拓扑流体力学及其新近发展

关昊¹, ZUCCHER Simone², RICCA Renzo L.^{3,4}, 刘鑫^{1,4*}

1. 北京工业大学理论物理研究所, 北京 100124;

2. 维罗纳大学计算机科学系, 维罗纳 37134;

3. 米兰-比可卡大学数学与应用系, 米兰 20125;

4. 北京工业大学北京-都柏林国际学院, 北京 100124

*联系人, E-mail: xin.liu@bjut.edu.cn

收稿日期: 2019-04-02; 接受日期: 2019-07-01; 网络出版日期: 2020-01-02

国家自然科学基金(编号: 11572005)和北京市自然科学基金重点项目(编号: Z180007)资助

摘要 拓扑流体力学是理性力学的一个重要研究方向, 在理论上具有重要价值, 在实践中日益显出独特的作用. 本文试对该方向进行综述性介绍, 目的是吸引更多的国内科研工作者进入这一重要领域. 本文的重点放在流体螺度(Helicity)的拓扑内涵方面. 除了列出螺度与数学纽结场论的关系(即与互缠绕、自缠绕数以及作者近年来发展出来的流体纽结多项式拓扑不变量之间的关系), 还介绍了国际上在流体纽结复杂系综的能量-结构复杂性关系方面的研究. 最后, 通过超流涡旋纽结/链环重联的具体实例, 展示了这一领域当中典型的数值计算方法. 我们希望通过这种理论推导与数值计算同时呈现的方式, 使读者对这一国际前沿交叉领域的核心问题、研究方法以及科研中可能面对的技术困难获得一个整体的了解和把握.

关键词 理性流体力学中的数学方法, 拓扑流体力学, 流体螺度, 流体纽结拓扑不变量, 能量-结构复杂性关系, 数值模拟, 超流体量子涡旋的重联

PACS: 47.10.-g, 47.10.A, 47.27.-i, 47.37.+q, 02.40.-k

1 引言

拓扑流体动力学在国际上一直是理性流体力学领域一个重要的研究方向; 但在国内一直未得到应有的重视, 相关工作不多, 盖因它与工程技术应用之间的结合并不紧密、不容易直接用于实践. 有鉴于科学理论自身的规律, 以及该方向近年来在实用上越来越体现出重要价值——比如对涡旋复杂系统与

湍流问题的研究有所助益——本文希望对此方向进行简单综述介绍, 以期有更多国内读者能够进入这一领域, 后续做出重要的工作. 我们的重点将放在流体螺度与纽结场论的关系. 除了罗列出主要的理论结果, 还将关注其与能量等动力学量的关系, 以及通过具体实例展示一些相关的数值计算方法. 目的是通过理论与数值方法的同时呈现, 读者能获得对本领域核心问题 and 研究思路的直观了解.

引用格式: 关昊, Zuccher S, Ricca R L, 等. 拓扑流体力学及其新近发展. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 054701

Guan H, Zuccher S, Ricca R L, et al. Topological fluid mechanics and its new developments (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2020, 50: 054701, doi: [10.1360/SSPMA-2019-0101](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2019-0101)

第2节首先简要回顾拓扑流体力学百年来的发展历程, 突出数学上的抽象拓扑方法与物理上的流体自身微结构之间的本质关联. 第3节着重讨论螺度的拓扑内涵. 首先列出螺度与拓扑上的纽结互、自缠绕数之间的关系并给出相关的证明, 以展示当中的理论精髓和思想飞跃. 其次列出本文作者近年来发展出的用纽结多项式不变量来研究流体螺度拓扑的方法, 重点放在经典和量子场论技巧在螺度研究中的重要借鉴作用. 第4节介绍国际上关于流体纽结拓扑复杂度以及能量-结构复杂性关系的研究; 引入这一节的原因是系统的拓扑变化往往伴随着能量等主要动力学性质的变化, 从而拓扑学因素成为能量研究中的重要参考坐标. 该节还包括国际上新观察到的级联退化现象以及我们在这方面的初步工作和进一步的思路.

之后我们转向相关数值模拟与检验技巧的介绍, 主要是对超流涡旋纽结/链环重联相互作用的模拟检验. 首先在第5节给出超流涡旋系统的主控方程, 即Gross-Pitaevskii方程, 给出其流体力学绘景(Formalism). 然后在第6节以缠绕数相反两种Hopf链环重联过程为例演示数值模拟的方法, 并对结果进行分析讨论. 最后, 在第7节结论与讨论部分, 还将补充展示我们正在进展中的一项工作, 即三叶结(Trefoil Knot)涡旋自身重联演化的数值模拟. 目的是使读者对该领域数值工作中常见的技术困难有所了解.

2 拓扑流体力学发展简史

流体力学中的拓扑方法(如图1)^[1]起源于1815年柯西(Cauchy)对涡旋度(Vorticity)拉格朗日守恒性的基础性开创工作, 并植根于1858年的两篇经典论文, 即亥姆霍兹(Helmholtz)关于涡旋动力学守恒定律的研究, 以及黎曼(Riemann)对位势的毗邻空间多连通性的讨论(Multiply Connectedness of the Ambient Space on Potentials). 这些前期工作启发开尔文勋爵(Lord Kelvin, William Thomson)提出了一种关于物质本质的基础性猜想——原子的涡旋纽结谱理论(1868–1882). 后者又启发泰特(Tait)在1872–1880年间制作出纽结与链环的第一个分类表, 以

及麦克斯韦(Maxwell)在1870年尝试将高斯的缠绕数(Gauss' Linking Number, 1833)推广到多连通域电流和磁场的研究中去. 这些形成了该学术领域历史上一段非常活跃的时期, 其中一个高潮是1882年J. J. 汤姆逊(J. J. Thomson)关于涡旋链环的Adams奖获奖论文. 随着开尔文涡旋纽结谱原子理论的繁荣, 特别是J. J. 汤姆逊1905年因发现电子而荣获诺贝尔物理奖, 拓扑技巧进一步得到学术界的重视; 而拓扑学理论本身也得到了促进和发展, 其中包括庞卡莱(Poincaré)和德拉姆(de Rham)对理论体系所做的形式化工作.

此后, 虽然1950–1960年间在量子场论中出现了一批拓扑学技巧的重要应用, 但拓扑方法在经典场论中的复兴却出现在20世纪70年代, 标志性工作是1969年莫法特(Moffatt)对流体螺度这个理想流体/磁流体力学基本不变量赋予的拓扑解释(详见第3节), 以及高斯缠绕数的有限形式在DNA生物学中的应用. 目前, 随着计算机能力的不断提高以及计算编程技巧的不断改善, 数值模拟的精细化日益深入, 拓扑经典场论正在成为一个丰富多元的科研领域(如图1)^[1].

图1 (网络版彩图)拓扑流体力学发展简史

Figure 1 (Color online) Brief history of topological fluid mechanics.

3 流体螺度的拓扑内涵

拓扑流体力学的核心任务之一是辨析流体涡旋系统的拓扑位形, 找到适当的示性拓扑不变量, 并讨论拓扑与能量的关系. 螺度(Helicity)是最重要的流体拓扑不变量. 它是流体欧拉(Euler)方程的守恒量, 是耗散纳维尔-斯托克斯(Navier-Stokes)方程所描述的流体演化过程中的守恒量. 螺度思想最早来源于19世纪的亥姆霍兹和开尔文^[2]. 此后1958–1969年在磁流体力学和理想流体动力学中分别由沃尔杰(Woltjer)^[3]和莫法特(Moffatt)^[4]重新发扬光大.

运动学螺度(Kinetic Helicity)定义为三维积分^[3,5]:

$$H = \int_V \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega} d^3x, \quad (1)$$

其中 $\mathbf{u}$ 是速度, $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u}$ 是涡旋度(Vorticity). 积分在三维空间中的体积 V 中进行. 对不可压缩(Incompressible)流体, 满足 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, $\mathbf{u}$ 在 V 内处处无散; 对可压缩(Compressible)流体, 取正压条件 $p = p(\rho)$, 其中 p 是压强, ρ 是密度. $\boldsymbol{\omega}$ 在边界 ∂V 上满足 $\boldsymbol{\omega} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$, 其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 是 ∂V 的法向. 磁流体力学中的螺度定义与运动学螺度非常相似, 将 $\mathbf{u}$ 替换为磁矢势 $\mathbf{A}$, $\boldsymbol{\omega}$ 替换为磁场强度 $\mathbf{B}$ 即可. 以下不失一般性, 我们以运动学螺度为例.

用外微分语言来重新表述上面的定义知: 速度场 $\mathbf{u}$ 是一个1-形式, $\mathbf{u} = u_i dx^i$; $\boldsymbol{\omega}$ 作为一个1-形式, 本身是一个2-形式的Hodge对偶, $\boldsymbol{\omega} = *(d\mathbf{u})$. 从而(1)式就可以表达为一个外积(Wedge Product)

$$H = \int_V \mathbf{u} \wedge d\mathbf{u}. \quad (2)$$

如果反过来以 $\boldsymbol{\omega}$ 为基本场, 亦可把上述定义写成

$$H = \int_V \boldsymbol{\omega} \cdot \text{curl}^{-1} \boldsymbol{\omega} d^3x. \quad (3)$$

其中 $\mathbf{u} = \text{curl}^{-1} \boldsymbol{\omega}$ 由Biot-Savart定理来实现

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \int_{V' = V \setminus \{\mathbf{x}\}} \frac{\boldsymbol{\omega}(\mathbf{x}') \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} d^3x'. \quad (4)$$

文献^[1]P.125定理1.15指出, H 的取值并不依赖于 $\mathbf{u}$ 取何种形式, 而实质上取决于 $\boldsymbol{\omega}$. 这一点与物

理中的通常认知是一致的, 即 $\boldsymbol{\omega}$ 作为场强来说是可观测量, 而 $\mathbf{u}$ 从场论的角度看是一种矢量势. 定理的一个直接结果是如下的重要推论, 即Helicity Invariance Theorem: 设流形 M 上有一个无源矢量场 $\boldsymbol{\omega}$. 则由 $\boldsymbol{\omega}$ 所给出的 H , 在 M 的任意保体积微分同胚(Diffeomorphism)变换之下是守恒的. 具体来说就是, 对一个单连通带边流形 M 来说, 若一个无散(Divergence-Free)矢量场和边界 ∂M 相切, 那么该场的螺度 H 在所有针对 M 的保体积、保持上述相切条件不变的微分同胚变换之下是一个守恒量. 从拓扑学的角度, 文献^[1]也将 H 称为Hopf不变量, 即Hopf映射度.

