

doi: 10.3969/j.issn.1000-8349.2016.04.02

行星形成数值模拟的研究现状与未来需求 I: 原行星盘中的气体与尘埃动力学

白雪宁

(理论与计算研究所 哈佛-史密松天体物理中心, 剑桥 02138, 美国)

摘要: 行星在气态的原行星盘中形成, 而行星形成的全过程几乎都与原行星盘中气体与尘埃的动力学密不可分。原行星盘中气体与尘埃的动力学过程涉及包括非理想磁流体、化学、热辐射、非热辐射、空气阻力等诸多效应的作用以及它们之间的相互耦合, 因而关于行星形成问题的研究往往需要进行数值模拟, 并对计算工具有着很高的要求。对研究行星形成问题所涉及的物理过程进行概述, 简要介绍这些研究中主要使用的数值方法/算法, 以及国际上与之相关的最新进展。最后, 对未来行星形成领域的发展及其对数值工具的需求作以展望。

关键词: 数值方法; 原行星盘; 磁流体力学; 辐射转移; 天体化学; 不稳定性; 系外行星
中图分类号: P134 **文献标识码:** A

1 引言

近 20 年以来, 天文学家对系外行星的探测取得了长足的进展, 尤其在开普勒望远镜升空后, 已知的系外行星数目获得了前所未有的快速增长^[1]。系外行星系统呈现出很多异于太阳系行星系统的多样性, 这也令人们对行星及行星系统的形成、演化以及特性燃起极大的热情。然而, 相对于行星的探测, 关于行星形成的理论研究在基础层面上始终存在很多未解疑团, 从而在根本上妨碍了我们对行星形成及其后继演化的基本认识。尽管通过唯象理论能够在一定程度上解释观测结果, 但这些解释往往很难令人完全信服。

行星在原行星盘 (protoplanetary disk, 简称 PPD) 中形成。PPD 是恒星形成初期围绕原恒星运动的气体盘, 其质量约为恒星质量的 1%, 尺度在几十到几百天文单位 (AU), 存在时间尺度在几百万年^[2]。PPD 中大约 1% 的质量是尘埃, 这些尘埃则是形成行星的“原材料”。行星的形成大致可分为尘埃生长、星子形成、星子生长、核吸积等几个阶段^[3]。与此同

收稿日期: 2016-09-01; 修回日期: 2016-09-20

资助项目: 哈佛大学理论与计算研究所

通讯作者: 白雪宁, xbai@cfa.harvard.edu

时, 行星 (胚胎, 亦称核) 同气体盘的相互作用会导致行星的迁移。所有这些阶段均在 PPD 中完成, 而 PPD 的结构与演化, 以及其中发生的物理过程 (尤其是盘中气体的大尺度运动及湍流的强度), 则对行星的形成产生直接的影响, 甚至起到决定性的作用。

PPD 中的角动量转移机制, 包括盘中的不稳定性与湍流, 是决定结构和演化的核心问题。在这里, 磁场扮演着至关重要的角色: 目前的研究表明角动量转移几乎必须由磁场的作用主导^[4]。由于盘中的电离率很低, 盘的热力学与化学过程决定了磁场与气体的耦合程度, 进而影响其气体动力学。同时, 热力学与化学过程直接决定了盘的观测特征, 并直接关乎新形成行星的组成成分。尘埃在 PPD 中扮演多重角色。一方面, 它们通过碰撞粘合而最终成为行星形成的基本组分; 另一方面, 尘埃通过其不透明度影响盘的辐射转移及热力学, 同时尘埃也是很多化学作用的载体。

总之, 行星形成同 PPD 中气体与尘埃的动力学密切相关, 其中的物理过程又涉及到盘内外的磁场、辐射, 以及宇宙线同气体与尘埃的耦合与相互作用。由于问题的复杂性, 行星形成的基础性研究对磁流体数值模拟有强烈的需求, 辅之以辐射转移的计算。本文为中国科学院数学学部“天体辐射磁流体学”学科发展战略研究项目^[5]关于行星形成方向调研的第一篇综述。本文主要的关注点在于 PPD 的气体动力学与尘埃动力学, 它们是研究行星形成的基础。本文中关于尘埃动力学的介绍主要适用于行星形成的早期阶段。由余聪撰写的第二篇文章将主要关注于行星形成的后续阶段。

2 原行星盘的数值模拟

PPD 气体动力学的 MHD 数值模拟有十多年的历史。早期的数值模拟以局部剪切盒子 (shearing-box) 模拟为主, 而近十年中更多全局模拟不断涌现。推动这个领域发展的原动力来自更多的物理效应的相继引入。尽管距最真实的数值模拟仍有很大差距, 这些数值模拟已经使我们对 PPD 气体动力学的理解有了进一步的认识。这里我们仅对这些模拟涉及的物理过程和数值算法作简要介绍, 关于物理图像和数值模拟较为全面的综述可参考文献 [4]。

2.1 基本物理过程

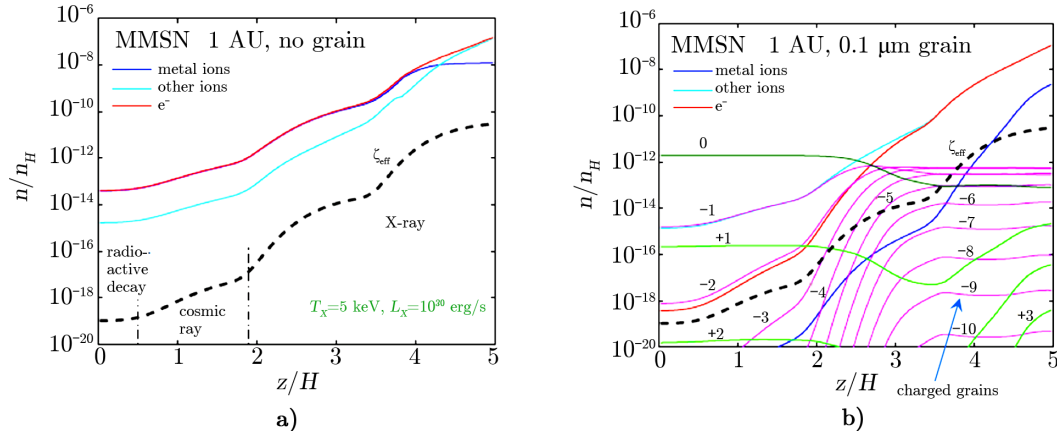
由于磁场在 PPD 演化过程中所起的主导作用, PPD 气体动力学最重要的物理效应来自于磁场与气体的耦合: 它涉及盘中电离与复合的化学过程。此外, 盘的热力学在很多方面直接影响 PPD 的观测性质, 对气体动力学也有一定影响。

