arXiv:2304.03306v1 [cond-mat.stat-mech] 6 Apr 2023

受限极性活性流体中经由振荡态通向湍流转捩路径

白谷空良,[1,*] 竹内一将 A.,[1,2,†] 和西口大樹[1,3,‡]
[1] *Department of Physics, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan*
[2] *Institute for Physics of Intelligence (ipi), The University of Tokyo,7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan*
[3] *PRESTO, Japan Science and Technology Agency, 4-1-8 Honcho, Saitama 332-0012, Japan*
（日期：2023年4月10日）

我们报告了一种新的活性湍流产生路径，该路径是在限域下极性活性流体模型的数值模拟中观察到的。为处理任意几何形状下的大规模计算，我们开发了一种基于图形处理器的方案，可统一用于任意边界形状。对于圆形约束，随着半径增大，我们发现了一系列转变：首先由单个定常涡旋转变为一对振荡涡旋，随后在振荡动力学与混沌动力学之间发生再入转变，最终达到活性湍流。事实证明，第一次转变具有滞后性，且振荡态的出现与亚临界霍普夫分岔相一致。在由两个重叠圆组成的哑铃形边界中，我们观察到了一种与先前实验中报道的铁磁-反铁磁涡旋序转变相当的转变，但事实证明，该转变点表现出定性不同的几何依赖性。

I. 引言

混沌和湍流的转捩路径一直是高雷诺数 [1, 2]流体力学和统计物理学的核心议题之一。然而，在高雷诺数领域之外也广泛观察到了湍流现象，其中一个显著例子是低雷诺数活性物质系-统中的活性湍流 [3] ，对于这类系统，湍流转捩路径仍基本未被探索。活性物质是指由自驱动粒子组成的集合，并且由于取向相互作用，常常表现出集体运动。尽管理论模型中 [4] 经常会出现有序的集体运动，而且在实验 [5–7], 中也偶有观察到，但去稳定化相互作用同时发挥作用并使集体运-动变得湍流化的情况也并不少见。这种活性湍流确实已在各种实验系统中被观察到，例如重构的细胞骨架系统 [8], 、电动Janus粒子 [9], 、精子 [10]以及支气管上皮细胞培养物 [11]。正如这些研究所展示的，活性湍流的特征是在低雷诺数下仍具有包含许多涡旋和旋涡的集体运动；除其他方法外，人们还通过功率谱的标度行为 [3]对其进行了诊断。研究人员还提出了流体动力学描述，成功再现了体相活性湍流的动力学和统计性质 [3, 12–14]。

除了体相系统方面的这些进展，边界的存在和限域也带来了有趣的新视角。由于流体力学描述中的边界条件先验未知，理论研究往往难以开展；而且计算成本高昂，基于智能体的模拟还需纳入流体力学效应。实验表明，活性湍流在限域条件下往往会自发组织成有序态。例如，在圆形几何结构中观察到了有序涡旋，在通道中观察到了定向流；这类现象出现在多种系统中，如细菌悬浮液 [15, 16], 上皮细胞 [17], 和重构的细胞骨架 [18, 19]。据报道，柱体可通过钉扎流场中的拓扑缺陷，使细菌活性湍流发生整流 [20–22]。研究人员还考察了更复杂的几何结构，如相互连通的圆形腔室，并发现其中存在反铁磁与铁磁涡旋有序之间的转变 [23–25]。

因此，自然会问：随着限域减弱，有序的限域下活性流如何失稳，并最终演化为体相活性湍流，即通往活性湍流的路径。在相关文献中，通往活性湍流的路径通常是在无边界条件下，通过改变活性来研究的；对于不同的对称性，人们提出了不同的路径 [3]: 活性向列流体往往经历类似于可激发系统的转变 [26], ，而一些可压缩的极性活性流体则由于极性有序的自对流而表现出振荡现象 [27, 28]。相比之下，迄今为止，对受限系统的研究仅限于少数情况。对于通道，数值研究了向活性向列湍流的转变，并报道其属于定向渗流普适类 [29], ，这在一定程度上类似于Navier–Stokes流体中由剪切驱动的向湍流转变 [30, 31]。对于圆形限域，关于重构向列细胞骨架的实验表明，在强限域下，拓扑缺陷在涡旋的动力学与转变中发挥着关键作用 [19]。据我们所知，迄今尚未针对极性活性系统研究此类通往湍流的路径。

本文中，我们利用一种称为.....的极性活性湍流原型模型，确定了极性活性流体在不同限域条件下的湍流转捩路径。

* sora.shiratani@phys.s.u-tokyo.ac.jp
† kat@kaztake.org
‡ nishiguchi@noneq.phys.s.u-tokyo.ac.jp

Toner-Tu-Swift-Hohenberg（TTSH）方程 [3, 12–14] 以及先前关于细菌湍流的实验所确定的边界条件 [21]。通过增大圆形约束的半径，我们发现了一系列转变：从单个定常涡旋开始，经过中间的振荡态，最终达到活性湍流。第一次转变是从单个定常涡旋转变为一对周期性振荡的涡旋，并且结果表明这一转变具有滞后性。随后是一系列跨越周期态和混沌振荡的转变，以及一个准周期态；该准周期态由两个比值为无理数的基本频率组成，之后系统达到最终的湍流态。这种异常的湍流转变路径是一种新颖情景，不同于传统Navier-Stokes湍流 [1, 2] 以及通道中活性向列相 [29]已知的情景。这一发现得益于我们在此开发的基于GPU的求解器，它能够高效地对任意边界形状下的TTSH 方程进行积分。GPU实现使我们能够在合理时间内完成高分辨率计算，这对于正确识别中间振荡态和转变至关重要。它还帮助我们刻画了转变的详细性质，尤其是李雅普诺夫指数，因为计算这些指数需要大量额外计算。由于我们的方案能够以统一方式处理任意边界构型，我们预计它将成为预测限域下活性湍流行为的有用平台，也可用于设计细菌湍流的实验装置。