3.1 螺度与纽结的互、自缠绕数之间的关系

1969年莫法特^[4]、1992年莫法特-瑞卡(Moffatt-Ricca)^[6,7]分别讨论了链环分量的互缠绕和自缠绕情况, 给出一个关于螺度拓扑内涵的重要结果:

定理1 (Moffatt-Ricca, 1992^[6]) 考虑一个理想流体条件下的涡旋链环 $\mathcal{L}$, 包含 N 个分量, $\mathcal{L} = \bigcup_{k=1}^N \gamma_k$. 每个分量 γ_k 是流体链环 $\mathcal{L}$ 的一个独立分支, 其中心线 C_k 不与其他分支在三维空间中相交(即闭合涡旋线管. 若不闭合, 则是开端曲线, 可认为在无穷远处闭合), 纽结之间有没有交叉缠绕. 记 γ_k 的环量(Circulation)为 Φ_k . 那么, 涡旋链环 $\mathcal{L}$ 的螺度可由纽结理论中的自缠绕数和高斯互缠绕数表达出来

$$\begin{aligned} H(\mathcal{L}) &= H_{\text{mutual}} + H_{\text{self}} \\ &= \sum_{k \neq l; k, l=1}^N \Phi_k \Phi_l Lk(\gamma_k, \gamma_l) + \sum_{k=1}^N \Phi_k^2 Sl(\gamma_k), \end{aligned} \quad (5)$$

其中 H_{mutual} 代表螺度中的互缠绕贡献, H_{self} 代表自缠绕贡献. 特别地, 当环量都均匀即 $\Phi_1 = \dots = \Phi_N = \Phi$ 时, 有

$$\begin{aligned} H(\mathcal{L}) &= H_{\text{mutual}} + H_{\text{self}} \\ &= \Phi^2 \left(\sum_{k \neq l; k, l=1}^N Lk(\gamma_k, \gamma_l) + \sum_{k=1}^N Sl(\gamma_k) \right). \end{aligned} \quad (6)$$

这里 $Lk(\gamma_k, \gamma_l)$ 是 γ_k 和 γ_l 之间的高斯互缠绕数; 而 $Sl(\gamma_k)$ 是 γ_k 的自缠绕数, 可通过Călugăreanu-White公

式与卷曲数(Writhing) Wr 和拧转数(Twisting) Tw 联系起来^[8,9],

$$Sl = Wr + Tw. \quad (7)$$

(1)式是复杂的积分表达式, 而(5)和(6)式是由拓扑不变量组成的简单代数表达式, 因此具有重要意义. 有鉴于此, 下面简单引述对(5)和(6)式的证明^[4,6,7].

证明

(1) 首先考察互缠绕部分, H_{mutual} , 有如下引理:

引理1 (Moffatt, 1969^[4])

$$H_{\text{mutual}} = \sum_{i \neq j} \Phi_i \Phi_j Lk(\gamma_i, \gamma_j). \quad (8)$$

此引理的证明简述如下. 由Biot-Savart定理(4)式, 可用 ω 给出 $u(\mathbf{x})$ 表达式. 将之代入互缠绕螺度, 就有

$$\begin{aligned} H_{\text{mutual}} &= \int_V u(\mathbf{x}) \cdot \omega(\mathbf{x}) d^3x \\ &= \int_V \left(\int_{V'=V \setminus \{\mathbf{x}\}} \frac{\omega(\mathbf{x}') \times (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} d^3x' \right) \cdot \omega(\mathbf{x}) d^3x, \end{aligned} \quad (9)$$

也即

$$H_{\text{mutual}} = \int_V \int_{V'=V \setminus \{\mathbf{x}\}} \frac{\omega(\mathbf{x}) \times \omega(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^3x' d^3x. \quad (10)$$

取 ω 场在边界 ∂V 处满足 $\omega \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$, 就可把 $\omega(\mathbf{x})$ 和 $\omega(\mathbf{x}')$ 表示为

$$\omega(\mathbf{x}) = \Phi_i \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i), \quad (11)$$

$$\omega(\mathbf{x}') = \Phi_j \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}') \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j), \quad (12)$$

其中 $\mathbf{x}_i$ 是 γ_i 的中心线 C_i 上的坐标, $\mathbf{x}_j$ 是 C_j 的坐标. 由于 δ -函数的缘故, $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ 和 $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}')$ 就分别成为 C_i 和 C_j 上的单位切矢量. 那么, 将(11)和(12)式代入(10)式, 立刻得到

$$H_{\text{mutual}} = \sum_{i \neq j} \Phi_i \Phi_j \oint_{C_i} \oint_{C_j} d\mathbf{l}_i \times d\mathbf{l}_j \cdot \frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^3}, \quad (13)$$

其中 $d\mathbf{l}_i$ 和 $d\mathbf{l}_j$ 分别是 C_i 和 C_j 的线元矢量. 注意到高斯互缠绕数 $Lk(\gamma_i, \gamma_j)$ 恰为上述积分:

$$Lk(\gamma_i, \gamma_j) = \oint_{C_i} \oint_{C_j} d\mathbf{l}_i \times d\mathbf{l}_j \cdot \frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^3}, \quad (14)$$

即得到

$$H_{\text{mutual}} = \sum_{i \neq j} \Phi_i \Phi_j Lk(\gamma_i, \gamma_j). \quad (15)$$

引理1证毕.

(2) 其次考察自缠绕部分, H_{self} :

我们从纽结的螺度出发导出其Călugăreanu-White不变量. 考虑一个物理纽结(Physical Knot), 它产生于 $\mathbb{R}^3$ 中一个以打结曲线 C 为中心线的流管(Flux Tube). 先假设 C 上无拐点, 也即无曲率为0之处. 若曲线闭合, 则 C 的参数方程可表为 $\mathbf{x} = \mathbf{x}(s)$; 可设 C 的周期为 L , 即 $\mathbf{x}(s) = \mathbf{x}(s + L)$. 对打结流管螺度的另一种表示形式由如下引理给出.

引理2 (Moffatt-Ricca, 1992^[6]) 考虑一个理想流体条件下的磁纽结(Magnetic Knot), 它由磁通管给出. 记磁通管中心线为纽结曲线 C , 管边界(Tubular Boundary)为一个磁面(Magnetic Surface), 通量为 Φ . 则该磁纽结螺度 H_m 为

$$H_{\text{self},m} = \Phi^2 SL, \quad (16)$$

其中 $SL = SL(\mathcal{R})$ 是 C 的参考带(Reference Ribbon) $\mathcal{R}$ 的Călugăreanu-White自缠绕不变量.

此引理的证明简述如下. 考虑一个磁通管, 其磁场 $\mathbf{B}$ 由两部分组成

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_a + \mathbf{B}_m, \quad (17)$$

其中 $\mathbf{B}_a$ 是平行于管轴的轴向分量(Axial Field), 而 $\mathbf{B}_m$ 则是垂直于轴向的子午面(Meridian Planes)上的、幅角增加方向的分量. 在管截面上, 我们采用一个局域的柱坐标系 (r, θ, z) (如图2).

假设

$$\mathbf{B}_a = (0, 0, B_z(r)), \quad \mathbf{B}_m = (0, B_\theta(r), 0), \quad (18)$$

显然有 $\nabla \cdot \mathbf{B}_a = 0$ 和 $\nabla \cdot \mathbf{B}_m = 0$. 于是可以分别引入矢势

$$\mathbf{B}_a = \nabla \times \mathbf{A}_a, \quad \mathbf{B}_m = \nabla \times \mathbf{A}_m, \quad (19)$$

图 2 (网络版彩图)局域的柱坐标系 (r, θ, z) . B_a 是平行于管轴的轴向分量, 而 B_m 则是垂直于轴向的子午面上的幅角增加方向的分量

Figure 2 (Color online) Polar coordinates on the tube cross-section, (r, θ, z) . B_a is the axial field parallel to the tube axis and B_m is the meridional field in the meridian planes perpendicular to the tube axis.

其中 $\nabla \cdot A_a = 0$, $\nabla \cdot A_m = 0$. 鉴于 B_m 场的磁力线是互不相交的圆环, 我们有

$$\int_V A_m \cdot B_m d^3 x^* = 0, \quad (20)$$

其中 V 是管的体积, $d^3 x^*$ 表示 V 上的体积元. 那么总的场螺度就是

$$\begin{aligned} H_{\text{self},m} &= \int_V A_a \cdot B_a d^3 x^* + \int_V A_a \cdot B_m d^3 x^* \\ &\quad + \int_V A_m \cdot B_a d^3 x^* \\ &= \int_V A_a \cdot B_a d^3 x^* \\ &\quad + 2 \int_V A_a \cdot B_m d^3 x^*, \end{aligned} \quad (21)$$

其中使用了分部积分技巧和散度定理.

1) 螺度的环绕(Writhing)贡献. 首先考虑轴向贡献 $H_{\text{self},m,a} = \int_V A_a \cdot B_a d^3 x^*$, 脚标 a =axial. 此处我们使用取极限时的Biot-Savart表示式:

$$A_{\text{BS}} = -\frac{\Phi}{4\pi} \oint_C \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \times d\mathbf{x}^*}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|^3}. \quad (22)$$

尽管这个表达式在 $\mathbf{x} \in C$ 时发散, 但它的轴向分量却保持有限, 故有

$$H_{\text{self},m,a} = \frac{\Phi^2}{4\pi} \oint_C \oint_C \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \cdot d\mathbf{x} \times d\mathbf{x}^*}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|^3} = \Phi^2 W r. \quad (23)$$

此即环绕部分对螺度的贡献.

2) 螺度的扭转(Twisting)贡献. 现在考虑(21)式的第二项贡献:

$$H_{\text{self},m,m} = 2 \int_V A_a \cdot B_m d^3 x^* = 2 \int_V A_\theta(r) B_\theta(r) d^3 x^*, \quad (24)$$

脚标 m =meridian. 这里注意, 从(18)式以及(19)式第一部分可以得到 $A_a = (0, A_\theta(r), 0)$, 其中

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r A_\theta) = B_z(r). \quad (25)$$

下面考虑由于曲率和挠率分别发生突变 $\delta c(s)$ 和 $\delta \tau(s)$ 时所导致的流管的虚位移 $\delta \xi(s)$ 所诱导的 $H_{\text{self},m}$ 的改变. 我们有

$$\xi = r \hat{e}_r = r(\hat{n} \cos \theta + \hat{b} \sin \theta), \quad (26)$$

以及

$$\hat{e}_\theta = -\hat{n} \sin \theta + \hat{b} \cos \theta. \quad (27)$$

从而, 假设

$$\delta \xi = r \cos \theta \delta \hat{n} + r \sin \theta \delta \hat{b} \quad (28)$$

对所有 (r, θ) 一致, 就有

$$\frac{d}{ds} \delta \xi = r \cos \theta \frac{d}{ds} \delta \hat{n} + r \sin \theta \frac{d}{ds} \delta \hat{b}. \quad (29)$$

由于只有弧长 s 的微变化 $\delta \xi$ 导致了场的畸变(Distortion), 我们不妨假设 $s = s_1$, $\delta \xi(s_1) = 0$, 也即是说 $\delta \hat{n}(s_1) = \delta \hat{b}(s_1) = 0$. 那么, 根据 $s = s_1$ 处的弗勒内关系(Frenet Relations)就有

$$\frac{d}{ds} \delta \hat{n} = -\delta c \hat{t} + \delta \tau \hat{b}, \quad \frac{d}{ds} \delta \hat{b} = -\delta \tau \hat{n}. \quad (30)$$

于是, 在所假设的虚位移 $\delta \xi(s)$ 之下, 轴向场 B_a 以及 $A_\theta(r)$ 保持不变, 而 $s = s_1$ 处的子午场 B_m 却发生改变, 改变量是

$$\delta B_m = (B_a \cdot \nabla) \delta \xi = B_z(r) \frac{d}{ds} \delta \xi. \quad (31)$$

这是弧长变化 $\delta \xi(s)$ 导致的. 可以看到, 这一改变重组了一种对流贡献的过程, 后者在磁流体力学中被

称为“微分旋转(Differential Rotation)所导致的环面场(Toroidal Field)”^[10]. 这样一来就有

$$\begin{aligned}\delta B_\theta &= \delta \mathbf{B}_m \cdot \hat{\mathbf{e}}_\theta = B_z(r) \left(\frac{d}{ds} \delta \xi \right) \cdot \hat{\mathbf{e}}_\theta \\ &= B_z(r) \left[- \left(\frac{d}{ds} \delta \xi \right) \cdot \sin \theta \hat{\mathbf{n}} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{d}{ds} \delta \xi \right) \cdot \cos \theta \hat{\mathbf{b}} \right]_{s=s_1}.\end{aligned}\quad (32)$$

将(29)和(30)式代入, 有

$$\delta B_\theta = B_z(r) r \delta \tau(s), \quad \text{当 } s = s_1. \quad (33)$$

鉴于以上的处理在纽结上任意界面都成立, (33)式实际上给出了产生于任意 s_1 上的虚位移的场微扰(Field Perturbation). 所产生的对 $H_{\text{self},m,m}$ 的影响为

$$\begin{aligned}H_{\text{self},m,m} &= 2 \int_V A_\theta(r) \delta B_\theta(r) d^3 \mathbf{x}^* \\ &= 2 \int_V A_\theta(r) B_z(r) r \delta \tau(s) d^3 \mathbf{x}^*.\end{aligned}\quad (34)$$

如果我们先对(25)式在横截面上积分, 其结果是

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty A_\theta \frac{1}{r} \frac{d}{dr} (r A_\theta) r 2\pi r dr \\ &\equiv \frac{2\pi}{2} [(r A_\theta)^2]_0^\infty = \pi \left(\frac{\Phi}{2\pi} \right)^2,\end{aligned}\quad (35)$$

那么再根据(34)式就得到

$$\delta H_{\text{self},m,m} = \Phi^2 \delta T. \quad (36)$$

如果考虑 C 所发生的、依赖于时间但不由任何拐点的形变, 则(34)式可改写为

$$\frac{dH_{\text{self},m,m}}{dt} = \Phi^2 \frac{dT}{ds}, \quad (37)$$

或等价地

$$H_{\text{self},m,m} = \Phi^2 (T + T_0), \quad (38)$$

其中 T_0 是常数.