2.1.1 化学过程

PPD 的温度一般远低于天体物理中广泛讨论的吸积盘 (如黑洞, 活动星系核周围的吸积盘), 这使得 PPD 中几乎不存在热电离 (靠近原恒星的区域除外, 那里碱金属会被热电离)。PPD 绝大部分区域的电离往往依赖于非热过程, 包括宇宙线、原恒星发出的 X 射线, 以及远紫外辐射等。宇宙线与 X 射线主要作用于中性氢分子并将其电离, 而远紫外则可将诸如碳、硫原子完全电离, 同时将一些分子解离为原子。这些反应将触发 PPD 中的一系列化学反应 (更详细的讨论可参考综述文献 [6])。一部分反应的时标较短, 使得系统很快趋于近似

化学平衡态。这里最重要的情形是，由于尘埃的存在，电子与离子可通过尘埃更快地实现复合，大幅降低 PPD 的电离程度。另一部分化学反应时标较长，尤其是在低密低温的外盘区域，可使得盘中化学成分在行星形成的过程中存在长期演化。

与气体动力学最相关的化学过程是电离与复合过程。如图 1 所示，PPD 中的电离率随高度增加，但总体的电离程度非常低。当尘埃丰度高于电离度时，尘埃对电离度起决定性影响。



注：虚线为电离速率 (单位: s^{-1})。a) 为不考虑尘埃的计算结果；b) 则在计算中加入另 $0.1 \mu\text{m}$ ，与气体质量比为 0.01 的尘埃。高度以盘的标高 (H) 为单位。

图 1 标准 PPD 模型在半径 1 AU 处的主要化学成分的丰度随高度的变化 (实线)^[7]

2.1.2 非理想磁流体效应

极低的电离度使得盘中的气体与磁场的耦合大大减弱，使得理想磁流体假设不再适用于 PPD，而引入了非理想磁流体效应。这些效应包括欧姆电阻、霍尔效应和双极性扩散 (ambipolar diffusion)。这些效应直接影响磁场的演化，体现在感应方程中：

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla \times \left[\frac{4\pi\eta}{c} \mathbf{J} + \frac{\mathbf{J} \times \mathbf{B}}{en_e} - \frac{(\mathbf{J} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B}}{c\gamma\rho\rho_i} \right], \quad (1)$$

这里下标 e, i 分别代表电子和离子， γ 为离子与中性分子的动量交换系数 (此方程适用于无带电尘埃的情形，但更一般的情形与之类似)。这三种非理想磁流体效应的强度同电离度成反比，即电离度越低，它们越重要。另外，霍尔效应和双极性扩散的系数分别正比于 (\mathbf{B}/ρ) 和 $(\mathbf{B}/\rho)^2$ ，即表明随着密度的降低 (以及磁场强度的升高)，这两项将越来越占主导。

在 PPD 中，极低的电离度以及电子/离子与中性分子的碰撞十分频繁，使得带电粒子所获得的洛伦兹力可有效地传递给整个流体，于是磁流体力学的其他方程不受影响。

2.1.3 辐射与热力学

与传统吸积盘不同的是，PPD 的加热主要是原恒星的热辐射而非吸积过程产生的耗散。原恒星热辐射主要由盘中尘埃吸收，其能量一部分通过碰撞传给气体，其余的能量在更长

的波段辐射出来。通过热平衡条件, 以及垂直方向上的流体静力学平衡, 可以较为自恰地得到盘在任意半径处的温度, 以及盘的整体结构。一般来说, 盘的结构是向外展开的 (flared), 这种几何形状使得盘能较为有效地截获原恒星辐射^[8]。由于对盘的加热来自表面, 通过更细致的辐射转移计算可发现, 盘中垂直方向存在一定温度梯度: 盘中心平面 (midplane) 温度最低。

更高能的辐射 (紫外与 X 射线) 的辐射转移则更为复杂, 也有更多的不确定性。这是因为一方面它们同盘中的化学过程直接相关, 另一方面紫外线最容易被微小的尘埃所吸收, 而这些尘埃在盘表面的丰度是相当不确定的。在低密度的盘表面, 尘埃同气体分子/原子碰撞频率低, 致使冷却效率低的气体温度高于尘埃。另外, 由于电离作用与光致解离, 气体物态在盘表面会发生从分子 (盘主体) 到原子层 (光致解离所致) 最后再被全部电离 (极紫外辐射所致) 的过渡。通过 X 射线辐射转移与光化学过程的计算发现, PPD 的表面会被强烈加热到很高 ($10^3 \sim 10^4$ K) 的温度, 并使盘表面的气体出现光致蒸发 (photoevaporation)^[9-11]。

2.2 原行星盘的气体动力学

2.2.1 基本物理图像

如前所述, PPD 不同的区域占主导的物理效应随着温度、密度和电离度的变化而不同。图 2 给出盘中不同区域需要考虑的物理效应的一个粗略的归类 (如蓝色文字标示)。截至目前, 没有任何一个区域的物理图像是被完全了解清楚了。在大约 1 AU 以内盘的最内部区域由于温度快速升高, 涉及热电离 (大约 800 K 以上)、尘埃升华 (约 1 500 K 以上) 等对温度极其敏感的物理过程。继续向内, 又涉及盘被原恒星磁场截断, 吸积流被加载到恒星磁力线等现象。应当说, 这部分区域是人们最感兴趣 (因为目前能找到的绝大部分系外行星轨道都在 1 AU 以内), 也是人们对 PPD 的认识最有限的区域 (太多的物理效应均耦合在一起, 相互关联)。稍靠外一些, 各物理效应的主次轻重更为鲜明, 有助于将其进行分离, 逐一研究后再合而为一。目前这方面的研究工作主要处在第一阶段, 并取得了相当的进展。我们把这些工作归入磁化和非磁化两个类别, 在下面两小节分别进行介绍。

