熙研究员团队过去几年利用流体模拟开展了系列工作，特别是 NIHAO 数值模拟在国际上有一定的影响。在目标(1)方面，该团队将继续开展高精度的大量单个星系模拟（模拟规模、精度等需要进一步明确），研究不同反馈机制，特别是超新星和 AGN 反馈对星系 WHIM 分布的影响。在目标(2)方面，该团队正利用公开的流体程序 (Gadget-3)，对其进行修改，开展宇宙学的流体数值模拟；结合该团队发展的星系形成的半解析模型，可预言星系在光学波段的性质。同时，与中山大学，中国科技技术大学、天津师范大学合作，利用不同的模拟程序，考察比较不同模拟模型预言的 WHIM 气体的分布。特别是利用 ELUCID 重构的近邻宇宙初始条件，可以得到与近邻宇宙星系、星系群更加接近的数值模拟。

在利用模拟数据构建 soft X-ray 的模拟图像和光谱分布方面(3),厦门大学和清华大学已经开展了部分工作，并将利用国内外最新的流体数值模拟数据，针对 HUBS 的初步设计，构建模拟图像和星表。同时，这些数据也将为 HUBS 的仪器指标设计提供进一步科学依据和理论指导。