本文的组织结构如下。第 II 节介绍我们的计算方案，包括如何在任意形状的几何结构下实现计算的完全自动化、普通方案可能引入的伪影，以及图形处理器实现的优势。随后，结果分两节呈现。第 III 节讨论圆形限域，我们揭示了滞后的静止态-振荡态转变，以及随后发生的振荡态与混沌态之间的转变。第IV节报告哑铃形边界下的模拟结果；该边界由两个重叠圆组成，在此被选作具有复杂边界形状的TTSH方程的测试案例。在这种几何结构中，我们发现了一种与先前实验报告的铁磁-反铁磁涡旋序转变相当的转变 [24, 25], 但转变点表现出定性不同的几何依赖性。第V节专门讨论相关问题。最后，我们在第 VI 节总结结果并给出结论性评述。

II. 方法

A. 模型

我们采用 TTSH 方程，该方程描述致密细菌悬浮液中自发形成的湍流集体运动的体行为 [3, 12–14, 21]。在其无量纲形式 [21],下，该方程为：

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}=0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}+\lambda\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}=a\mathbf{v}-b\mathbf{v}^2\mathbf{v}-\left(1+\nabla^2\right)^2\mathbf{v}-\boldsymbol{\nabla}p, \tag{2}$$

其中，$\mathbf{v}(\mathbf{x}\quad t)$ 是细菌的粗粒化速度场，p 是确保不可压缩性的有效压力，而 $\lambda,\ a,\ b$ 是与 $\mathbf{x}$、t、$\mathbf{v}$ 或 p无关的模型参数。这里，按照文献 [21],，我们以Swift-Hohenberg型项$\left(1+\nabla^2\right)^2\mathbf{v}$所确定的特征长度和时间尺度为单位，分别表示无量纲坐标$\mathbf{x}$ 和时间 t；该项另有相应系数。因此，Swift-Hohenberg型项激发的特征波数 $|\mathbf{k}_*|$ 等于 1，所以涡旋在实际空间中的典型尺寸为 2π。对于*Bacillus subtilis* [21]的细菌湍流，这对应于$\approx 105\ \mu\mathrm{m}$。本研究聚焦于二维系统，以便将我们的结果与实验观测进行比较。

TTSH 方程的边界条件由文献 [21], 通过实验确定为$\mathbf{v}\quad\equiv(v_x,\ v_y)\ =0$ 以及涡量 $\omega\equiv\partial_x v_y-\partial_y v_x=0$, 至少对于该文献所采用的实验条件是如此。随后，可以通过在 TTSH 方程中加入阻尼项，以涡量方程 [21]的形式，将边界（以及障碍物）的存在纳入模型：

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}=0, \tag{3}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\omega}{\partial t}+\lambda\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\omega&=a\omega-b\boldsymbol{\nabla}\times\left[\mathbf{v}^2\mathbf{v}\right]\\&\quad-\left(1+\nabla^2\right)^2\omega-\gamma_{\mathbf{v}}\boldsymbol{\nabla}\times\left[K(\mathbf{x})\mathbf{v}\right]-\gamma_\omega K(\mathbf{x})\omega,\end{aligned} \tag{4}$$

其中，$K(\mathbf{x})$ 是一个非负标量场，满足 $K(\mathbf{x})\approx 0$ 系统内部，且 $K(\mathbf{x})\approx 1$ 系统外部；$\gamma_{\mathbf{v}},\ \gamma_\omega$ 是表示阻尼强度的正参数。式 (4) 中的第一项阻尼相当于在式 (2) 中加入阻尼项 $-\gamma_{\mathbf{v}}K(\mathbf{x})\mathbf{v}$，以防止$\mathbf{v}$ 在系统外部区域增长（$K\approx 1$，称为掩模区域），同时不影响系统内部区域（$K\approx 0$，未掩模区域）。第二项阻尼 $-\gamma_\omega K(\mathbf{x})\omega$ 对涡量起到相同作用。下文中，我们取 $(a,\ b,\ \lambda,\ \gamma_{\mathbf{v}},\ \gamma_\omega)\ =(0.5,\ 1.6,\ 9,\ 40,\ 4)$。据文献 [21]报道，这组参数值能够定量再现实验结果（本文所用参数值列表见附录 B 中的表 I）。

B. 计算

尽管我们采用标准的伪谱方法对 TTSH 方程进行积分，但这并非易事，因为《自然》要求进行大规模计算。困难主要有两个具体原因。首先，如前所述，我们使用由阻尼项表示的虚拟边界。这