在流管发生连续形变时, 综合(23)和(38)式, 总螺度就可写为

$$\frac{H_{\text{self},m,m}}{\Phi^2} = Wr + T + T_0 = \text{constant}. \quad (39)$$

当 C 在形变中出现拐点时, Wr 依然会连续变化, 但 T 却会发生 ± 1 的跳变^[6,7]. 进而, 当 T 发生 ± 1 跳变时, T_0 项必须发生一个 ∓ 1 的补偿跳变, 以优先保证螺度不变性. 而这个 ∓ 1 的跳变, 也即是 C 在形变中通过一个拐点时, 内秉拧转 N 相应发生的跳变, 因此 $T_0 = N$.

引理2证毕.

(3) 总的结果(纽结/链环螺度与互缠绕数、自缠绕数的关系).

上文结果适用于任意物理纽结/链环系统, 只要其中含有局域的涡量分布、磁场或电场(其场强记为 Φ). 对于离散场(Discrete Field), 如果可以被禁闭于 N 个涡丝状结构当中, 那么依旧可以综合引理1的(8)式和引理2的(16)式并将之推广得到如下结论.

对理想流体, 在总体积为 V 的空间内有一个物理链环, 记为 $\mathcal{L}$. 设 $\mathcal{L}$ 含有 N 个纽结分量, 每个所负荷的通量(Flux)为 $\Phi_i, i = 1, \dots, N$. 则此纠缠的物理链环 $\mathcal{L}$ 的总螺度 H 可用互缠绕数、自缠绕数表达出来

$$\begin{aligned}H &= H_{\text{mutual}} + H_{\text{self}} \\ &= \sum_i \Phi_i^2 S L_i + \sum_{i \neq j} \Phi_i \Phi_j L k_{ij} \\ &= \sum_i \Phi_i^2 (W r_i + T_i + N_i) + \sum_{i \neq j} \Phi_i \Phi_j L k_{ij}.\end{aligned}\quad (40)$$

定理1即(5)式证毕^[4,6].

(5)式有重要的意义及广泛的应用潜力. 首先, 它大大简化了螺度 H 的计算, 把原来困难的三重积分(1)式化为了对互、自缠绕数的简单代数计数, 从而清晰地揭示出 H 作为拓扑不变量的本质. 其次, 通过实验测量积分螺度和流场 Φ_i , 可以通过中心线的几何形状和投影图(Diagram Projections)给出的 $L k_{i,j}$ 直接计算出 $W r_i$ 和 T_i , 进而估算内秉拧转 N_i , 后者是流管能量相关量中最棘手而又最有趣的量之一.

对互、自缠绕数的简单的代数计数方法如下:

$$L k(\gamma_k, \gamma_l) = \frac{1}{2} \sum_{r \in \{\gamma_k \cap \gamma_l\}} \varepsilon_r, \quad S l(\gamma_k) = \frac{1}{2} \sum_{r \in \{\gamma_k\}} \varepsilon_r, \quad (41)$$

其中 $\{\gamma_k\}$ 指 γ_k 自身的交点集合, $\{\gamma_k \cap \gamma_l\}$ 指 γ_k 和 γ_l 互相的交点集合. r 是一个交点, ε_r 指该交点的代数指标, 定义如图3.

缠绕数可以作为示性工具来判断一个位形的拓扑平庸或非平庸状态, 如后文将用到的Hopf链环. 如图4(a)所示, 为互不嵌套的两个平庸环, 是二分支链环中最平庸的情况, 其缠绕数为零. 而Hopf链环的缠绕数不为零, 这就与平庸环区分开来.

对于相对定向相反的两个Hopf链环(如图5), 它们是手征相反的一对链环, 其缠绕数分别为 ± 1 . 这里所说的手征相反是指: 把一个链环画在二维平面里(相当于把这个链环沿着一个选定方向投射到二维平面上, Directional Projection), 则每个交叉点处都有上线和下线. 如果把图中每个交叉点处的上、下线全部对换, 就会得到另一个链环, 新链环与原链环之间是关于纸面的镜像(Mirror Image)对称关系,

图3 (网络版彩图)对交叉数 ε_r 的代数定义. Over-pass, 即从上线转到下线的最小转角为逆时针转动, 记为 $\varepsilon_r = +1$; Under-pass, 即从上线转到下线的最小转角为顺时针转动, 记为 $\varepsilon_r = -1$.

Figure 3 (Color online) Algebraic definition for the crossing number. Over-pass, i.e., the case that the minimal angle of rotation from the upper line segment to the lower line segment is anti-clockwise. It is denoted as $\varepsilon_r = +1$; Under-pass, i.e., the case that the minimal angle of rotation is clockwise. It is denoted as $\varepsilon_r = -1$.

图4 (网络版彩图)两种拓扑位形之比较. (a) 两个互不嵌套的平庸圆, 其缠绕数为0; (b) Hopf链环, 高斯缠绕数为 ± 1 (参见图5)

Figure 4 (Color online) Comparison of two configurations. (a) Two disjoint trivial circles; (b) a Hopf link, with Gauss linking number ± 1 (see Figure 5 below).

图5 (网络版彩图)两个Hopf链环. (a) 高斯互缠绕数 $Lk = +1$; (b) 高斯互缠绕数 $Lk = -1$

Figure 5 (Color online) Two Hopf links. (a) The one with the Gauss linking number $Lk = +1$; (b) the one with the Gauss linking number $Lk = -1$.

也称手征相反. 后文将会给出, 在量子流体当中, 缠绕数不同的两个Hopf链环可以通过改变相位取向来得到, 也即是说镜像对称亦可以用对量子流体取相反相位来实现.

上述对互缠绕数的证明是无条件成立的; 而自缠绕数对螺度的贡献方面, 上述给出的是基于特殊涡旋内部结构情况给出的证明, 目的是向读者介绍证明的主干思路. 结合实际应用时, 需要视不同的具体问题谨慎对待^[11, 12].

事实上, 国际上关于螺度拓扑内涵及与各种拓扑不变量之间关系的探讨一直是研究热点. 早在1961年Moreau^[13]就提出螺度可以用来表征涡线的链接关系. Berger和Field^[14]考虑对有限个孤立涡管的螺度进行分解, 以分析螺度与涡管的拓扑、几何、涡量分布的具体关系. 近年来Moffatt^[15]和Xiong等人^[16]对真实黏性流动中螺度各分量之间的相互转换进行了理论和数值分析. 芝加哥大学Irvine研究组^[17]对螺度的守恒性进行了深入的实验与数值研究.

3.2 螺度与纽结多项式之间的关系

螺度的拓扑内涵是否仅限于和纽结互、自缠绕数的关系?

我们知道, 缠绕数在数学纽结理论中是较低阶的拓扑示性工具, 著名的例子包括: 用自缠绕数 $Sl = 0$ 无法分辨一个平庸圆和一个8-字结, 如图6; 用互缠绕数 $Lk = 0$ 无法分辨一组三个平庸圆、一组博罗明环(Borromean Rings)和一组怀特海德链环(Whitehead Link), 如图7.

图 6 (网络版彩图)平庸环(a)和8-字结(b). 平庸环显然自缠绕数为零; 8-字结的自缠绕数可计算也等于零

Figure 6 (Color online) A trivial circle (a) and a figure-8 knot (b). The self-linking number of the trivial circle is obviously zero; that of the figure-8 knot vanishes as well, as can be easily verified.

图 7 (网络版彩图)一组三个平庸环(a), Borromean rings (b) 和 Whitehead links (c). 平庸环显然互缠绕为零; 后二者, 无论怎样规定各分量(用不同颜色标定)的定向, 其总高斯互缠绕数都等于零

Figure 7 (Color online) A group of three trivial circles (a), Borromean rings (b) and Whitehead links (c). The mutual linking number of the trivial circles are obvious zero; for the latter two items, their mutual linking numbers both vanish, no matter how to choose the orientations of the components in the links.

为了探究螺度与拓扑示性能力更强的纽结理论工具(如纽结多项式)之间的关系, 本文作者近年来发展出如下方法^[18-20].

如果把螺度的外微分表达式(2)与拓扑量子场论中的Chern-Simons(CS) 3-形式(Chern是陈省身)相比较

$$CS(A) = A \wedge dA + \frac{2}{3} A \wedge A \wedge A, \quad (42)$$

立刻可知(2)式就是(42)式取阿贝尔群时情形. 事实上, 按拓扑场论的语言, (42)式中的 $A = A(x)$ 是主纤维丛上的联络(即规范场理论中的规范势), x^μ 是底流形坐标. $A = A_\mu^a T_a dx^\mu$ 是1-形式, $dA =$

$\partial_\mu A_\nu^a T_a dx^\mu \wedge dx^\nu$ 是2-形式. T_a 是结构群的生成元. 一般情况下结构群是非阿贝尔群 $G(\text{non-Abelian})$, 生成元的对易关系 $[T_a, T_b] \neq 0$, 此时(42)式中第二项即非线性项不为零; 特殊情况下, 如果 G 是阿贝尔的 $U(1)$ 群, 它等同于单位圆上的旋转或复平面中的相角变换, 则(42)中的第二项消失, 就成为 $CS(A) = A \wedge dA$, 而对此3-形式的积分就成为

$$I = \int_V A \wedge dA. \quad (43)$$

注意到速度场也是一种势场(参考超导理论中的伦敦关系)^[21], 即将外微分形式下的 u 场代入 A , 则由(43)可得(2)式.

量子CS场论是最重要的低维拓扑量子场论之一. 它与纽结理论、共形场论、顶角算子代数、圈量子引力等重要领域都有关系. 特别是, 该理论中天然蕴含着各种纽结不变量, 在此领域已产生多个数学菲尔兹奖的工作^[22]. 它与各种纽结拓扑不变量的关系给出一个启发: 在拓扑流体力学这一经典场论的研究领域中, 或可寻找基于螺度的、比缠绕数的拓扑示性能力更强的纽结不变量.