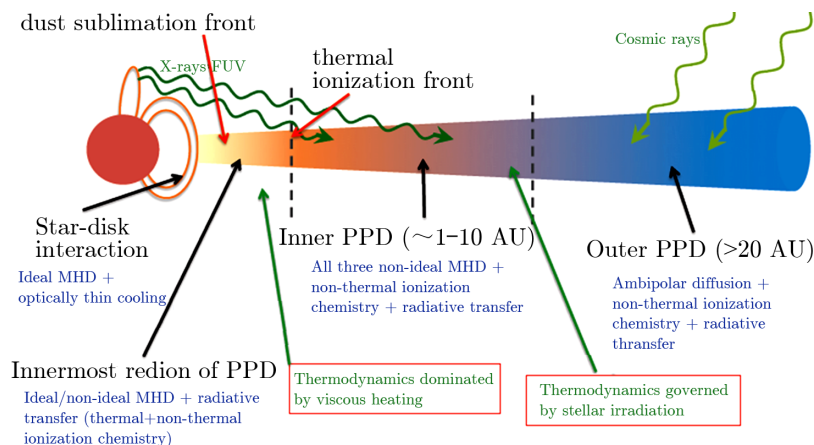


图 2 PPD 中不同的区域由不同的物理效应主导

2.2.2 磁转动不稳定性与磁盘风

磁化的吸积盘通常被认为具有磁转动不稳定性 (MRI)^[12], 其演化到非线性阶段饱和后使得吸积盘中的气流成为湍流, 同时径向向外转移盘的角动量, 驱动吸积过程。然而, MRI 要求磁场与气体有足够的耦合, 即盘的电离度要足够高。PPD 极低的电离率极大改变了 MRI 的性质, 甚至完全抑制 MRI (详见综述 [4] 及其中的引文)。直到近期, MHD 的数值模拟才能够同时加入所有的非理想磁流体效应^[13-19], 所获得的基本图像如图 3 所示。这些研究得到的最核心的结论是: PPD 必须具有外加垂直于盘面的磁场。可以预期, 这些磁场由恒星形成过程中的分子云继承而来。它们的存在使得 PPD 可有效地通过磁盘风转移角动量, 并且如果 MRI 不被抑制, 能够增加 MRI 的强度。

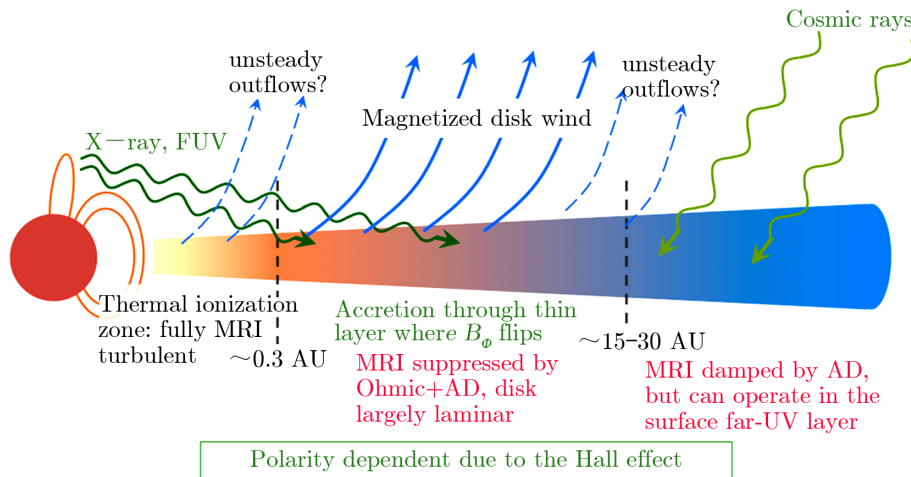


图 3 PPD 气体动力学的基本物理图像^[14]

这些研究在很大程度上改变了人们以往对 PPD 的认识 (即由 MRI 驱动的盘吸积与演化), 而尤其值得注意的有三点。第一, 总体而言, MRI 在内盘区域几乎完全被抑制, 而在盘外区则是部分被抑制, 仍有较弱的湍流活动。当然, 这个结果同盘化学十分相关, 仍需要进一步研究。第二, 即使磁盘风主导的盘角动量转移的思想的研究已有 30 多年的历史^[20], 之前几乎所有的数值模拟都没有恰当地处理 PPD 内的微观物理, 即加入真实的电离过程以及相应的非理想磁流体效应。第三, 霍尔效应使得盘的气体动力学取决于外加垂直磁场的极性 (即磁场方向与盘角速度的方向平行或反平行)。很长时间以来, 由于在数值上加入霍尔项存在不小的困难, 直到最近这方面的研究才真正起步。

2.2.3 非磁化流体的不稳定性

当 MRI 在很大程度上被抑制时, PPD 中的气体则表现为层流而非湍流。没有湍流的区域通常被称为“死区” (dead zone)。在这种环境里, 非磁化流体的不稳定性可能有机会形成 (如果存在 MRI, 这些不稳定性会被掩盖)。这些不稳定性包括: 垂直剪切不稳定性 (vertical-shear instability, 或称为 Goldreich-Schubert-Fricke 不稳定性^[21-23]), 对流过稳

定性 (convective overstability, 一度亦被称作 baroclinic 不稳定性^[24-27]), 僵尸涡旋 (zombie vortex) 不稳定性^[28,29] 等。与 MRI 不同的是, 激发这些不稳定性的自由能均与盘的热力学过程密切相关, 因此它们在盘中是否存在取决于盘中加热与冷却过程, 即要求较为准确的辐射转移计算。目前关于这些不稳定性的流体力学的数值模拟大都用了近似的热力学处理 (而非辐射转移) 来扫描参数空间, 这些研究表明, 这些不稳定性即使存在, 也不会形成很强的湍流^[21,29,30]。

2.3 数值方法

自恰地模拟 PPD 的气体动力学, 需要加入非理想磁流体效应与热力学 (包括辐射转移)。同时, 模拟必须考虑化学过程: 这些过程为非理想磁流体效应提供扩散系数, 并影响系统 (尤其是盘表面) 的加热/冷却速率。

2.3.1 化学反应

在 PPD 的盘内, 电离-复合化学平衡条件近似成立 (尤其是在考虑尘埃的情况下)^[7], 从而使得在计算中可假设化学平衡而采用事先算好的扩散系数表。目前关于 PPD 非理想磁流体力学的数值模拟均采用这种模式处理化学过程^[14-16,18]。一个例外是 Turner 等人的工作^[31], 他们在无尘埃的条件下在每个计算格点上同时演化一个小的化学反应链。他们大于 90% 的计算时间都花费在化学计算上。尽管其科学结果已过时, 但他们的研究表明, 只要有足够小的约化反应链, 在磁流体数值模拟计算的同时演化化学反应是可行的。

另外一个需要重点讨论的是盘表面的光化学过程, 尤其是紫外线主导的过程。由于过程的复杂性, 目前多数这样的计算并不涉及气体动力学, 而仅在垂直方向上假设流体静力学平衡。做这类计算常见的代码包括 ProDiMo, Krome, DALI 等。这些 (光) 化学过程只有同流体力学联合在一起才能自恰地模拟 PPD 的气体, 尤其是盘表面区域的动力学与热力学, 但这方面的尝试仍处于初级阶段, 尚未有文章发表。对于 X 射线主导的过程, 由于其主要用于原子层, 化学过程要简单得多, 可通过拟合而来的加热/冷却公式处理。这种方法已成功同流体力学数值模拟相结合, 应用于研究 PPD 的光致蒸发^[10]。