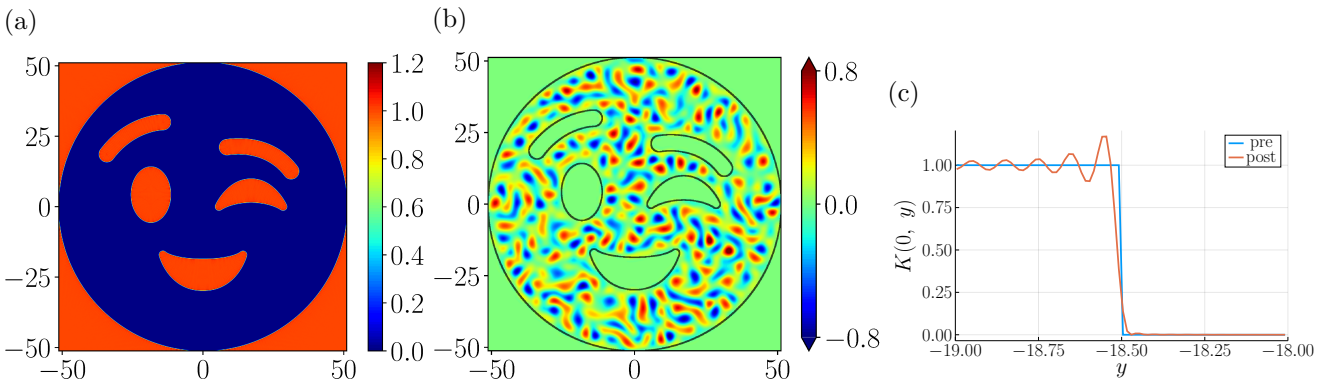

图 1：Emoji边界。(a) 由我们的自动掩模生成器生成的掩模 $K(\mathbf{x})$。(b)使用所生成掩模进行模拟得到的涡量场快照。请注意，本文所有涡量快照均使用此处显示的色标。另请参见影片S1 [32]。(c) 在 $x = 0$ 处切片的自动掩模生成器中低通滤波前后的 Emoji掩模。

种方法有时会遇到问题，因为$\mathbf{v}$ 和 ω 会穿透到系统外的阻尼区域。为避免伪影，阻尼壁需要足够厚，使穿透的场衰减至几乎为零。其次，空间离散化间隔 Δx 必须足够小，因为掩膜场 $K(\mathbf{x})$的微小变化可能影响结果，下一节将对此进行说明。幸运的是，只要实现得当，该模型对时间离散化间隔 Δt 并不十分敏感。因此，我们能够使用欧拉方法并高效地获得收敛结果。算法的详细说明见附录 C。我们还仔细利用了图形处理器的性能（见附录 E）。考虑到这些特性，除非另有说明，我们在具有 $\Delta x = 0.005$ 的 8192×8192 方形晶格上离散化模型，并以 $\Delta t = 0.01$ 模拟其时间演化。请注意，大部分计算是在掩模区域内完成的（通常占面积的 90 %），以构建一道厚屏障，确保穿透的场衰减。

C. 掩模生成

虽然掩膜场 $K(\mathbf{x})$ 的物理含义很直观，但由于伪谱方法所带来的限制（见附录D），在设计适合计算的 $K(\mathbf{x})$ 时仍应格外谨慎。其中一项限制是三次非线性情况下用于反混叠的$_{1\ 2}$ 规则（见附录C）。简而言之，为了正确积分 TTSH 方程的非线性项，$K(\mathbf{x})$不应包含高波数模态，因此不能使用朴素的阶跃函数式二值掩码。一个直观的处理方法是使用 tanh等缓慢变化的函数，在$K = 0$ (未掩模)和 $K = 1$ (已掩模)之间对间隙进行插值，但这并不是理想的解决方案，因为 tanh 即使其振幅显著较小，仍包含高波数模态。

为克服这些困难，我们采用了一种截然不同的方法，通过低通滤波器自动生成严格满足所有要求的掩模$K(\mathbf{x})$（详情见附录 D）。因此，唯一需要的输入是一个指示掩模位置的二值标量场。图 1 展示了一个玩具示例，其中使用二值化的 Unicode 表情符号 [33] 作为边界（另见影片 S1 [32]）。由于低通滤波，生成的掩模 $K(\mathbf{x})$ 会像图 1(c) 所示那样振荡。尽管这种副作用或多或少不可避免，但可以通过增加额外的低通滤波操作来抑制振荡，代价是清晰度降低。不过，我们有意没有采取这种做法，因为我们优先考虑清晰度，而且没有发现任何明显的伪影。

III. 圆形限域

A. 研究动机与背景

圆是仅由其半径 R参数化的最简单几何形状之一，正如引言部分所综述的那样，这种简洁性长期以来一直激发着实验研究的兴趣。特别是，有研究报道称，如果受到限制，细菌流动可以稳定成单个涡旋

在足够小的圆形几何中[15, 24, 25], , 而相反的、无约束的极限对应于湍流。这促使我们针对各种半径 R 在圆形区域内进行数值模拟，并研究了此情况下通往主动湍流的路径。除非另有说明，我们从随机初始状态开始，并舍弃瞬态过程，以确保系统处于稳态。请注意，由图形处理器实现的高分辨率计算在此处至关重要（见附录E），因为事实证明， R 中的微小变化可能会影响流动的定性特征。

B. 结果概述

首先，我们概述在该几何结构中获得的结果。我们的计算揭示了一个丰富的相图，其中包含不同数量的涡旋 [图 2(a)] 以及不同的动力学状态 [图 2(b)和影片 S2-S8 [32]] ，具体取决于半径 R。由于阻尼很强，在 $R \lesssim 5.1$ 时观察不到涡旋；在 $R = 5.2$ 附近，我们观察到一个在圆心生成的单涡旋定常态（图 2 中的蓝色框以及影片 S3 [32]）。随着 R 增大，涡旋数量增加到两个（橙色框）、四个（绿色框）以及更多（紫色框）。一旦生成多个涡旋，动力学就会变为非定常。具体而言，在 $R = 5.4$ 附近观察到的第一种非定常态由一对振荡的涡旋组成，如图3 和影片 S4 [32]所示。单涡旋定常态与涡旋对振荡态之间的转变将在第 III D 节中详细刻画。