注意到拓扑量子场论中的CS路径积分定义为Wilson loop的真空期望值(对应于数学中的和乐群):

$$\left\langle \prod_i e^{i \oint_{\gamma_i} A} \right\rangle = \frac{1}{Z} \int [\mathcal{D}A] \left(e^{i \sum_i \oint_{\gamma_i} A} \right) e^{i CS(A)}, \quad (44)$$

其中 $[\mathcal{D}A]$ 是积分测度, 表示积分在联络 A 的空间进行; γ_i 表示第 i 个纽结; Z 是归一化常数; $e^{i \sum_i \oint_{\gamma_i} A}$ 称为Wilson loop. 为简单起见, 上式中未进行Becchi-Rouet-Stora-Tyutin (BRST)量子化手续, 也即未加入规范固定(Gauge Fixing)和鬼场项(Ghosts).

拓扑场论中的著名工作^[22]指出这个积分可以给出纽结多项式拓扑不变量. 这为分析螺度的拓扑内涵提供了线索. 前文(2)式指出它是一个阿贝尔的CS作用量, 也即此时(44)式右边的被积函数变成

$$e^{i \sum_i \oint_{\gamma_i} u} e^{i \int_V u \wedge du}, \quad (45)$$

其中联络 A 已写成速度场 u , 而作用量是 $H = \int_V CS(u) = \int_V u \wedge du$. 进一步注意到, 当考虑极细涡丝(Thin Vortex Filament; MHD中即极细磁通管)的时候, 涡度场可认为沿着涡丝的方向, $\omega = \omega_0 \hat{t}$, 其

中 ω_0 为常数, $\hat{t}$ 是涡丝中轴线的单位切矢. 在此条件下, H 就可写到涡丝线积分上去^[23]

$$H = \sum_i \Phi_i \oint_{\gamma_i} u = \sum_i \oint_{\gamma_i} u, \quad (46)$$

从而

$$e^{iH} = e^{i \sum_i \oint_{\gamma_i} u}. \quad (47)$$

其中每根涡丝的涡量 Φ_i 为简单起见已取为1. 这样一来, 发现(45)式中的两个因子变成相同. 这就表明, 是这个指数形式(47)具备提供纽结多项式不变量的能力.

基于这一认识, 就可以抛却泛函路径积分体系, 一切从研究这个指数形式出发. 下面将证明, 该形式可以给出超出缠绕数的更高阶的拓扑信息, 如纽结多项式等. 在给出证明之前, 先就可能产生的疑问提供几点说明:

(1) 目前国际上对螺度的研究, 已有多个理论和实验组转而开始关注线积分形式的螺度(Field Line Helicity), 如邓迪大学太阳等离子体物理团队^[24,25].

(2) 指数形式可以退回到非指数的形式. 粗略的理解是, 如果对该形式进行指数展开, 那么一阶项将会回到通常的情形, 描述缠绕数这样的低阶拓扑不变量——实质上, 这意味着只考虑每根纽结都拓扑守恒的情形, 不考虑它们之间的相互作用; 而二阶以上的项, 则会包含多个线积分, 那就必须考虑纽结片段相碰时发生破坏拓扑守恒的各种相互作用的情况, 如重联. 考察指数形式, 实际上意味着寻回之前扔掉的高阶项.

(3) 下文中可以看到, 指数形式与线积分搭配使用有以下优点.

1) 由于积分路径是曲线, 所以允许对路径进行断开、重联, 以及添加和删减虚拟路径等操作. 所得的结果在指数上具有可加性, 写在指数下则是相乘因子. 即 $e^{\oint_L u} = e^{\oint_{L_1+L_2} u} = e^{\oint_{L_1} u} e^{\oint_{L_2} u}$, 其中路径具有可加性, $L = L_1 + L_2$.

2) 这就允许把上面路径操作之后所得的某些新因子进行具体计算, 得到常数. 这些常数即可定义为纽结多项式的定义式(即拆接关系, Skein Relation)所需要的那些常数.

由此可以证明, 上述指数形式可以给出Jones、HOMFLYPT等纽结多项式拓扑不变量. 下面对构造思路给出简短说明.

一个纽结(不计粗细的)是指三维当中的一条封闭曲线, 数学上表达为一个映射 $\gamma: S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$. 映射的方式不同意味着打结的方式不同, 有平庸的无缠绕环, 也有非平庸的结. 把纽结画成平面图, 纽结和纽结之间的形态不同就体现在各个交点处的交叉方式不同上面, 如图8.

进一步地, 多个纽结同时出现, 相互之间可以有嵌套或无嵌套. 这样形成的组合称为链环(Link), 当中的每个纽结称为链环的一个分量(Component). 显然, 单个纽结是链环的特殊情况. 一般说的纽结拓扑不变量(多项式等)更准确地说应叫做链环不变量, 因为它们处理的是更一般的链环的拓扑示性问题.

两个链环画到平面上以后形态不同, 并不意味着它们相互不等价——它们之间可能通过连续拓扑变换从一个变到另一个. 如果这点能做到, 就称它们拓扑等价或同痕(Isotopic), 否则为不等价. 纽结理论的核心任务之一即是分辨两个纽结是否等价; 若不等价, 相差多少. 为完成这一任务数学上发展出了纽结拓扑不变量方法, 即寻找一些在拓扑变换下不变的量或不变的性质, 以此判断两个纽结等价与否. 注意, 拓扑不变量是必要而非充分条件, 也即若某拓扑不变量发生了变化, 立即可以判断二者不等价; 若未发生变化, 只能说在该不变量之下等价; 若有更高阶的不变量发生了变化, 仍判断此二者为不等价. 那么, 找寻拓扑不变量需要先分析连续拓扑变化;

图 8 两个10交叉点纽结, 10₂₂(a)和10₃₅(b). 二者有相同的Jones多项式, 但HOMFLYPT多项式不同

Figure 8 Two knots with 10 crossing sites: 10₂₂ (a) and 10₃₅ (b). They share the same Jones polynomial, but have different HOMFLYPT polynomials.

Reidemeister指出, 所有的变化归根结蒂都由三种最基本的变化组合而成, 称为Reidemeister Moves, 如图9.

接下来, 按数学上的思维方式, 考察纽结时专注于每个交叉点. 对一个具体的交叉点来说, 无非是三种交叉方式, 如图10.

于是, 所谓的纽结多项式的定义就是针对这三种交叉方式之间相互关系的公式(称为拆接关系, Skein Relations). 某种意义上说, 可认为是一种递推关系^[26], 如下所述.

• Jones多项式^[27]的拆接关系, 关于单参数 τ :

$$V(\text{Circle}) = 1, \quad (48)$$

$$\tau^{-1}V(\text{OC}) - \tau V(\text{UC}) = (\tau^{\frac{1}{2}} - \tau^{-\frac{1}{2}})V(\text{NC}). \quad (49)$$

这里Circle指平庸圆. OC, UC, NC分别指图10中的三种交叉方式: OC即Over-crossing, UC即Under-crossing, NC即Non-crossing.

图9 三种Reidemeister Moves. (a) Type-I; (b) Type-II; (c) Type-III. 纽结拓扑不变量, 三种变换下都不变的, 称为毗邻同痕(Ambient Isotopic); 只在后两种之下不变的, 称为正规同痕(Regular Isotopic)

Figure 9 Three types of Reidemeister moves: Type-I (a), Type-II (b), and Type-III (c). A knot topological quantity which is invariant under all these three types of moves is called an ambient isotopic invariant; a quantity which is invariant under the latter two types of moves is called a regular isotopic invariant.

图10 考察三个链环, 它们几乎处处相同, 只在一个交叉点处不同. (a) 上交叉, over-crossing; (b) 下交叉, under-crossing; (c) 不交叉, non-crossing

Figure 10 Three links, which are almost the same everywhere, except one particular crossing site: over-crossing (a), under-crossing (b), and non-crossing (c).

• HOMFLYPT多项式^[28,29]的拆接关系, 关于双参数 a 和 z :

$$P(\text{Circle}) = 1, \quad (50)$$

$$aP(\text{OC}) - a^{-1}P(\text{UC}) = zP(\text{NC}). \quad (51)$$

所谓的构造纽结多项式, 就是构造上面各种拆接关系中的参数 τ, a, z 等, 并证明它们满足那些拆接关系.

构造Jones多项式的拆接关系(48)和(49)式需要构造参数 τ . 我们发展出了一个所谓的“添加/删除虚拟路径”技巧^[18,20], 如图11.

于是, 如果以图中的 L_+, L_-, L_0, γ_+ 和 γ_- 为线积分的积分路径, 就有

$$e^{L_+} = e^{L_0 \oplus \gamma_+} = e^{L_0} e^{\gamma_+} = k e^{L_0}, \quad (52)$$

$$e^{L_-} = e^{L_0 \oplus \gamma_-} = e^{L_0} e^{\gamma_-} = k^{-1} e^{L_0}, \quad (53)$$

其中定义 $k = e^{\gamma_+}$, 可计算恰好有 $k^{-1} = e^{\gamma_-}$. 那么, 如果定义 $\langle L_+ \rangle = e^{L_+}$, $\langle L_- \rangle = e^{L_-}$ 和 $\langle L_0 \rangle = e^{L_0}$, 就得到一组原始的关系:

$$\langle L_+ \rangle = k \langle L_0 \rangle, \quad \langle L_- \rangle = k^{-1} \langle L_0 \rangle. \quad (54)$$

这已初具模样, 接近最终所需拆接关系. 接下来, 经过一系列步骤(先去掉纽结的定向, 用各态遍历假定

图11 (网络版彩图)添加/删除虚拟路径. (a) 对over-crossing (记作 L_+)的处理. 通过添加虚拟路径(蓝色, 由于定向不同, 相互可以抵消), L_+ 被化为一个non-crossing(记作 L_0)加上一个小的unknot(记作 γ_+). (b) 对under-crossing(记作 L_-)的处理. L_- 被化为一个 L_0 加上一个小的unknot(记作 γ_-). γ_+ 带一个正向的 $\frac{1}{2}$ 扭转, γ_- 带一个负向的 $\frac{1}{2}$ 扭转

Figure 11 (Color online) Technique of adding/subtracting imaginary paths. (a) The treatment for an over-crossing site, denoted as L_+ . By adding imaginary paths denoted by the blue color (which are able to cancel each other due to opposite orientations), L_+ is turned into a non-crossing, denoted as L_0 , plus a small unknot, denoted as γ_+ . (b) That for an under-crossing site, denoted as L_- : L_- is turned into an L_0 plus a small unknot denoted as γ_- . The γ_+ carries a positive twist, $\frac{1}{2}$; the γ_- carries a negative twist, $\frac{1}{2}$.

得到Kauffman尖括号多项式的拆接关系^[30], 然后再重新赋予纽结定向), 即可得到Jones多项式的拆接关系(48)和(49)式^[18,20].

上面的Jones多项式是单参数多项式. 示性能力虽然比缠绕数强许多, 但仍然有局限性, 例如它无法分辨前文图8中的 10_{22} 和 10_{35} 两个纽结. 为此我们构造了一种推广的(Generalized) Jones多项式, 即HOMFLYPT多项式^[19](“HOMFLYPT”是两篇论文共八位作者姓氏的首字母). 后者是双参数多项式, 如(50)和(51)式所示, 因此拓扑示性能力更强, 可以分辨图8中的 10_{22} 和 10_{35} 纽结.