2.3.2 非理想磁流体效应

通常, 非理想磁流体效应可通过算符分离 (operator split) 的方式加入。其中, 加入欧姆电阻与双极性扩散最为直截了当。同时, 由于这两种效应为耗散项, 对应于物理中的扩散效应 (其算符是抛物型的), 可通过超级步进 (super timestepping) 进行加速。

霍尔效应尽管数学形式简单, 但它在数值计算中的实现却存在很大困难。这主要是由于霍尔项为色散项而非耗散项, 其对应的算符是双曲型的, 它使得沿磁力线传播的左旋与右旋阿尔文波传播方向偏离。对于霍尔效应, 直接运用显式的算符分离会导致算法无条件不稳定, 而如果用目前大多数 MHD 程序中采用的限制输运 (constrained transport, CT) 的方法来演化磁场, 则不适合用隐式算法来消除不稳定性 (因为 CT 方法本身是显式的)。现有的 MHD 程序实现霍尔效应的算法主要包括: 三阶容格-库塔方法 (用于采用谱方法的 Snoopy 程序^[32]), 方向分离方法 (仅边缘稳定, 用于 Athena 程序直角坐标^[15]), 以及将霍尔项直接加入黎曼解算子 (用于 Pluto 程序^[17])。其中前两者相对简单, 但适用范围有限; 后者最为健壮,

但只能用于最不精确,耗散最高的 HLL 黎曼解算子 (Riemann solver)。

此外值得注意的是,三种非理想磁流体效应已被加入近期开发出的两个 SPH-MHD 程序中,并应用于原恒星盘形成的数值模拟中^[33,34]。

2.3.3 辐射转移

目前 PPD 中辐射转移的计算几乎均采用后处理的方式,且它们几乎全部服务于同观测的比较。这些计算所用的代码全部基于蒙特卡洛方法,常见代码包括 LIME, RAD-MC, Torus, Mocassin, HOCHUNK 等。这些代码功能各有侧重,有的着重做尘埃连续谱的辐射转移为成像服务,有的则侧重谱线的辐射转移,有的侧重于高能波段等。蒙特卡洛方法虽然算法直截了当,且少有近似,但为得到准确结果其所需的计算量十分巨大,难以同流体动力学模拟同步进行。

目前关于 PPD 的辐射 (磁) 流体力学的数值模拟并不多。比较有代表性的工作包括用 Zeus 程序剪切盒子模拟盘的分层吸积 (layered accretion)^[35],用 Nirvana 程序做关于行星迁移的全局模拟^[36],以及用 Pluto 程序进行的 MRI 的全局模拟^[37]。这些数值模拟所用的辐射算法全部基于通量限制扩散 (Flux-limited Diffusion, FLD) 算法。这些模拟中辐射转移的计算仅限于尘埃的连续谱,而原恒星的照射 (irradiation) 则近似用光线追踪 (ray-tracing) 处理,或完全忽略,并非自恰 (散射被忽略)。另外,这些模拟中完全忽略盘表面的非热加热过程。

尽管仍存在很多不足,但这些数值模拟代表了目前的最高水平,自恰地实现 PPD 的辐射 (磁) 流体力学模拟仍是巨大的挑战。更准确的辐射转移算法包括短特征线 (short characteristic) 方法^[38],但它只适用于直角坐标,而 PPD 的全局模拟通常更适于采用柱坐标或球极坐标。直接解辐射转移方程的方法^[39]尽管可以适用于各种坐标系,但要求数值模拟能够分辨出光速,更适用于模拟黑洞吸积盘,但能否通过采用降低光速的办法将其应用于远非相对论性的 PPD,仍有待进一步论证研究。

2.3.4 局部与全局的数值模拟

很多 PPD 的动力学模拟采用局部剪切盒子 (local shearing-box) 的框架^[40]。局部剪切盒子最大的优势在于其通过忽略盘的曲率实现自恰地用直角坐标模拟盘局部的物理过程。这类模拟在过去 20 年中被大量采用,并取得了很大的成功。特别地,当新的物理效应被加入后,人们往往首先使用局部剪切盒子进行模拟,以避免由全局效应带来的不必要的复杂性 (如边界条件、径向梯度等)。

局部模拟的局限性也是显而易见的。首先,局部模拟对径向梯度的处理难以自恰地实现 (尤其是还要同时满足垂直方向上的盘结构)。第二,局部模拟的盒子高度必须远小于半径。当盘的演化由磁盘风主导时,局部模拟则无法得到风的全局性质。对 PPD 的全局模拟有一部分使用柱坐标,垂直方向不分层^[41,42]。这类模拟主要适用于研究在纯径向方向的物理过程。最终关于 PPD 全局结构的模拟则需要同时覆盖径向和垂直方向,球极坐标则更为适合。目前这类全局模拟在 θ 方向上皆是只覆盖到盘中心平面两侧较小的张角,对应于若干 (4~8) 个标高。然而,如要盘的动力学由磁盘风主导,那么自恰的动力学模拟需要能够覆盖整个磁盘风涉及的区域,这要求模拟的盒子在 θ 方向能够覆盖到极区。目前新的 MHD 程序

Athena++ 可以做到这一点，相关的工作正在展开。

3 尘埃动力学与星子的形成

尘埃的动力学直接涉及很多行星形成的过程。这里指的尘埃不仅包括星际空间中亚微米大小的星际尘埃，同时包括它们生长的产物，大到毫米厘米，甚至米级大小的固体颗粒在文献里也被广义地称作尘埃。本节重点分析这些尘埃同气体盘的相互作用，以及它们在行星形成中的应用。

3.1 基本方程与物理过程

尘埃同气体的基本作用即为空气阻力 (aerodynamic drag)。其作用力非常简单，即尘埃粒子受到的力与其同气体的相对速率成反比，其比例系数定义了停止时间 t_{stop} ：

$$F_{\text{drag}} = -M \frac{\Delta v}{t_{\text{stop}}} . \quad (2)$$

停止时间同粒子大小以及气体密度、温度有关。动力学角度更有意义的物理量是 $\tau = \Omega t_{\text{stop}}$ ，即无量纲化的停止时间。如果 τ 远大于 1，则说明尘埃粒子同气体的耦合很弱；而如果 τ 远小于 1，则表明尘埃粒子同气体存在强烈耦合。通常而言，1 cm 大小的粒子在 1 AU 附近是强烈耦合的 ($\tau \approx 10^{-3}$)，但到了外盘 (几十 AU) 则处于边缘耦合状态 ($\tau \sim 1$)。由于牛顿第三定律，尘埃对气体存在反馈，即气体受到反方向的力。同时，由于空气摩擦，这一过程会对气体有加热作用。