为了更定量地表征动力学变化，我们测量了涡量场的时间功率谱密度（PSD）（图 4），其定义为。

$$S(\Omega) \equiv \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{x}} \left| \sum_{t} \omega(\mathbf{x},\ t) e^{-i\Omega t} \right|^2 . \tag{5}$$

在 $R = 5.4$ （视频 S4 [32]）中，我们通过由单个基本频率及其谐波组成的 PSD 确认了周期态振荡。在 $R = 5.6$ （视频 S5 [32]）中，第一个混沌区域突然出现，而振荡态动力学仍然可以观察到。在 $R = 5.8$ （视频S6[32]）中，系统重新恢复规律性，但另一个基本频率出现，振荡变为准周期态（基本频率为0.01125 和 0.0175）。与此同时，系统现在容纳了四个涡旋（见图2，视频S2 [32]）。从 $R = 6.0$ 到 $R = 7.4$，系统在混沌态和振荡态之间来回切换（见视频 S7[32]， $R = 7.2$），直到最终在 $R = 7.6$ 陷入混沌态（视频S8 [32]），再也没有恢复。从$R = 7.6$开始，系统拥有超过四个涡旋，其数量随着 R 增加。

在下文中，我们将刻画单涡旋定常态（第 IIIC 节）以及向涡旋对振荡态（第 IIID 节）的转变。然后我们将评述在这种几何结构中观察到的湍流转捩路径（第 IIIE 节）。

C. 单涡旋稳态

在 $R = 5.2$ （图 2 中的蓝色方框）附近观察到的这种状态下，会产生一个单涡旋，并位于圆的中心。涡量的符号由我们随机生成的初始条件决定。这与实验中报告的单涡旋定常态 [15, 24, 25, 34], 颇为相似，尽管边界条件可能有所不同，而且我们的模拟中未观察到边缘流。

将我们的单涡旋稳态中的速度和涡量场与TTSH 方程 [21]线性化版本的一个解析解进行比较是有益的。如附录 A 所述，不含非线性项的 TTSH 方程的一般稳态解，以极坐标 $(r,\ \theta)$ 表示，为

$$\omega(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\pm} C_n^{\pm} \omega_n^{\pm}(r,\ \theta), \tag{6}$$

$$\omega_n^{\pm}(r,\ \theta) \equiv J_n(k_{\pm} r) \cos \Theta_n, \tag{7}$$

and

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\pm} C_n^{\pm} \mathbf{v}_n^{\pm}(r,\ \theta), \tag{8}$$

$$v_{n,x}^{\pm}(r,\ \theta) = \frac{J_n'(k_{\pm} r)}{k_{\pm}} \cos \Theta_n \sin \theta - \frac{n J_n(k_{\pm} r)}{k_{\pm}^2 r} \sin \Theta_n \cos \theta, \tag{9}$$

$$v_{n,y}^{\pm}(r,\ \theta) = \frac{J_n'(k_{\pm} r)}{k_{\pm}} \cos \Theta_n \cos \theta + \frac{n J_n(k_{\pm} r)}{k_{\pm}^2 r} \sin \Theta_n \sin \theta, \tag{10}$$

其中$v_{n,x}^{\pm}$ 和 $v_{n,y}^{\pm}$ 分别是 $\mathbf{v}_n^{\pm}$的 x 和 y 分量， J_n 第一类贝塞尔函数，$k_{\pm} \equiv \sqrt{1 \pm \sqrt{a}}$，以及 $\Theta_n \equiv n\theta +$ 常数。由于数值观测到的单涡旋状态是各向同性的（即与 θ无关），因此我们将其与 $n = 0$的解析解进行比较。结果显示于图5(a)中。有趣的是，我们发现速度场的切向分量 $v_\theta(r,\ \theta)$ 和涡量场 $\omega(r,\ \theta)$ 都具有与这些解析解的线性组合相似的定性特征，尤其是在中心附近，尽管我们的模拟中存在非线性项。这可能部分是因为对于各向同性解，方程 (4) 的平流项 $\lambda \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\nabla} \omega$ 会消失。然而，由于这些解析解无法同时满足$\mathbf{v}$ 和 ω的边界条件，因此它们无法精确描述数值观测结果。我们可以认为，TTSH 方程的三次项 $-b\mathbf{v}^2\mathbf{v}$ 可能有效地使贝塞尔型解进行调整，以满足所需的边界条件。