在HOMFLYPT多项式拆接关系(50)和(51)式的构造中, 除了要用到上面“添加/删除虚拟路径”的技巧来构造参数 z 以外, 还要用到Dehn Surgery技术来构造参数 a , 如图12. z 的构造过程主要体现了Writhing的贡献, 而 a 则体现Twisting的贡献, 因为有Călugăreanu-White公式

$$Sl(\mathcal{R}) = Wr(\mathcal{C}) + Tw(\mathcal{R}), \quad (55)$$

其中 $\mathcal{R}$ 表达一个条带, 中心线为 $\mathcal{C}$. HOMFLYPT多项式的具体构造细节参见文献^[19].

本节最后做一些说明. 首先, 上述各种纽结多项式的定义式也即拆接关系, 不仅是数学表达式, 亦可被视为对真实物理过程即重联的一种描述. 其次, 在纽结多项式基础上, 我们还可以引入更多的纽结理论工具, 如瓦西里耶夫(Vassiliev)不变量族等(Vassiliev不变量在特殊取值下可得到各种主要的纽结多项式, 前者可认为是后者的母函数). 目前我

们已经成功构造出流体中的康塞维奇(Kontsevich)积分¹⁾, 后者是纽结理论中构造瓦西里耶夫不变量族的主流方法. 能够将重联与纽结多项式以及康塞维奇积分联系起来, 意味着获得了研究流体涡旋纽结链环非平庸拓扑变化的更好工具. 而康塞维奇积分则更加可以直接与涡旋的相互作用联系起来, 其间的桥梁就是毕奥-萨瓦尔(Biot-Savart)定理和关联子, 以及所谓的毗邻空间(Ambient Space)的思想. 在这些方向上进行理论推导, 并辅之以数值模拟和检验, 是我们下一步的研究方向与目标.

4 流体涡旋纽结系统的结构复杂性以及能量-复杂度关系

4.1 流体中的能量-复杂度关系

这里所讨论的复杂流体主要是流体涡旋线管所形成的复杂系统, 在流体微结构相互作用的意义下形成相干结构. 例如, (1) 日冕物质抛射(Coronal Mass Ejections)^[25], 太阳等离子体形成磁通管, 相互缠绕形成复杂系统, 数学上看是巨大的纽结链环. 日冕区域会发生剧烈的磁重联现象, 伴有大量的热量释放. 图像及视频参维基百科: https://en.wikipedia.org/wiki/Coronal_mass_ejection. (2) 普通流体中的涡丝, 数值模拟参文献^[31]. (3) 超流体中的涡旋线, 数值模拟参文献^[23]图2.

拓扑非守恒变换往往伴随着能量释放等动力学的变动. 典型例子是上面提到的日冕加热之谜, 它是Science杂志列举的天体物理八大难题之一: 太阳表面温度约为几千摄氏度, 但几百万公里外的日冕层却达到上百万摄氏度, 这是一个反常现象. 猜测原因有两个, 其中之一即是磁重联(Magnetic Reconnections), 也即磁力线在日冕层被高度拧转, 随即发生断开再连接. 重联的本质是打断旧纽结、重组新纽结, 以改变系统的拓扑结构. 这种拓扑非守恒变换, 必然导致原结构当中贮藏的巨大自由能被释放出来, 引起日冕温度显著上升.

因此研究流体涡旋系统的复杂性并量度之, 一

图 12 (网络版彩图)Dehn Surgery技术. 用于构造HOMFLYPT多项式拆接关系中的参数 a

Figure 12 (Color online) The technique of Dehn surgery. It is employed to construct the parameter a in the skein relations of the HOMFLYPT polynomial.

1) Liu X, Ricca R L. Vassiliev invariants for fluid links in terms of Kontsevich integral. In preparation.

个重要动机是希望找出拓扑与能量的直接比较关系. 即用拓扑不变量标识并量化系统的复杂性, 形成谱系, 然后与能谱作比较. 也即, 用拓扑复杂性的分层来管理能量的分层. 国际上的进展主要包括拓扑性质对能量最小值的约束^[32,33]以及紧束缚磁纽结链环的能谱^[34]. 例如文献^[35]研究了不同类型的紧束缚纽结链环以确定其基态能, 其中纽结的拓扑类型以其绳长不同来区分, 所得的结果是一个在各种物理模型中普遍适用的对数分布. 进一步地, 文献^[36]分析了环面纽结的性质以及涡旋纽结曲率所诱导的动力学特点, 得到一个复杂度高达51个交叉点的纽结族的平均动能离散谱. 这些工作的主要思想是研究涡丝和细磁通管系统的环境与拧转螺度在重联事件中如何引发能量解锁与释放. 在这方面文献^[37–41]做了大量局域物理和几何分析、尺度分析及数值模拟.

4.2 物理纽结的退化

物理纽结会发生结构复杂性退化, 即纽结通过重联发生拓扑位型改变, 复杂度降低. 国际上多年来在流体涡旋系统和DNA纽结链环的演化问题中对此有较多研究. 这类退化过程有两类. 一是受约束退化, 另一是自由无约束退化.

受约束退化方面, 主要关注小尺度数值模拟方格所带来的边界效应; 所观察到的现象在DNA与流体系统中也不尽统一. 在DNA病毒壳体(Viral Capsid)的研究中, 文献^[42,43]中关于位点局域重组的统计拓扑分析, 所研究的现象受到边界效应的严重影响. 在量子涡旋即超流体Gross-Pitaevskii系统的数值实验中, 文献^[44]观察到, 当被研究区域取很小体积时, 边界效应甚至可以使平庸的不拧转、不缠绕涡圈反方向演化出一些具有高度几何和拓扑复杂性的涡旋纽结.

自由无约束退化方面, 国际上最近有一些重要的实验观察, 但尚无统一的模型和深入的理论分析, 2016年文献^[45,46]观察到, 水中涡旋纽结从高复杂度缠绕态到低复杂度平庸态的退化过程从初态到末态不是直接崩解一步到位, 而是经过一系

列中间状态逐级进行——这一现象可称为级联退化(Cascade Degeneration). 无独有偶, 此现象也出现在文献^[47,48]关于生物学领域对DNA转录复制的数值实验中; 该文献还指出, 级联的路径可以不止一条. 它们并非平权, 当中有一条是最优路径, 其发生概率远胜他途.

为什么流体力学与生物学两个截然不同的领域会出现完全相同的现象? 背后是否有某种超越具体学科的、大自然更本质更深刻的规律? 在这方面, 数学终身成就奖Wolf奖得主、数学大师Arnold的一个猜想或许可为我们提供新的角度: 可否找到表征物理场的某些代数拓扑不变量, 其数学上的分层结构可用来对系统的物理状态进行分层管理^[1,49]? 对此, 本文作者用已经找到的流体纽结HOMFLYPT多项式拓扑不变量对环面纽结/链环(Torus Knots/Links)进行了计算^[50,51], 对其中形式化的多项式常数代入含有具体物理含义的数值, 得到了一个精确单调递减的序列(如图13), 这一结果与文献^[47]的结论是一致的.

进一步地, 为了考察环面纽结/链环以外的更一般的纽结如何发生自由无约束退化, 以形成复杂度单调递减的序列, 同时还要兼顾镜像对称链环的复杂度一致性, 我们发展了上述Arnold的思想, 设想出如下的研究思路: 找到一个合适的代数空间, 使物理上的不同复杂度状态对应该空间中一系列用拓扑不变量标记的等势面, 而退化路径则对应穿过各层面的降落曲线. 从起点出发沿其中一条曲线前往终点, 必须相继穿透每个中间层. 每个穿透点即为一个中间态, 这就形成了级联. 这些曲线中必有一条最短的, 对应那条发生概率最高的路径.

循此思路我们进行了理论分析和数值计算, 得到了一些初步结果²⁾.

5 主控方程: Gross-Pitaevskii方程

数值实验是检验理论结果正确性的重要手段, 从本节起我们将转向对前面几节理论结果的数值模拟部分, 主要观察的对象就是超流体中涡旋纽结/链

2) Liu X, Ricca R L, Li X. A topological study on cascade degenerations of complex ensembles of fluid knots. In preparation.

图 13 (网络版彩图)对环面纽结/链环 $T(2, n)$ 计算其HOMFLYPT多项式的值, 得到一个单调递减序列 [50,51]

Figure 13 (Color online) Monotonically decreasing sequence of values obtained by computation of HOMFLYPT polynomials of torus knots/links $T(2, n)$ [50,51].

环的重联.

流体涡旋的重联是湍流这一世纪难题的子问题, 被视为解答湍流疑难的基础. 对涡旋重联的研究不但涉及经典流体 [52–54] 和液氦超流的涡旋动力学 [37,55,56], 还与等离子体的磁流体力学(Magnetohydrodynamics, MHD) [57,58]、介观物理的相变 [59]、DNA分子生物学 [60] 有关. 通过分析该过程中各种物理、数学性质的变化, 尤其是单次重联过程的演化 [61,62], 有助于理解黏性和非黏性流体 的重要性质 [54], 如时间反演对称性 [56]、螺度变化、速度场的能量级联(Energy Cascade)等 [63].

关于螺度作为拓扑数在流体涡旋纽结重联事件中如何变化这个问题, 近年来有多个重要的实验 [64]、数学分析 [41] 和数值工作 [65,66], 但它们却给出了相互矛盾的结论. Zuccher和Ricci [38–40] 通过在超流Gross-Pitaevskii (GP)方程中构造出量子流体涡旋环, 从数值实验角度对朴素双链环和Hopf链环这两种基本位形的拓扑非守恒相互作用进行了部分解答, 破除了这些工作中的矛盾之处. 本文在此基础上, 以量子流体中的两种Hopf链环形式涡旋的拓扑非守恒相互作用为例, 进行了数值模拟与物理和拓扑的分析, 向读者展示了其数值方法, 并以文献[39,40]为基准通过涡旋演化中缠绕数发生变化时的对称性验证了数值模拟结果.

GP方程可用于描述量子超流体如液氦等. 如

下的无量纲形式是本文模型的主控方程(Governing Equation):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{2} \nabla^2 \psi + \frac{i}{2} (1 - \|\psi\|^2) \psi, \quad (56)$$

ψ 是凝聚态波函数, 即序参量(Order Parameter). $\|\psi\|^2$ 的存在使得方程类似一个非线性薛定谔(Schrödinger)方程. 通常的做法是, 当给定一个初始条件时, 模拟系统如何在方程(56)的控制下演化, 重点是观察涡旋的拓扑非守恒相互作用, 比如重联. 以下为简化计算起见取系统背景密度为 $\rho_B = 1$.

我们在流体力学绘景(Formalism)之下研究 (56)式, 就是要从中构造流体力学的特征量即密度 ρ 和速度 $\mathbf{u}$. 具体方案是实施Madelung变换, 将 ψ 写成模长 $\sqrt{\rho}$ 与相角 θ 的形式

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{i\theta}, \quad (57)$$

这样(56)式就分解为一个连续性方程加一个运动方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j)}{\partial x_j} = 0, \quad (58)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}. \quad (59)$$

这样就有 $\rho = \|\psi\|^2$ 为流体密度, $\mathbf{u} = \nabla \theta$ 为流体速度, $p = \frac{e^2}{4}$ 是压强. $\tau_{ij} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2 \ln \rho}{\partial x_i \partial x_j}$ 为所谓的量子压

力(Quantum Stress); 容易看出, 如果没有 τ_{ij} 项(对应远大于涡旋核大小的尺度), (59)式就返回到理想流体的欧拉方程. 波函数 ψ 的奇点出现在 $\rho = 0$ 的位置, 以 δ -函数的形式表现出来, 即 $\delta(\sqrt{\rho})$. 它意味着出现在奇点处的量子涡旋缺陷在尺度上是一维缺陷, 即无限细的涡丝(Thin Filament).