3.1.1 被动过程

在 PPD 中，由于尘埃所占的总质量只有约 1%，它们通常反馈作用很小，而只是被动地受到气体动力学的影响。其涉及的主要物理过程有三点。一是径向漂移 (radial drift)，这主要是由于气体盘在径向受到压强梯度的支持而以低于开普勒速度转动；而尘埃粒子不受气体压强梯度影响，仍倾向于以开普勒速度运动，从而在盘中迎风而行，损失角动量。二是垂直方向的沉积 (settling)，这是由于当尘埃偏离盘中心平面时会感受到原恒星引力在垂直方向分量的作用从而向盘中心平面运动。三是湍流扩散 (turbulent diffusion)，这是粒子受到盘中气体的湍流而产生的扩散，而扩散系数则会随粒子同气体耦合程度不同而偏离气体在湍流中的扩散系数。

注意到粒子的径向漂移速率直接取决于 PPD 的结构 (径向的压强梯度)，并且其垂直方向沉积的程度取决于盘中湍流的强度 (如无湍流则所有尘埃最终将完全沉积到中心平面)，可见盘的气体动力学过程在很大程度上直接决定了尘埃的演化。另外，关于径向漂移的讨论可推广为，粒子永远向压力高的区域运动。其他可产生局部高压强的物理过程 (比如涡旋) 均可使尘埃粒子聚集。

3.1.2 反馈过程

当湍流较弱的情况下，尘埃可以有显著的沉积，从而使得在盘中心平面附近，尘埃的密度可能接近甚至超过气体密度。这时，尘埃对气体动力学的反馈作用变得十分显著，并可使

尘埃层附近的气体产生开尔文-亥姆霍兹不稳定性 (KHI)^[43]。如果尘埃能够在不触发 KHI 的情况下充分沉积, 则有可能触发尘埃层本身的引力不稳定性^[44,45], 而这种不稳定性由于尘埃与气体的密切耦合而有较长的增长时标 (可达 $10^4 \sim 10^6$ 年)。最有趣的是, 对于接近边缘耦合的粒子, 其在中心平面的聚集可触发所谓的穿流不稳定性 (Streaming instability)^[46]。在一些条件下, 这种不稳定性可产生自发聚集粒子的独特性质^[47]。以上这些反馈过程在研究星子 (planetesimal) 形成的问题中均有重要的影响。

3.2 数值方法

在基于格点的 MHD 程序里, 尘埃粒子可通过 particle-in-cell 的方式作为全新的数据结构引入, 通过标准的插值方式实现格点上的气体与自由运动的粒子之间的信息交换。这里的粒子亦被称作“超级粒子”, 即每个数值模拟中的粒子实际代表了成千上万个具有相同属性的真实粒子。粒子的运动遵循式 (2)。由于粒子同气体的耦合可强可弱, 粒子的轨道积分宜采用隐式算法, 以实现高效准确地处理任意停止时间的粒子^[48]。对于 Godunov MHD 程序, 可通过追踪粒子动量和能量的改变以在粒子的反馈作用中保证气体和粒子总的动量和能量的守恒。目前, 尘埃粒子通过这种方式已被写入很多 MHD 程序, 但包含粒子反馈作用的主要只有有限差分的 Pencil 程序^[47,49]和用 Godunov 方法的 Athena 程序^[48]。这主要是因为加入粒子反馈作用虽然直截了当, 但在技术上的实现较为繁琐。在此基础上, 粒子的自引力可通过快速傅立叶变换加入^[50,51]。

做带粒子的模拟在技术上的另一个难点是并行算法的负载平衡 (load balancing)。通常 MHD 格点在并行计算中很容易被均分, 进而实现负载平衡。由于每个粒子需要频繁同其所在位置附近的格点交流, 根据各粒子的位置分配给其对应 MHD 格点所属的 CPU, 该方法在技术上最为简洁。然而, 由于在数值模拟中粒子的密度分布可能十分不均匀, 这将导致少数 CPU 被分到大量的粒子, 而另一些 CPU 则只须进行少量粒子轨道积分, 严重影响并行效率。在 Pencil 程序中, 近期 Johansen 等人^[52]采用了新的粒子分配方法, 其代码复杂度大大提高, 但负载平衡性能得到了显著改善。

此外, 最近有的研究组将尘埃粒子加入到 SPH 程序中^[53,55]。由于 SPH 程序本身是基于粒子的, 加入尘埃粒子无须对代码本身作整体改动, 但其中仍有很多技术细节值得注意。当然, 由于 SPH 程序自身的局限性, 尤其是在不连续面的行为以及粒子噪声等 (比如盘中心平面与盘表面密度的巨大差异难以通过粒子方法准确实现), 加入尘埃粒子的 SPH 程序受到同样的局限性。

3.3 在行星形成中的应用

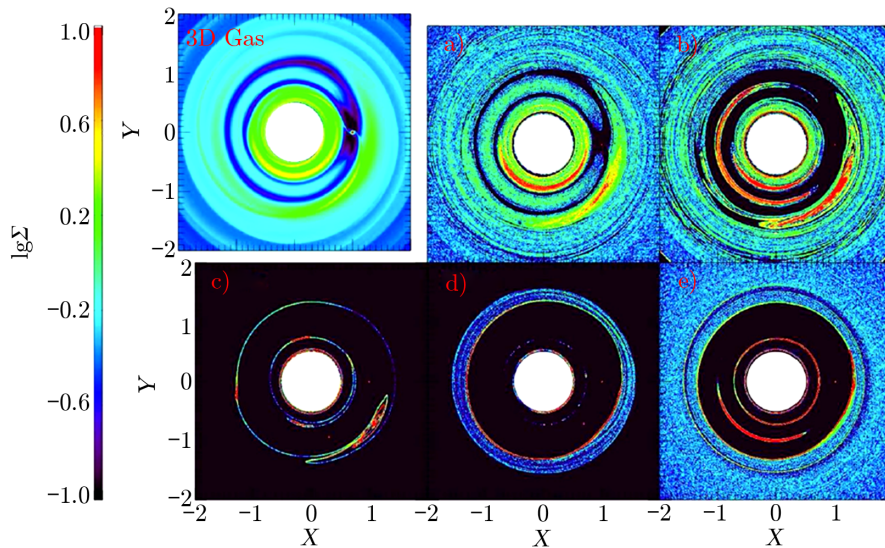
作为行星的基本构成单元, 尘埃粒子在行星形成中有着诸多重要的应用。这里介绍三个主要的应用方向。