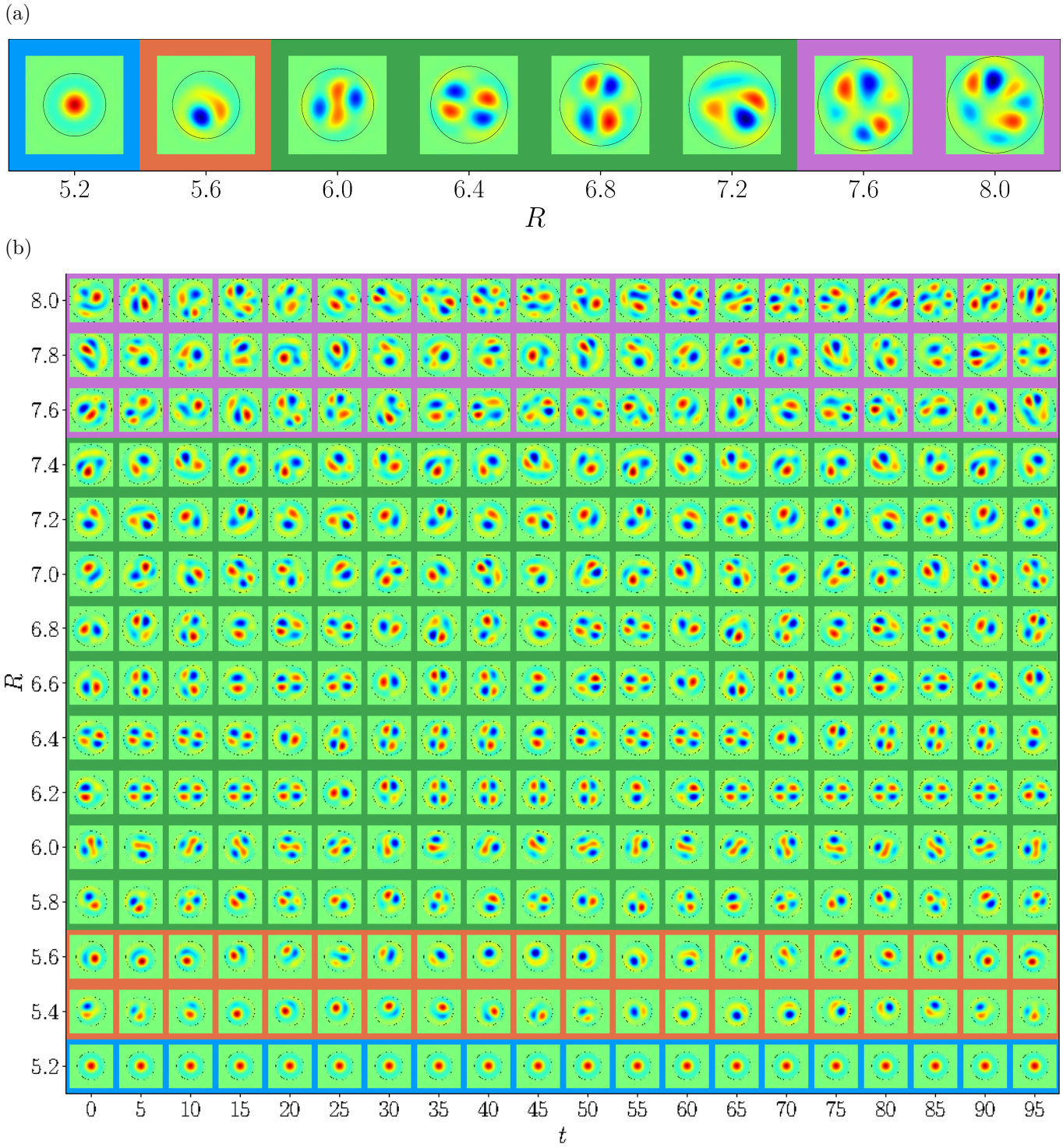

图 2：圆形约束的相图，展示了不同 R 下的涡量场快照（色标与图 1(b) 相同）。这些快照帧采用不同颜色表示涡旋数量（蓝色：一个，橙色：两个，绿色：四个，紫色：更多）。（a）为每个 R 选取的典型快照。（b）涡量场的时间序列。另请参见影片 S2 [32]。