下面对(57)式进行一些讨论. 需要指出, 在 $\rho \neq 0$ 的位置, 相角 θ 有良好定义(Well Defined), 相应地由 $\mathbf{u} = \nabla\theta$ 所诱导的涡旋度(Vorticity) $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \nabla\theta = 0$, 因此由(1)式可知螺度 H 在该处也为零(Trivial Curl-Free Case); 但在 $\rho = 0$ 的位置, 相角 θ 是没有良好定义的(Ill-Defined), 连带导致螺度 H 在该处也无良好定义. 因此(57)式在 $\rho = 0$ 的位置实际上不能使用, 需要用别的方法来代替; 体现在数值研究中即是说, 若无一定的技术方案来处理 $\rho = 0$ 的奇异区域, 而只是跳过奇点处理有良好定义的区域, 则最终积出来的螺度会为零. 一个例子是后文第6.3节所给出的平庸算例, 说明当不采取适当应对措施时就会出现平凡的螺度, 而与理论预期不符.

如果不采用指数形式(57)式, 而是把 ψ 写成实部、虚部相加的形式, $\psi = \phi_1 + i\phi_2$, 即引入两分量矢量 $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \phi_2)$, 则可以证明, 由 $\mathbf{u}$ 所诱导的 $\boldsymbol{\omega}$ 具有一个所谓的拓扑流结构, $\boldsymbol{\omega} \propto \delta^3(\boldsymbol{\phi})$, 也即 $\boldsymbol{\omega}$ 只在 $\|\boldsymbol{\phi}\| \neq 0$ 区域不为零, 而在其他 $\|\boldsymbol{\phi}\| = 0$ 的位置都为零^[21]. 这一方法不仅可用来从理论上讨论非平庸螺度, 亦可为数值方面寻找实用的处理手段提供思路.

(58)和(59)式中, 环量常数 $\Phi = \oint \mathbf{u} \cdot d\mathbf{s} = 2\pi$, 愈合长度(Healing Length)为 $\xi = 1$. 在远大于 $\xi = 1$ 的尺度上, 尽管 τ_{ij} 项与其他压力项相比很微小, 但它依然被认为是解答涡旋重联问题的关键^[37].

流体系统的质量定义为 $M = \int \|\psi\|^2 d^3x$. 哈密顿量由 $E = K + I$ 给出, 其中 K 是系统动能(Kinetic Energy), I 是相互作用能(Interaction Energy):

$$K = \frac{1}{2} \int \nabla\psi^* \nabla\psi d^3x, \quad (60)$$

$$I = \frac{1}{4} \int (1 - \|\psi\|^2)^2 d^3x, \quad (61)$$

ψ^* 是 ψ 的复共轭. GP方程保持能量守恒.

在GP方程之下, 量子涡旋是一种相缺陷. 涡旋中心线是速度场的奇点, 在那里流体密度为零, 相

位无法定义. 但正如下文所要展示的, 与相位相关联的物理现象十分重要, 因此我们不能忽略相位, 不能将涡旋环简化为只有中心线的形式. 在经典情况下, 同时存在两个涡旋会导致速度场的叠加; 在量子情况下, 叠加会体现在相位上. 特别是同时存在两个不共面但相互缠绕的涡旋环时——例如下文将讨论的Hopf链环——对外表现出来的现象是两个涡旋场产生的相位会互相叠加、干涉, 这是缠绕数思路中产生复杂拓扑的标志. 如果环之间在拓扑上没有相互缠绕的话, 这种扭曲则不会产生.

6 数值方法

数值模拟方面, 本文基于文献[37]所介绍的算法, 展示了文献[38–40]中求解GP方程的方法. 其中, 初始条件的选取和构建是计算的难点. 演化部分的具体算法是先对时间使用二阶斯特朗分离法(Strang Splitting Method), 再对空间进行傅里叶分解. 数值条件方面我们使用了周期性边界条件. 对于非镜像对称的方向, 通过对模拟域在该方向上取镜像实现双计算域, 与文献[67]中的技巧相似. 此方案可确保系统能量守恒.

6.1 初始条件

本方法的难点之一在于如何正确选取和生成初始条件. 原则是既要具有一定特殊性以方便计算和实际操作, 又要具有相当的普遍代表性以反映客观物理事实. 在文献[39, 40]中已经初步探讨过缠绕数为+1的Hopf链环数值演化. 为便于向读者展示这一方法, 本文选取与之对称的缠绕数为-1的Hopf链环, 形成对照. 通过这种简单的取法, 该算例可借由解析解对称性验证数值结论. 目标链环被特别地放在“盒子”中央, 目的是既可为涡旋重联的物理过程提供了一个对比参照^[68], 又能避免某些因边界条件的数值实现所引发的困难, 以及因周期性条件所导致的拓扑复杂性. 另外, 该做法还可视为对文献[66]所做真实实验的一个数值模拟.

为保证系统变量只有缠绕数不同, 两组数值实验的初始条件应尽可能相同或对称. 在时间 $t = 0$ 时, 两个涡旋环的中心分别位于(0.5, 4.5, 0)

和 $(0, -4, 0)$, 半径为 $R_0 = 8$. 两个环分别垂直于 z 轴与 x 轴, 构成一个Hopf链环. $Lk = +1$ 组的计算域为 $[-20; 20] \times [-25; 25] \times [-20; 30]$; $Lk = -1$ 组的计算域为 $[-20; 20] \times [-25; 25] \times [-30; 20]$. 为了对涡旋线和重联过程得到足够高的时间和空间分辨率, 我们取时间精度为 $\Delta t = \frac{1}{80} = 0.0125$, 空间精度为 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \frac{\xi}{3}$, 也即计算域“盒子”的格点数为 $120 \times 150 \times 150$.

对于涡旋环上的每一点 Q , 根据该点邻域内涡旋线的切线、法线和副法线, 构建一个弗勒内标架(Frenet Triad) $\{\hat{t}, \hat{n}, \hat{b}\}$. 由于本例要生成的涡旋中心线形状为正圆, 而正圆上不存在拐点, 因而总能在涡旋中心线上构建弗勒内标架. 对于计算域中的每个格点 P , 我们都能找到涡旋线上最近的一个点 Q . 这样 $\|QP\|$ 就确定了 P 到涡旋线的距离. 同时, 在法向 $\hat{n}$ 和副法向 $\hat{b}$ 共同确定的平面内, QP 还与涡旋线在 Q 点附近正交. 这一平面内, P 的极坐标为 (r, θ) , 坐标原点为 Q . 令 $r = \|QP\|$, 相位角 θ 取 QP 与 $\hat{n}$ 的夹角.

每个涡旋都对初始条件有贡献. 通过求解GP方程的二维形式, 得到满足GP方程的涡旋柱截面解. 对于第 k 个涡旋, 其解可用帕德近似(Padé Approximation)给出密度分布 ρ_{0k} [69]:

$$\rho_{0k} = \frac{\frac{11}{32}r^2 + \frac{11}{384}r^4}{1 + \frac{1}{3}r^2 + \frac{11}{384}r^4}. \quad (62)$$

第 k 个涡旋的相分布为 θ_{0k} . 对于由两个涡旋环 $k = 1, 2$ 叠加成的Hopf链环, 初始条件可写为

$$\psi_0 = \sqrt{\rho_{01}\rho_{02}} \exp(i\theta_{01}\theta_{02}). \quad (63)$$

为在初始时刻获得缠绕数不同的Hopf链环, 可改变单个涡旋环的相位取向. 如图5(a)所示, 涡旋环 v_1 在初始时刻绕 z 轴逆时针的方向, 涡旋环 v_2 取绕 x 轴逆时针的方向, 缠绕数 $Lk = \frac{1}{2}(+1 + 1) = +1$; 而图5(b)中, 保持涡旋环 v_2 不变, 改变环 v_1 与图5(a)相反, 即初始取绕 z 轴顺时针方向. 则缠绕数就变成 $Lk = \frac{1}{2}(-1 - 1) = -1$. 此二者为不同的Hopf链环.

对初始 ψ 场的计算, 考虑到同时受到两个涡旋的影响, 相位角会发生耦合, 相当于经典流体图景中涡旋的毗邻空间(Ambient Space)中的速度场分布变

得复杂. 由于缠绕数不同, 两个复杂系统的结构会有所不同.

6.2 数值求解

初始条件选定之后, 数值方法主要采用Zuccher等人在文献[37]中给出的GP方程求解方案. 该方法的主要思路是用直线涡旋的场分布来近似相对复杂的曲线涡旋. 对系统的演化推算采用的是基于非等距快速傅里叶变换(Nonuniform Fast Fourier Transforms, NFFT)的求解方法, 这一方法使用了基于Matlab平台的NFFT3工具箱对Gross-Pitaevskii方程进行求解.

在生成初始条件阶段, 仿照GP方程的二维定态解, 得到了数值“盒子”中 10^7 量级个格点的 ψ 值. 这一方法是利用傅里叶变换(FFT)先将物理空间中的离散点变换到相位空间实施时间推演, 然后再用逆向傅里叶变换(IFT)获得下一时间步的 ψ 场分布, 并将其翻译回这些格点的 ψ 值.

在本文的每组模拟实验中共进行60个单位时间, 每个单位时间包含80个时间步. 演化是单向无记忆的, 与薛定谔方程相似.

6.3 数值结果与讨论

在这60个时间步内, 缠绕数不同的两组实验高度同步与对称. 数值误差允许范围内, 重联(Reconnection)事件出现的时刻完全一致, 事件前后的形态也高度对称. 两个系统的时间序列演化结果如图14所示. 整个系统遵循方程(56)求解推演. 在两个系统中, 两组链环都相向运动, 并同时在归一化时刻 $t = 36.5$ 发生第一次重联. 随后在归一化时刻 $t = 41$ 都完成一处自重联, 产生了8-字形环, 并最终分裂成了两个环. 类似地, 在 $t = 50.5$ 时, 远处的环由于扭转发生自重联, 从而产生第三个环. 这是60个单位时间内所发生的全部重联事件.

如图15和16所示, 两个系统在重联前后的密度和相位分布也如出一辙, 局部等密度面图和等相位图都在数值精度内基本一致. 由于涡旋中心线是相位奇点, 导致相位在涡旋中心线附近数值浮动极大, 产生了图16中的褶皱, 后者展现出涡旋中心线的

图 14 (网络版彩图)初始时刻($t = 0$)缠绕数 Lk 分别为 ± 1 的两个Hopf链环涡旋系统的时间序列切片图. 二者在拓扑与能量演化上同步, 在空间上对称. 涡旋边界为 $\rho = 0.10$ 的等密度面

Figure 14 (Color online) Slice figures of time series for two Hopf-link vortices, whose initial ($t = 0$) linking numbers Lk are ± 1 , respectively. The two vortices remain synchronized in topological and energy evolution, and remain spatially symmetric. The boundary of a vortex is an equi-density surface of $\rho = 0.10$.

几何形态. 更进一步, 这些褶皱之间的等相位面则是中心线链环系统的Seifert曲面.

需要指出的是, 本文对Seifert曲面的关注是继承了文献[38–40]中研究涡旋毗邻(Ambient)空间的思想. 毗邻空间的重要性在于可借用位势论(Potential Theory)的思想考察其中的Aharonov-Bohm拓扑效应的物理本质, 而 Seifert 曲面则往往可作为等相位面联系到最小能量面.