3.3.1 尘埃粒子的输运

由于尘埃与气体并非完全耦合, 它们相对气体可存在大尺度的输运, 这种输运作用则直接影响形成行星原材料的原始质量分布。同时, 尘埃表面可吸附易挥发气体分子, 通过尘埃的输运作用实现易挥发气体的转移, 进而影响行星的元素组成。

前面提到过，最基本的输运作用包括径向漂移和湍流扩散。前者较为直截了当。对于湍流扩散，Carballido 等人^[55]和 Zhu 等人^[42]分别用 Athena 程序通过局部剪切盒子模拟和柱坐标非分层的全局模拟进行了研究，其中的湍流来自 MRI。等有了更真实的 PPD 气体动力学模拟后，加入尘埃粒子自恰地模拟粒子输运的过程将较为直截了当。

由于尘埃粒子有向高压强区域聚集的趋势，其空间分布则对盘的自身结构十分敏感。随着 ALMA 的运行，人们发现大量 PPD 在亚毫米波段具有很多精细结构，尤其普遍的是环与不对称结构^[56-58]。它们直接反应了毫米级大小尘埃的空间分布，进而暗示气体盘本身的精细结构。一个很好的案例来自较大质量的行星在 PPD 中形成密度间隙 (open a gap) 后尘埃对气体的反应^[59]。出现间隙后，在间隙外围的气体由于质量堆积而产生局部的压强极大值。如果盘中湍流很弱，气体盘的这种构型会触发罗斯比波不稳定性 (Rossby-wave instability)^[60,61]，最终形成一个巨大的涡旋，而涡旋中心对应于压强的极大值。图 4 显示出不同大小的尘埃向涡旋中心聚集的情况。可见几乎所有粒子均有聚集的趋势，而大小接近边缘耦合的粒子聚集程度最高，从而给出对观测结果的一种合理解释。



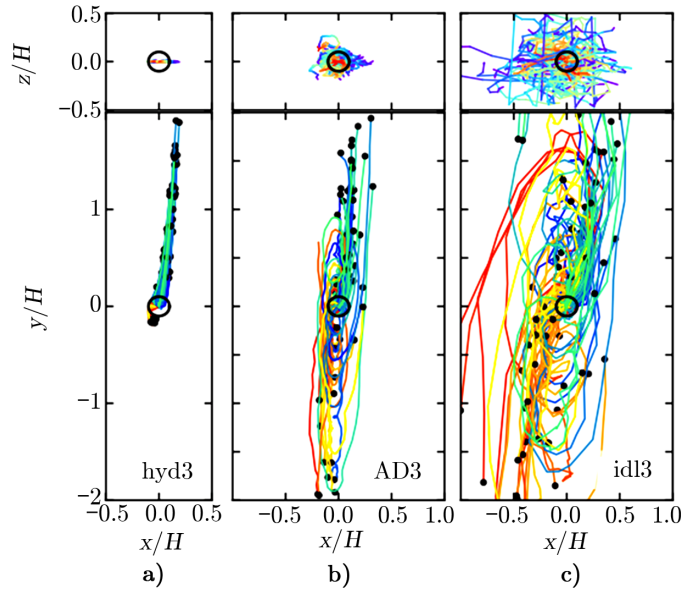
注：数值模拟中，行星质量为 5 个木星质量，位于 $R = 1$ 处，等效于实际中的 20 AU。左上图为行星转动 200 圈后的气体面密度分布，其余 5 张图为 5 种不同大小的粒子面密度分布。粒子大小由 a) 至 e) 依次增大 10 倍，其中 c), d) 的粒子大小接近边缘耦合状态。

图 4 行星-气体盘相互作用的无粘滞非磁化流体+尘埃粒子的 3D 数值模拟结果^[59]

3.3.2 “石砾”吸积 (pebble accretion)

传统理论认为，行星的固态核在生长的过程中以吸积千米以上大小的星子为主，但在这种理论框架下，行星核增长速度随行星轨道半径的增加而急速下降，无法解释某些观测到的轨道半径较大 (几十 AU) 的类木系外行星。2012 年，Lambrechts 和 Johansen^[62]提出，行星在生长过程中通过吸积 PPD 里毫米至厘米大小尘埃 (形象地称为“石砾”) 会极大提高其增

长效率, 并获得广泛的认同。石砾吸积涉及行星附近的气体动力学, 尤其在存在湍流时, 或者当行星对气体盘有较大扰动时, 需要通过高分辨率的数值模拟才有望很好地捕捉到相关的物理过程。图 5 显示了最近我们关于石砾吸积所做的局部数值模拟结果, 可见对于盘中不同强度的湍流, 粒子的吸积过程显著不同, 通过这类细化的模拟, 可有效标定石砾吸积的效率以服务于行星形成的理论模型。



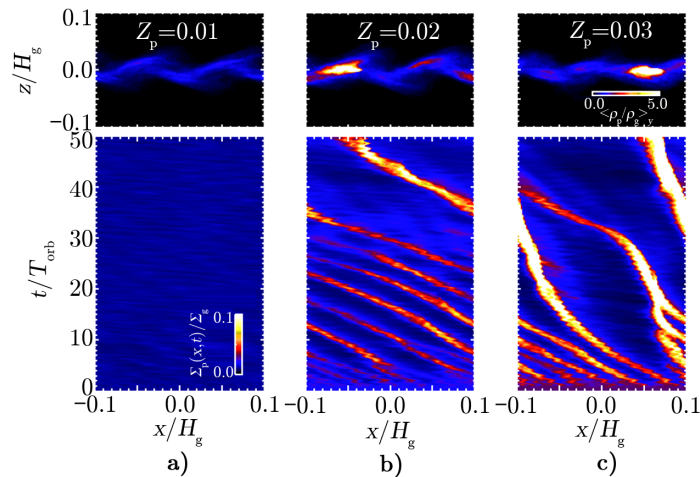
注: 模拟设定于距中心恒星 30 AU 处, 行星胚胎质量为 $0.5 M_{\oplus}$, 粒子大小对应于无量纲停止时间 $\tau = 0.1$ 。从 a) 到 c) 分别为无湍流、弱湍流 (有双极性扩散扩散下的 MRI) 和强湍流 (理想磁流体中的 MRI)。

图 5 在不同程度湍流情形下的被行星吸积的粒子在水平面 (下) 和垂直面 (上) 的轨迹^[63]

3.3.3 星子形成 (planetesimal formation)