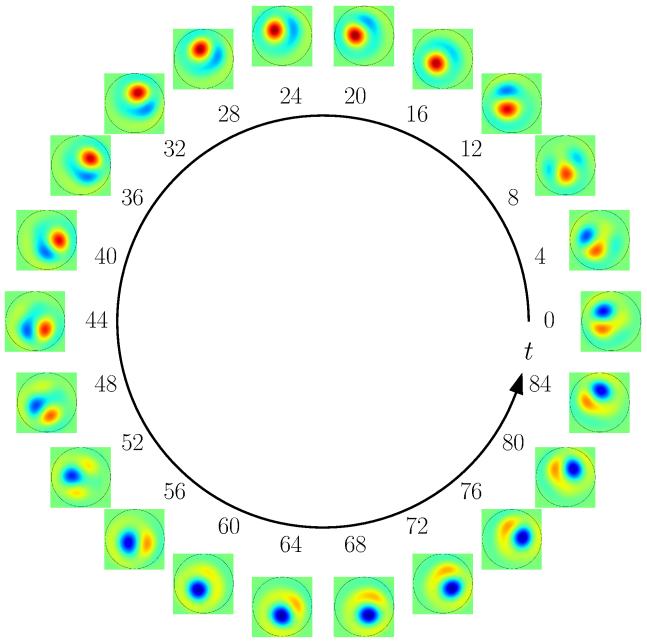

图 3： $R = 5.4$ 处涡旋对振荡态的涡量场时间序列。颜色标度与图 1(b) 相同。另请参见影片 S4 [32]。

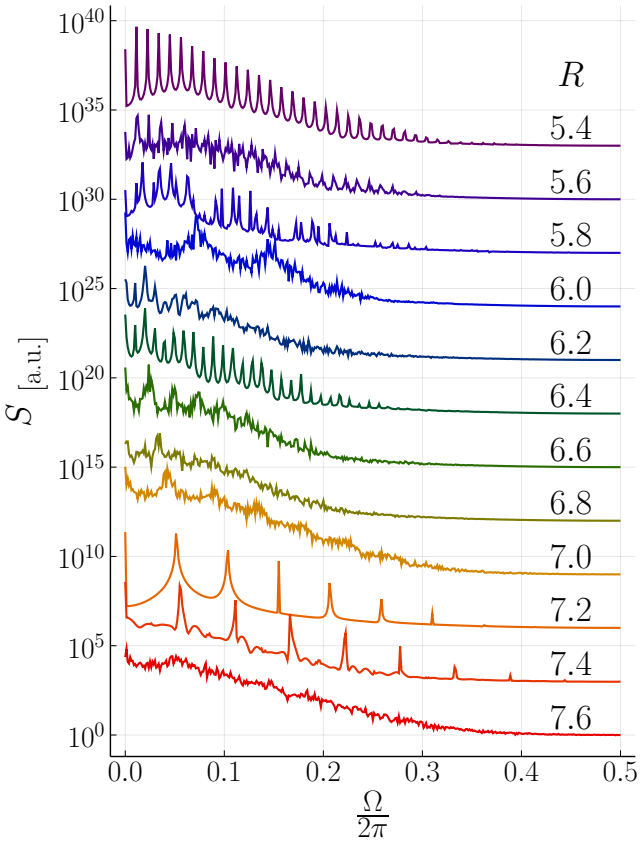

图 4：在不同的 R 下测得的涡量场 [方程 (5)]的时间功率谱密度。每个功率谱密度均乘以一个常数，以避免彼此重叠。

D. 转变为涡旋对振荡态

当 R 从单涡旋定常态增加时，系统转变为涡旋对振荡态（图 2中的橙色框）。如图2(b)和图3以及视频 S2和 S4 [32]中已经展示的那样，该状态由两个涡量符号不同的振荡涡旋组成。

单涡旋定常态与涡旋对振荡态之间的转变呈现滞后现象，如图 6(a) 所示。用于刻画这一转变的一个有用量是涡旋序参量 [15]

$$\Psi = \frac{1}{1-\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\sum_{\mathbf{x}}|\mathbf{e}_\theta(\mathbf{x})\cdot\mathbf{v}(\mathbf{x})|}{\sum_{\mathbf{x}}|\mathbf{v}(\mathbf{x})|}-\frac{2}{\pi}\right), \qquad (11)$$

其中，$\mathbf{e}_\theta(\mathbf{x})$是方位单位向量，求和遍及整个空间。根据构造，当速度场完全呈方位分布时， Ψ =1；而当其完全无序时，$\Psi = 0$ 。为研究滞后现象，我们按如下方式依次进行了模拟。向上扫描时，从 $R = 5.20$处的稳态开始，将 R 增加 $\Delta R = 0.02$ ，并在系统达到稳态后通常经过5-10个周期测量 Ψ 。我们重复此步骤，直到 $R = 5.34$。向下扫描时，我们沿相反方向进行相同操作。结果如图6(b)所示，清楚地显示出滞后现象。由此，我们近似估计出较低和较高的转变点分别为$R_c^{\mathrm{down}} \simeq 5.23$ 和$R_c^{\mathrm{up}} \simeq 5.31$。

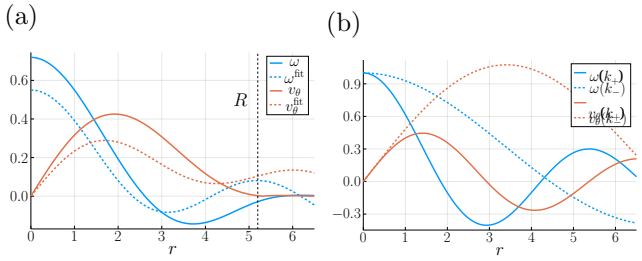

图 5：线性化 TTSH 方程的单涡旋定常态与解析解的比较。(a) $R = 5.2$ 处单涡旋定常态下 v_θ （蓝色）和ω （橙色）的径向依赖关系（实线），以及 $n = 0$处解析解最佳拟合线性组合的径向依赖关系（虚线）。拟合基于$\mathbf{v}$和 ω 进行，并将它们归一化为各自的平均绝对值。v_θ 和 ω使用相同的一组 $C_0^{\pm}$。(b) 对于 $k = k_\pm$，解析解的两个独立模态：$v_{0\ ,\theta}^{\pm}$ 和$\omega_0^{\pm}$。