如上文第5节所述, 在 θ 良好定义的区域上有螺度密度恒为零——为简单起见我们将这部分螺度贡献称为“平庸螺度”. 因此可以监控系统平庸部分的螺度的数值演化. 通过简单差分方法, 粗略计算(1)式并记录两个系统的平庸螺度变化, 如图17所示. 两系统的总平庸螺度保持在 $\pm 10^{-14}$ 量级, 在数值精度范围内可认为平庸螺度保持0不变. 因此可使用平庸螺度检验数值系统是否可靠.

为验证模拟的“盒子”空间充分大、边界条件鲁棒, 我们额外将 $Lk = -1$ 组计算域改为 $[-20; 20] \times$

图 15 (网络版彩图)涡旋系统第一次重联的局部变化图. (a) $Lk_0 = +1$ 的系统; (b) $Lk_0 = -1$ 的系统

Figure 15 (Color online) Demonstration of local changes of the vortex systems experiencing the first event of reconnection. (a) The vortex system with $Lk_0 = +1$; (b) the vortex system with $Lk_0 = -1$.

$[-25; 25] \times [-20; 30]$ 重新模拟计算; 发现尽管如此, 模拟结果依然不受影响, 系统是高度对称的, 且总平庸螺度在数值误差内恒为零. 换言之, 本文数值计算所选取的模拟域是充分大的, 即使改变部分方向、尺度有一定比例调整, 依然不会对结论有显著

图 16 (网络版彩图)首次重联($t = 36.5$ 时刻)前后, 系统局部相位变化. 所选等相位面为 $\theta = \pi$. (a) $Lk_0 = +1$ 等相位面; (b) $Lk_0 = -1$ 等相位面

Figure 16 (Color online) Changes of the local phase of a vortex system, before and after the occurrence of the first event of reconnection (at the moment $t = 36.5$). The iso-phase surfaces chosen are $\theta = \pi$: (a) The iso-phase surface of $Lk_0 = +1$; (b) the iso-phase surface of $Lk_0 = -1$.

图 17 (网络版彩图)初始缠绕数不同的两个量子涡旋系统, 其总平庸螺度随时间的演化. 数值精度 $\pm 10^{-14}$

Figure 17 (Color online) The two quantum vortex systems with different initial linking numbers: the evolution of helicity versus time, with numerical accuracy $\pm 10^{-14}$.

影响. 所得的数值结论对边界条件是鲁棒的.

但是需要注意, 系统的螺度其实是由非平庸部分贡献的. 因此如果忽略非平庸螺度, 只考虑平庸部分, 就会导致系统总螺度恒为零. 由此产生的后果是(6)式会出现自缠绕数与高斯互缠绕数相互抵消的现象, 即

$$Sl(v_1) + Sl(v_2) + Lk(v_1, v_2) = 0. \quad (64)$$

从图16知, $t = 36.5$ 时刻附近为重联发生的分水岭. 为便于描述, 不妨假设重联在 $t = 36.5$ 时发生. 那么当 $t < 36.5$ 时, v_1 和 v_2 两个曲线涡旋系统的总高斯缠绕数已知为 $Lk(v_1, v_2) = \pm 1$. 从而由(64)会导致两个涡旋自缠绕数之和为 ∓ 1 . 而实际上 v_1 和 v_2 都是平庸环, 不存在自缠绕, 自缠绕数为零. 与(64)式结论是矛盾的.

因此, 对(1)式需要使用特殊的技巧才能正确计算非平庸螺度. 我们在后续工作中将着力寻找合适的处理奇异区域的数值办法, 而非简单跳过奇异区. 譬如可有如下的可行方案: (1) 设计一种基于离散格点来搜索涡旋线的新差分方法, 以确定涡旋线的位置和取向, 从而计算非平庸螺度; (2) 设计一种基于framing技巧处理涡旋线的办法, 即考察偏离涡旋线微小距离的“影子”曲线, 以后者的大范围拓扑数来代替前者的大范围拓扑数. 方案一需要特别注意同一个差分格子中容纳两根或以上涡旋线的情况, 也即在重联区域附近进行差分格子划分时要特别小心. 方案二则需要特别注意framing的取法, 以避免给拓扑数带来不应有的附加改变(参考文献[39, 40]).

6.4 更复杂的情形: 三叶结涡旋的求解

基于上述方法我们可以研究更复杂的纽结涡旋, 如三叶结(Trefoil Knot); 目前该工作正在进行当中. 下面以此为例展示这类研究中常见的技术困难, 以期读者后续处理其他复杂位形时可作为技术参考.

我们考察将初始位形推广到三叶结这一更复杂涡旋位形时的重联演化. 此工作的背景是近年来在水中涡旋演化[45, 46]以及生物DNA转录复制[47, 48]中观察到的环面纽结/链环的级联退化现象. 我们的目标是发现并验证流体涡旋纽结复杂系统的自发无约束退化过程中的数学规律[50, 51]. 这一工作的当前难点在于初始化形状为三叶结的量子涡旋. 与圆环这种简单纽结不同, 三叶结不能从简单纽结整合叠加得到. 因此需要针对复杂纽结构造一套全新的稳态Gross-Pitaevskii (GP)方程初始化方案. 这不但包括对几何形状复杂的涡旋求解, 更包括优化原本针对直线涡旋设计的初始化算法, 并改进帕德近似的

使用方法.

对于比Hopf链环更复杂的纽结或链环形态涡旋的求解, 不但是物理学问题, 更是数值模拟上的难题. 如上文所述, 对于复杂的涡旋线, 无法像直线一样相对精确地给出涡旋对场的影响. 因此, 作为一种妥协, 一般选择距离场点最近的一段微小曲线, 并将这段曲线所切的直线视为源涡旋的中心线, 从而转化为直线涡旋对场的影响、近似得到场点的值.

对Hopf链环而言, 可以用正圆这种高度对称的几何形状来表征. 一方面, 这样不会出现拐点, 从而确保了初始状态下场的密度和相位在涡旋线以外都可导, 使得流体力学意义依然有效; 另一方面, 由于两个分支可以分开计算, 使得除圆心外的其他场点都只有一个最近点可以选取. 此外, 正圆的形状也很容易根据场点坐标找到最近点的精确解. 相比之下, 复杂曲线就困难得多, 如图18.

以三叶结为例, 想要找到涡旋线上距离场点的最近点要面临多个难题, 如图18.

首先, 涡旋本身只有一个分支, 因此不能分解为更为简单的纽结再叠加求解. 但是对于任意场点, 三叶结上会有多个部分向其施加影响. 即便只考虑最近点, 三叶结上也有无穷多个场点同时具有两个或更多个最近点(为方便起见, 下文将这种场点称为“特殊场点”), 而正圆则只有有限个(1个)特殊场点.

其次, 虽然在使用NFFT方法求解GP方程时只需要离散的场点(方便起见, 下文简称“格点”), 从而避开那些特殊场点. 但是在特殊场点附近, 格点间由于选择的最近点不连续, 导致初始流体场的密度和相位也会不连续. 对于不连续的流场, 其构造出的

涡旋往往不稳定, 从而导致无法进一步研究涡旋演化.

最后, 由于三叶结的方程会包含很多周期性函数, 不但难以找到最近点精确解, 而且数值求最近点时也很容易陷入局部最优解. 这就更容易导致上一条所说的问题, 制造出不连续的初始流场, 进而使构造出的涡旋不稳定、无法用于研究(如图18所示的不稳定情况).

对于上述问题, Proment等人在其2012年的工作中给出了一个近似求解方案: 在文献[70]图2-6当中, 由场点和轮胎面中心轴确定一个平面, 近似将环面纽结与这个平面的交点视为到格点的最近点. 他们在三叶结中, 选择了一个特殊的类, 可视为环面纽结(Torus Knot, 环绕轮胎面构成的纽结). Proment等人没有选择三叶结上的最近点作为源点, 而是采取了一个近似: 以轮胎面中心轴和场点确定一个平面, 找到平面与三叶结(或更复杂的环面纽结)的交点. 视环面纽结的种类, 对于任意场点, 这些交点只有有限个(三叶结为4个), 这样只需对比4个点到格点的距离, 就可以找到一个近似的最近点, 可以大大简化计算复杂度.

Proment等人的工作是可操作的: 只要轮胎面的两个半径都足够大, 环面纽结的参数足够小, 这样求得的“最近点”误差就足以忽略不计. 在文献[70]中, 他们也实际按照这种方式给出了不同环面纽结涡旋的动态演化. 但是在实际计算中, 环面纽结的大小受到计算内存等因素的限制, 使得其误差不可忽略, 而且误差大小也难以估计. 我们希望在本文工作的基础上, 为三叶结等复杂纽结涡旋, 在GP方程下构造出更理想的涡旋初态. 从三叶结出发, 开发出适合更多复杂纽结的初始化方法, 并在GP方程框架下讨论其拓扑学和物理学演化性质. 截至目前我们已经尝试了改良牛顿迭代法等方法, 来对三叶结纽结的所有格点以高精度数值方法求最近点. 并总结出了上文所述的诸多难题. 未来将会针对三叶结方程改良算法, 以期得到比Proment的工作少一部分误差的初始涡旋.

图 18 (网络版彩图)由于未处理好特殊场点, 导致初始化的三叶结涡旋不稳定

Figure 18 (Color online) Unstable state of an initialized trefoil knot vortex due to inappropriate treatment of the field points.

7 结论

拓扑流体力学具有重要的理论价值, 在国际上

一直是理性力学的重要分支,但在国内并未受到应有的重视.为介绍这一科研方向,本文的第一部分试对这一领域做综述介绍:首先对该领域的发展史作了简要回顾;其次,重点介绍国际上在揭示流体螺度(Helicity)拓扑内涵方面所做的持续努力,包括螺度与流体纽结自缠绕数、高斯互缠绕数之间的关系,以及近年来发现的与纽结多项式等拓扑不变量之间的关系;第三,介绍关于流体纽结拓扑复杂度以及能量-结构复杂性关系的研究,包括国际上新观察到的级联退化现象以及我们在这方面的一些工作和进一步的思路.

本文第二部分转向数值方面,试以简单的例子来介绍对理论进行数值模拟的实用方法.具体来

说就是考察超流体系统中涡旋的重联,基于Gross-Pitaevskii 方程构造玻色-爱因斯坦凝聚体的量子涡旋链环.对具有不同缠绕数的对称基本链环涡旋使用非等距快速傅里叶变换进行数值求解,推演其时空演化;通过监控物理过程来检测或验证拓扑量在流体纽结/链环量子涡旋结构中的不变性与对称性.本文以缠绕数相反(也即互为镜像)的两种Hopf链环为例完整展示上述数值方法.结果表明它们具有高度相似性,表现在系统的缠绕数守恒、重联时间同步、(包括重联时刻在内的同一时刻的)空间形态高度对称.最后,以三叶结为例展示了复杂纽结涡旋求解过程中可能遇到的技术困难,以便读者后续做类似研究时作为参考.