之前提到, 星子形成涉及 PPD 中的固体由毫米/厘米量级到千米以上量级的增长, 是行星形成中目前了解最少的一步。这一大小范围的粒子同气体的耦合由开始的强耦合或边缘耦合到星子的弱耦合, 因此不管星子具体的形成机制是什么, 空气阻力在其中必定扮演十分重要的角色。目前关于星子形成的主导理论是之前提到的穿流不稳定性 (streaming instability)。对于这种不稳定性, 不仅是空气阻力, 粒子对气体的反馈亦起到决定性的作用。图 6 为局部剪切盒子中对这一不稳定性的流体力学模拟 (无磁场无外界湍流)^[64]。其结果表明, 能否通过穿流不稳定性形成星子取决于盘中边缘耦合的尘埃粒子丰度是否充足, 通常需要达到较为苛刻 (约 2%~3%) 而非标准值 (约 1%) 才可有效形成星子。此外, 星子形成还与粒子大小分布与盘的结构密切相关^[65,66]。

目前关于星子形成的数值模拟基本限于局部剪切盒子和非磁化流体的框架下进行, 而更真实的盘气体动力学在这些模拟中尚未能有效体现出来。这主要是由于星子形成的数值模拟需要很高的空间分辨率, 而局部剪切盒子又无法很好体现 PPD 的整体结构。目前, 人们不



注：下图为粒子面密度的空间（径向）-时间图，上图为模拟最后时刻盘中粒子在垂直方向上的密度分布。从 a) 到 c) 分别对应于粒子丰度为 0.01, 0.02 和 0.03 的数值模拟。

图 6 星子形成的局部剪切盒子数值模拟^[64]

清楚星子形成所需要较苛刻的条件在 PPD 中是否能满足，但可以预期的是，关于星子形成的研究将受益于对 PPD 气体动力学本身的深入研究。在最真实的气体动力学背景下研究星子形成，则可能成为解决这一疑难的重要突破口。

4 未来需求与小结

最后，我们简单讨论未来在行星形成，尤其是 PPD 气体与尘埃的动力学方面对数值算法的需求。

(1) 关于 MHD 代码的基本框架。

我们需要基于格点的 Godunov 方法，而非基于粒子的 SPH 算法，以保证守恒律得到满足，并且具有良好的捕捉不连续面的性能。较为理想的框架为带球坐标系的固定网格（而非移动网格，moving mesh），因为其能够更好地保证角动量守恒，同时拥有足够灵活的坐标系以及静态或自适应加精的功能以便局部高分辨率。磁场的处理应采用限制输运 (CT) 算法以避免不必要的散度误差。目前，即将发布的 Athena++ 程序具备这些功能。当然，移动网格流体力学^[67]作为近年来兴起的重要数值方法，以其巨大的灵活性以及“自带”自适应的功能非常有吸引力，已经被广泛应用在大量数值模拟中（尤其是星系的数值模拟），其在处理具有复杂结构的系统时（如双星系统中的行星形成，或大质量行星在盘中打开间隙后在其周边形成的吸积盘，circumplanetary disk）具有明显优势。最近，CT 算法亦被成功引入移动网格^[68]，清除了其处理磁化流体应用问题的重要障碍，值得关注。

(2) 关于 MHD 部分需要引入的额外物理效应。

首先, 需要加入所有三种非理想磁流体效应。前面讲到, 其中霍尔效应的算法有待改进。其次, 需要加入辐射转移。之前讲到, 非相对论性流体在非直角坐标下与流体演化同步做辐射转移是尚未完全解决的问题。同时, 由于问题涉及多个波段的辐射, 且各波段涉及的物理又很不相同, 也许并没有一劳永逸的普适方法, 研究不同的问题可能需要不同的处理。再者, 需要加入化学反应, 最理想的情形是与流体同步演化的(含时)化学反应。为此, 需要开发高度约化又不失可靠性的化学反应网络, 以及有效的隐式积分化学反应网的工具。最后, 需要加入自引力。尽管自引力在直角坐标系及周期性条件下可直接使用快速傅立叶变换, 但 PPD 模拟进一步要求能够开发各种坐标系及自适应网格下有效计算自引力的数值方法(比如 multi-grid 方法)。

(3) 需要加入尘埃粒子。

结合此前文中的讨论, 现有 MHD 程序中加入了的尘埃粒子模块并不能满足未来的需求。下一步主要的发展则需要使粒子模块同静态或自适应的加精网格的兼容。由于同时需要加入粒子反馈作用, 开发工作将具有不小的技术难度, 目前尚未有 MHD 程序做到这一点。同时, 如何处理负载均衡的问题则是另一个技术难点。此外, 某些物理问题还涉及粒子间的自引力和碰撞作用。

总之, 行星形成的基础理论研究对 RMHD 程序的功能有很高的要求, 而绝大多数现有的 MHD 程序已不能满足日益增长的研究需求。目前这一科学领域的发展水平受到数值计算工具的制约, 抑或可以说, 目前的学科发展已将现有数值计算工具的使用推向了极致。开发新的 RMHD 程序需要大量的人力物力。一方面应当充分学习和借鉴现有 RMHD 程序; 另一方面应充分调研相关领域的重要未解决的问题, 总结未来的需求。这也是本文内容所涉及的两方面。此外, 还应同高性能计算领域的发展相结合, 以使新开发的程序能够充分利用该领域的成果, 尤其是与 GPU、协处理器的兼容性等。开发 RMHD 程序最终要为科学服务, 而做科学的同时则可训练开发代码及相关工具的能力。通常, 开展科学研究的条件在开发出基础版本后便已经具备, 此后则可通过研发一体的方式, 首先在程序中引入核心物理效应, 并逐步引入更多物理过程, 循序渐进, 才能在实践和学习中不断突破, 持续发展。

参考文献:

- [1] Winn J N, Fabrycky D C. *ARA&A*, 2015, 53: 409
- [2] Williams J P, Cieza L A. *ARA&A*, 2011, 49: 67
- [3] Armitage P J. *Astrophysics of Planet Formation*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010: 294
- [4] Turner N J, Fromang S, Gammie C, et al. in *Protostars and Planets VI*. Arizona: University of Arizona Press, 2014: 411
- [5] 汪景琇, 袁峰, 陈鹏飞, 等. *天文学进展*, 2016, 34: 365
- [6] Henning T, Semenov D. *Chemical Reviews*, 2013, 113: 9016
- [7] Bai X N. *ApJ*, 2011, 739: 50
- [8] Chiang E I, Goldreich P. *ApJ*, 1997, 490: 368
- [9] Gorti U, Hollenbach D. *ApJ*, 2009, 690: 1539