为定量表征这一转变的动态特征，我们测量了李雅普诺夫指数，即无穷小扰动的指数增长率-

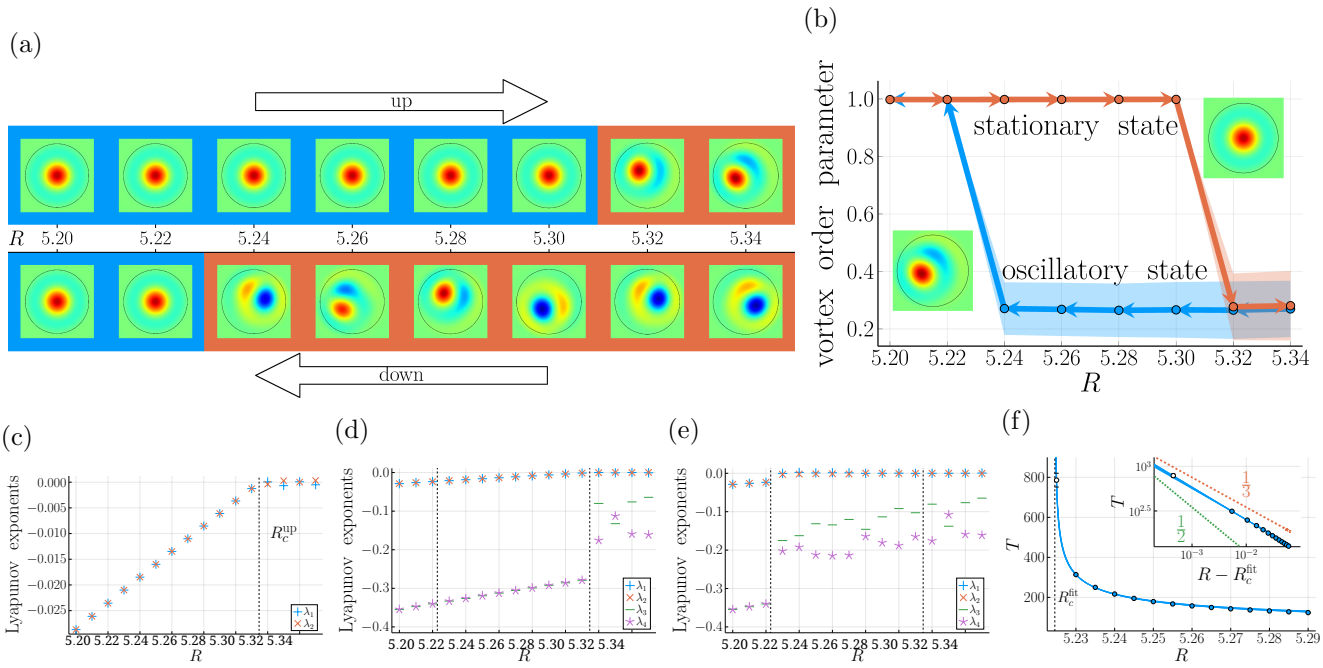

图 6：单涡旋定常态与涡旋对振荡态之间的滞后转变。(a) 随着 R 增大（上）或减小（下）时的涡量场快照（色标与图 1(b) 相同）。(b) 涡旋序参量 Ψ。图中显示的是时间平均值，阴影表示时间标准差。(c)(d) R 增大时的李雅普诺夫指数。(c) 和 (d) 分别显示最大的两个和四个指数。前两个指数随 R 线性增加，并在 $R = R_c^{up}$ 处穿过零点，这与亚临界霍普夫分岔的情况一致。(e) R 减小时最大的四个李雅普诺夫指数。(f) 下方转变点 R_c^{down} 以上的振荡周期 T。误差棒表示其标准差，但仅在 $R = 5.225$ （空心符号）处可见，此处振荡存在波动。蓝色实线表示采用 $T \propto \left|R - R_c^{fit}\right|^{-p}$ 进行拟合的结果；拟合所用的数据点有多种选择（因此绘制了许多蓝线）。插图：相同数据的双对数坐标图。两条虚线用于引导观察，分别对应指数为 $1/2$ （绿色）和 $1/3$（橙色）的幂律。

对该解的扰动可以直接帮助确定这一转变背后的分岔类型 [35]。为计算这些扰动，按照标准方法 [36, 37]，我们模拟了相互独立扰动 $\delta\omega_i(\mathbf{x}\ \ t)$（$i$：索引）随时间的演化，并结合$\omega(\mathbf{x}\ \ t)$，使用 QR分解测量指数增长率。随后按升序获得了李雅普诺夫指数 λ_i。这一过程甚至比主要计算更加耗费资源，尽管我们能够使用尖端图形处理器，仍花费了数天时间。

对于不断增大的 R，结果如图 6(c) 所示，其中 $\Delta R = 0.01$。这表明，最大的两个指数λ_1，λ_2（对于 $R < R_c^{up}$为负值，正如预期），会随 R 线性增加，并在 $R = R_c^{up}$处达到零。这种行为与亚临界Hopf 分岔一致，后者确实表现出向振荡态的滞后转变 [35]。此外值得注意的是，尽管不存在准周期态行为，振荡态仍包含两个趋于零的指数。我们认为，系统的旋转对称性引入了第二个趋于零的指数，除了与时间平移对称性相对应的那个指数之外。至于第三个以及第四个指数 λ_3，λ_4，它们也随 R 线性增加，直至 R_c^{up} [图 6(d)]。有趣的是，对这种线性关系进行外推表明，它将在 $R \simeq 5.65$ 处穿过零点，这一位置接近转变为具有四个振荡涡旋的状态的转变点。

对于递减的 R，结果如图 6(e) 所示。鉴于 R_c^{up} 处的转变与亚临界霍普夫分岔相符，低维动力系统理论给出的标准情形表明，较低处的转变可能由鞍结分岔描述；在这种情况下，当从上方趋近 R_c^{down} 时，第一个负指数会随着 $\propto \left|R - R_c^{down}\right|^{1/2}$ 增大。然而，我们的情况并非如此：如图 6(e) 所示，第一个负指数 λ_3 并未趋近于零，而是保持在 $\simeq -0.2$ 。我们还测量了振荡周期 T 随 R 的变化关系（[图 6(f)], ），使用减半的离散化间隔 Δx 来减小离散化效应（边长 $N\Delta x$ 保持不变；见附录 B 中的表 I）。如果该转变是鞍结分岔，我们会预期 $T \propto \left|R - R_c^{down}\right|^{-1/2}$。然而，尽管我们的数据确实显示出在 R_c^{down} 附近似乎存在幂律发散，