参考文献

- 1 Arnold V I, Khesin B A. Topological Methods in Hydrodynamics. Berlin: Springer-Verlag, 1998
- 2 Kelvin L. On vortex motion. Trans Roy Soc Edin, 1869, 25: 217–260
- 3 Woltjer L. A theorem on force-free magnetic fields. Proc Natl Acad Sci USA, 1958, 44: 489–491
- 4 Moffatt H K. The degree of knottedness of tangled vortex lines. J Fluid Mech, 1969, 3: 117–129
- 5 Saffman P G. Vortex Dynamics. Cambridge: Cambridge University Press, 1992
- 6 Moffatt H K, Ricca R L. Helicity and the calugareanu invariant. Proc R Soc A-Math Phys Eng Sci, 1992, 439: 411–429
- 7 Ricca R L, Moffatt H K. The helicity of a knotted vortex filament. In: Moffatt H K, Zaslavsky G M, Comte P, et al, eds. Topological Aspects of the Dynamics of Fluids and Plasmas. Publs: Kluwer Acad, 1992. 225–236
- 8 Călugăreanu G. Sur les classes d'isotopie des noeuds tridimensionnels et leurs invariants. Czech Math J, 1961, 11: 588–625
- 9 White J H. Self-linking and the gauss integral in higher dimensions. Am J Math, 1969, 91: 693–728
- 10 Moffatt H K. Magnetic Field Generation in Electrically Conducting Fluids. Cambridge: Cambridge University Press, 1983
- 11 Moffatt H K. Helicity and singular structures in fluid dynamics. Proc Natl Acad Sci USA, 2014, 111: 3663–3670
- 12 Su W D. Helicity Analysis and Differential Geometry (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Beijing: Peking University, 1998 [苏卫东. 螺度分析与微分几何. 博士学位论文. 北京: 北京大学, 1998]
- 13 Moreau J J. Constantes d'un îlot tourbillonnaire en fluid parfait barotrope. C R Acad Sci Paris, 1961, 252: 2810–2812
- 14 Berger M A, Field G B. The topological properties of magnetic helicity. J Fluid Mech, 1984, 147: 133–148
- 15 Moffatt H K. Helicity-invariant even in a viscous fluid. Science, 2017, 357: 448–449
- 16 Xiong S, Yang Y. Construction of knotted vortex tubes with the writhe-dependent helicity. Phys Fluids, 2019, 31: 047101
- 17 Scheeler M W, van Rees W M, Kedia H, et al. Complete measurement of helicity and its dynamics in vortex tubes. Science, 2017, 357: 487–491
- 18 Liu X, Ricca R L. The Jones polynomial for fluid knots from helicity. J Phys A, 2012, 45: 205501
- 19 Liu X, Ricca R L. On the derivation of the HOMFLYPT polynomial invariant for fluid knots. J Fluid Mech, 2015, 773: 34–48
- 20 Ricca R L, Liu X. The Jones polynomial as a new invariant of topological fluid dynamics. Fluid Dyn Res, 2014, 46: 061412
- 21 Duan Y S, Liu X, Zhang P M. Decomposition theory of the U(1) gauge potential and the London assumption in topological quantum mechanics. J Phys Condens Matter, 2002, 14: 7941–7947
- 22 Witten E. Quantum field theory and the Jones polynomial. Commun Math Phys, 1989, 121: 351–399
- 23 Barenghi C F, Ricca R L, Samuels D C. How tangled is a tangle? Phys D-Nonlinear Phenomena, 2001, 157: 197–206
- 24 Berger M A. An energy formula for nonlinear force-free magnetic fields. Astron Astrophys, 1988, 201: 355–361
- 25 Russell A J B, Yeates A R, Hornig G, et al. Evolution of field line helicity during magnetic reconnection. Phys Plasmas, 2015, 22: 032106
- 26 Kauffman L H. Knots and Physics. Singapore: World Scientific, 2001

- 27 Jones V F R. Hecke algebra representations of braid groups and link polynomials. *Ann Math*, 1987, 126: 335–388
- 28 Freyd P, Yetter D, Hoste J, et al. A new polynomial invariant of knots and links. *Bull Amer Math Soc*, 1985, 12: 239–247
- 29 Przytycki J H, Traczyk P. Conway algebras and skein equivalence of links. *Proc Amer Math Soc*, 1987, 100: 744–748
- 30 Kauffman L H. On Knots. Princeton: Princeton University Press, 1987
- 31 Uddin M A, Oshima N, Tanahashi M, et al. A study of the coherent structures in homogeneous isotropic turbulence. *Proc Pak Acad Sci*, 2009, 46: 145–158
- 32 Moffatt H K. The energy spectrum of knots and links. *Nature*, 1990, 347: 367–369
- 33 Ricca R L. Structural complexity of vortex flows by diagram analysis and knot polynomials. In: Zelinka I, Sanayei A, Zenil H, et al, eds. *How Nature Works: Complexity in Interdisciplinary Research and Applications (Emergence, Complexity and Computation)*. Berlin: Springer-Verlag, 2014, 5: 81–100
- 34 Maggioni F, Ricca R L. On the groundstate energy of tight knots. *Proc R Soc A*, 2009, 465: 2761–2783
- 35 Ricca R L, Maggioni F. On the groundstate energy spectrum of magnetic knots and links. *J Phys A*, 2014, 47: 205501
- 36 Oberti C, Ricca R L. On torus knots and unknots. *J Knot Theor Ramifications*, 2016, 25: 1650036
- 37 Zuccher S, Caldari M, Baggaley A W, et al. Quantum vortex reconnections. *Phys Fluids*, 2012, 24: 125108
- 38 Zuccher S, Ricca R L. Helicity conservation under quantum reconnection of vortex rings. *Phys Rev E*, 2015, 92: 061001
- 39 Zuccher S, Ricca R L. Relaxation of twist helicity in the cascade process of linked quantum vortices. *Phys Rev E*, 2017, 95: 053109
- 40 Zuccher S, Ricca R L. Twist effects in quantum vortices and phase defects. *Fluid Dyn Res*, 2018, 50: 011414
- 41 Laing C E, Ricca R L, Sumners D W L. Conservation of writhe helicity under anti-parallel reconnection. *Sci Rep*, 2015, 5: 9224
- 42 Marenduzzo D, Micheletti C, Orlandini E, et al. Topological friction strongly affects viral DNA ejection. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2013, 110: 20081–20086
- 43 Sumners D W, Ernst C, Spengler S J, et al. Analysis of the mechanism of DNA recombination using tangles. *Quart Rev Biophys*, 1995, 28: 253–313
- 44 Mesgarnezhad M, Cooper R G, Baggaley A W, et al. Helicity and topology of a small region of quantum vorticity. *Fluid Dyn Res*, 2018, 50: 011403
- 45 Kleckner D, Irvine W T M. Creation and dynamics of knotted vortices. *Nat Phys*, 2013, 9: 253–258
- 46 Kleckner D, Kauffman L H, Irvine W T M. How superfluid vortex knots untie. *Nat Phys*, 2016, 12: 650–655
- 47 Shimokawa K, Ishihara K, Grainger I, et al. FtsK-dependent XerCD-dif recombination unlinks replication catenanes in a stepwise manner. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2013, 110: 20906–20911
- 48 Stolz R, Yoshida M, Brasher R, et al. Pathways of DNA unlinking: A story of stepwise simplification. *Sci Rep*, 2017, 7: 12420
- 49 Arnold V I. The asymptotic Hopf invariant and its applications. In: *Proceedings of the Summer School in Differential Equations at Dilizhan. Erevan (in Russian): Armenian Acad Sci*, 1974. 229–256 [English translation: *Sel Math Sov*, 1986, 5: 327–375]
- 50 Liu X, Ricca R L. Knots cascade detected by a monotonically decreasing sequence of values. *Sci Rep*, 2016, 6: 24118
- 51 Ricca R L, Liu X. HOMFLYPT polynomial is the best quantifier for topological cascades of vortex knots. *Fluid Dyn Res*, 2018, 50: 011404
- 52 Kida S, Takaoka M, Hussain F. Reconnection of two vortex rings. *Phys Fluids A-Fluid Dyn*, 1989, 1: 630–632
- 53 Kida S, Takaoka M. Vortex reconnection. *Annu Rev Fluid Mech*, 1994, 26: 169–177
- 54 Hussain F, Duraisamy K. Mechanics of viscous vortex reconnection. *Phys Fluids*, 2011, 23: 021701
- 55 Paoletti M S, Fisher M E, Lathrop D P. Reconnection dynamics for quantized vortices. *Phys D-Nonlinear Phenomena*, 2010, 239: 1367–1377
- 56 Yoshida H. Construction of higher order symplectic integrators. *Phys Lett A*, 1990, 150: 262–268
- 57 Priest E, Forbes T. *Magnetic Reconnection*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000
- 58 Lau Y T, Finn J M. Magnetic reconnection and the topology of interacting twisted flux tubes. *Phys Plasmas*, 1996, 3: 3983–3997
- 59 Lugomer S. Vortex ring reconnection in laser-matter interactions. *J Fluids Struct*, 1999, 13: 647–661
- 60 Vologodskii A V, Crisana N J, Laurie B, et al. Sedimentation and electrophoretic migration of DNA knots and catenanes. *J Mol Biol*, 1998, 278: 1–3
- 61 Barenghi C F, Skrbek L, Sreenivasan K R. Introduction to quantum turbulence. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2014, 111: 4647–4652
- 62 Vinen W F. An introduction to quantum turbulence. *Philos Trans R Soc A-Math Phys Eng Sci*, 2008, 366: 2925–2933
- 63 Kerr R M. Vortex stretching as a mechanism for quantum kinetic energy decay. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 224501
- 64 Scheeler M W, Kleckner D, Proment D, et al. Helicity conservation by flow across scales in reconnecting vortex links and knots. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2014, 111: 15350–15355
- 65 Chatelain P, Kivotides D, Leonard A. Reconnection of colliding vortex rings. *Phys Rev Lett*, 2003, 90: 054501

- 66 Kimura Y, Moffatt H K. Reconnection of skewed vortices. *J Fluid Mech*, 2014, 751: 329–345
- 67 Koplik J, Levine H. Vortex reconnection in superfluid helium. *Phys Rev Lett*, 1993, 71: 1375–1378
- 68 Walmsley P M, Tompsett P A, Zmeev D E, et al. Reconnections of quantized vortex rings in superfluid ^4He at very low temperatures. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 125302
- 69 Berloff N G. Padé approximations of solitary wave solutions of the Gross-Pitaevskii equation. *J Phys A-Math Gen*, 2004, 37: 1617–1632
- 70 Proment D, Onorato M, Barenghi C F. Vortex knots in a Bose-Einstein condensate. *Phys Rev E*, 2012, 85: 036306

Topological fluid mechanics and its new developments

GUAN Hao¹, ZUCCHER Simone², RICCA Renzo L^{3,4} & LIU Xin^{1,4*}

¹*Institute of Theoretical Physics, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China;*

²*Department of Computer Science, University of Verona, Verona 37134, Italy;*

³*Department of Mathematics & Applications, University of Milano-Bicocca, Milano 20125, Italy;*

⁴*Beijing-Dublin International College, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China*

Topological fluid mechanics is a crucial area of classical mechanics, with remarkable theoretical significance and wide applications in practice. In this paper, we expect to present an introductory review of the direction, for the purpose of attracting more domestic researchers of China to enter into this important area. Our emphasis is placed on the topological essence of fluid helicity. We will give the relationship between helicity and mathematical knotted field theory (i.e., that between helicity and the mutual- and self-linking numbers, as well as the fluid knot polynomial topological invariants constructed in terms of helicity recently discovered by the authors), and give an introduction to the international research on energy-structural complexity relationship for a fluid vortex knot ensemble. Moreover, typical numerical methods are also demonstrated through examples of reconnections occurring in superfluid vortex knots/links. Expectedly, a combination of the theoretical framework and numerical techniques may contribute to the reader a comprehensive understanding of the main target, research methodology and potential technical difficulties in practice in this interdisciplinary field of cutting-edge research world-wide.

mathematical methods in theoretical fluid mechanics, topological fluid mechanics, fluid helicity, topological invariants of fluid knots, energy-structural complexity relationship, numerical simulations, reconnections of quantum vortices in superfluid flows

PACS: 47.10.-g, 47.10.A, 47.27.-i, 47.37.+q, 02.40.-k

doi: [10.1360/SSPMA-2019-0101](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2019-0101)