-
- [10] Owen J E, Ercolano B, Clarke C J, et al. *MNRAS*, 2010, 401: 1415
- [11] Walsh C, Nomura H, Millar T J, et al. *ApJ*, 2012, 747: 114
- [12] Balbus S A, Hawley J F. *ApJ*, 1991, 376: 214
- [13] Bai X N, Stone J M. *ApJ*, 2013, 769: 76
- [14] Bai X N. *ApJ*, 2013, 772: 96
- [15] Bai X N. *ApJ*, 2014, 791: 137
- [16] Bai X N. *ApJ*, 2015, 798: 84
- [17] Lesur G, Kunz M W, Fromang S. *A&A*, 2014, 566: A56
- [18] Gressel O, Turner N J, Nelson R P, et al. *ApJ*, 2015, 801: 84
- [19] Simon J B, Lesur G, Kunz M W, et al. *MNRAS*, 2015, 454: 1117
- [20] Blandford R D, Payne D G. *MNRAS*, 1982, 199: 883
- [21] Goldreich P, Schubert G. *ApJ*, 1967, 150: 571
- [22] Fricke K. *Zeitschrift fur Astrophysik*, 1968, 68: 317
- [23] Nelson R P, Gressel O, Umurhan O M. *MNRAS*, 2013, 435: 2610
- [24] Klahr H H, Bodenheimer P. *ApJ*, 2003, 582: 869
- [25] Lesur G, Papaloizou J C B. *A&A*, 2010, 513: A60
- [26] Klahr H, Hubbard A. *ApJ*, 2014, 788: 21
- [27] Lyra W. *ApJ*, 2014, 789: 77
- [28] Marcus P S, Pei S, Jiang C H, et al. *Physical Review Letters*, 2013, 111: 084501
- [29] Marcus P S, Pei S, Jiang C H, et al. *ApJ*, 2015, 808: 87
- [30] Raettig N, Lyra W, Klahr H. *ApJ*, 2013, 765: 115
- [31] Turner N J, Sano T, Dziourkevitch N. *ApJ*, 2007, 659: 729
- [32] Kunz M W, Lesur G. *MNRAS*, 2013, 434: 2295
- [33] Tsukamoto Y, Iwasaki K, Okuzumi S, et al. *ApJL*, 2015, 810: L26
- [34] Wurster J, Price D J, Bate M R. *MNRAS*, 2016, 457: 1037
- [35] Hirose S, Turner N J. *ApJL*, 2011, 732: L30
- [36] Bitsch B, Crida A, Morbidelli A, et al. *A&A*, 2013, 549: A124
- [37] Flock M, Fromang S, González M, et al. *A&A*, 2013, 560: A43
- [38] Davis S W, Stone J M, Jiang Y F. *ApJS*, 2012, 199: 9
- [39] Jiang Y F, Stone J M, Davis S W. *ApJS*, 2014, 213: 7
- [40] Hawley J F, Gammie C F, Balbus S A. *ApJ*, 1995, 440: 742
- [41] Sorathia K A, Reynolds C S, Stone J M, et al. *ApJ*, 2012, 749: 189
- [42] Zhu Z, Stone J M, Bai X N. *ApJ*, 2015, 801: 81
- [43] Weidenschilling S J. *Icarus*, 1980, 44: 172
- [44] Youdin A N. *ApJ*, 2011, 731: 99
- [45] Takahashi S Z, Inutsuka S i. *ApJ*, 2014, 794: 55
- [46] Youdin A N, Goodman J. *ApJ*, 2005, 620: 459
- [47] Johansen A, Youdin A. *ApJ*, 2007, 662: 627
- [48] Bai X N, Stone J M. *ApJS*, 2010, 190: 297
- [49] Youdin A, Johansen A. *ApJ*, 2007, 662: 613
- [50] Johansen A, Oishi J S, Mac Low M M, et al. *Nature*, 2007, 448: 1022
- [51] Simon J B, Armitage P J, Li R, et al. *ApJ*, 2016, 822: 55
- [52] Johansen A, Klahr H, Henning T. *A&A*, 2011, 529: A62
- [53] Laibe G, Price D J. *MNRAS*, 2012, 420: 2345
- [54] Lorén-Aguilar P, Bate M R. *MNRAS*, 2014, 443: 927
- [55] Carballido A, Bai X N, Cuzzi J N. *MNRAS*, 2011, 415: 93
- [56] van der Marel N, van Dishoeck E F, Bruderer S, et al. *Science*, 2013: 340, 1199
- [57] ALMA Partnership, Brogan C L, Pérez L M, et al. *ApJL*, 2015, 808: L3
- [58] Andrews S M, Wilner D J, Zhu Z, et al. *ApJL*, 2016, 820: L40

- [59] Zhu Z, Stone J M, Rafikov R R, et al. ApJ, 2014, 785: 122
- [60] Lovelace R V E, Li H, Colgate S A, et al. ApJ, 1999, 513: 805
- [61] Li H, Finn J M, Lovelace R V E, et al. ApJ, 2000, 533: 1023
- [62] Lambrechts M, Johansen A. A&A, 2012, 544: A32
- [63] Xu Z, Bai X N, Murray-Clay R. ApJ, 2016, to be submitted
- [64] Johansen A, Youdin A, Mac Low M M. ApJL, 2009, 704: L75
- [65] Bai X N, Stone J M. ApJ, 2010, 722: 1437
- [66] Bai X N, Stone J M. ApJL, 2010, 722: L220
- [67] Springel V. MNRAS, 2010, 401: 791
- [68] Mocz P, Pakmor R, Springel V, et al. MNRAS, 2016, 463: 477

The Current Status and Future Perspectives on Numerical Simulations of Planet Formation I: Gas and Dust Dynamics in Protoplanetary Disks

BAI Xue-ning

(Institute for Theory and Computation, Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge 02138, USA)

Abstract: Planets form in gaseous protoplanetary disks (PPDs), and almost every aspect of planet formation is closely related to the dynamics of gas and dust in PPDs. The gas and dust dynamics in PPDs involve many physical processes including non-ideal magnetohydrodynamics, chemistry, thermal and non-thermal radiation, aerodynamic drag, etc., as well as their coupling among each other. Planet formation research thus generally requires numerical simulations with high demand on the capability of the computational tools. We briefly summarize the basic physical processes that need to be incorporated in the study of planet formation, the numerical tools/algorithms needed to capture these effects, and the latest progress made in the field. Finally, we discuss the future perspectives of the field and the desire for new advancement in computation tools.

Key words: numerical methods; protoplanetary disks; magnetohydrodynamics; radiative transfer; astrochemistry; instabilities; exoplanets