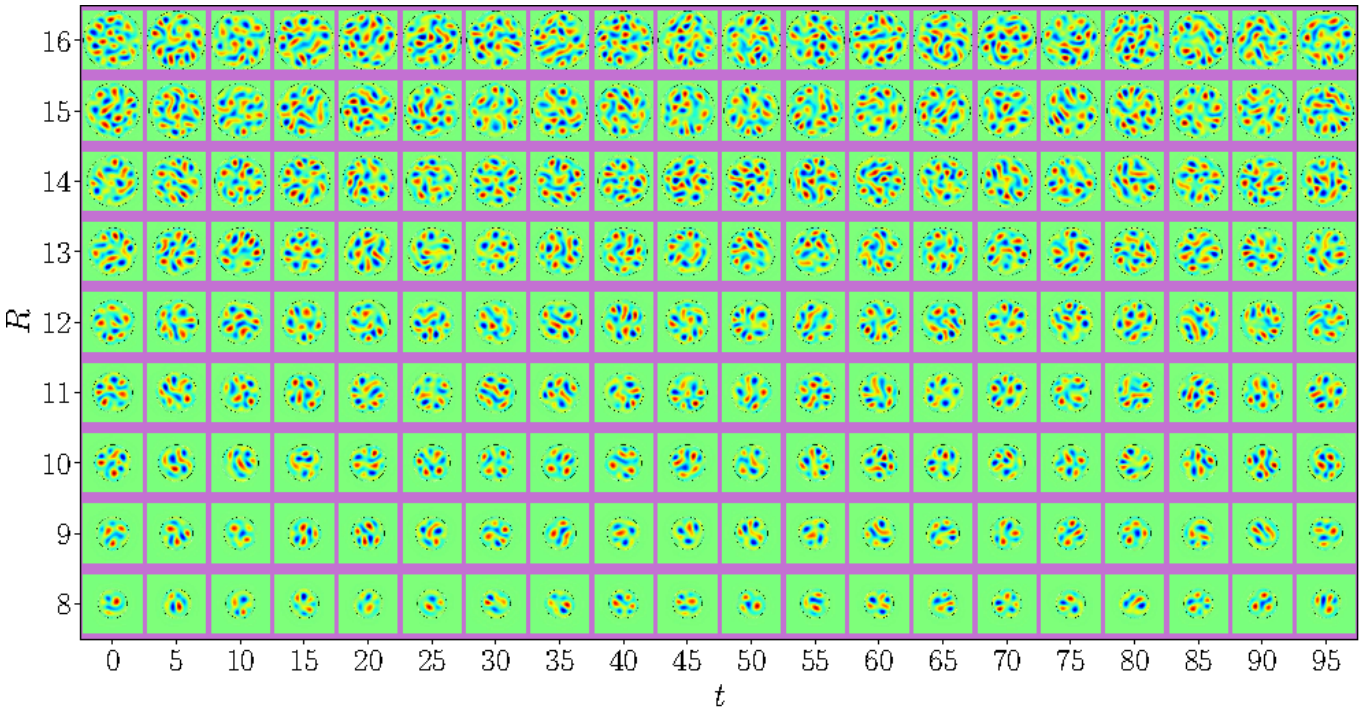

图 7： $R \geq 8$ 涡量场的时间序列（色标与图 1(b) 相同）。请注意，此处呈现的结果受到周期性边界较强影响，因为 R 接近 $L/2$ ，且涡量场在周期性边界处未能充分衰减。

即，$T \propto \left|R - R_c^{\mathrm{fit}}\right|^{-p}$，我们估计指数 p 在$p = 0.35$(1)。这是通过改变拟合范围得到的，结果几乎不依赖于拟合范围；唯一的例外是，若排除最接近转变、且振荡似乎不太稳定的点，我们得到 $p = 0.39$(1)。这表明，我们所观-察到的分岔可能无法在低维动力系统理论的框架内得到理解。换言之，这暗示了高维动力系统中一种迄今未知的分岔。

E. 通往湍流的路径

最后，我们评论在这种圆形约束中观察到的湍流转捩路径。如第IIIB节和图2中所述，在这一几何结构中观察到的第一个非平凡态是单涡旋定常态（$R = 5.2$）。随着 R is增大，系统首先经历向涡旋对振荡态（$5.23 \lesssim R \lesssim 5.31$）的滞后转变。当 R 接近转变点时，该态呈周期态；而在更大的 R下，还可能叠加混沌调制。从 $R = 5.8$开始，系统具有四个涡旋，并以再入式方式在不同的动力学态（周期态、准周期态和混沌态）之间发生多重转变。从 $R = 7.6$开始，涡旋数进一步增加，此时系统保持在混沌态（图 7）。在体相极限（$R \to \infty$）下，该态连续转变为活性湍流。

与纳维–斯托克斯湍流的湍流转捩路径相比，尽管在 Ruelle-Takens-Newhouse 情景中也会出现周期态和准周期态 [2, 38], ，但其余观察结果并不符合任何已知情景。相反，我们注意到，在 Kuramoto-Sivashinsky方程 [39], 以及对纳维–斯托克斯方程进行的一项数值模拟中，当对流场施加所谓的高对称条件时，也观察到了周期态、准周期态和混沌态之间类似的再入转变 [40]。虽然我们没有施加这种条件，但我们的高度对称圆形几何可能与刻画所观察到的湍流转捩路径的再入行为有关。

IV. 哑铃形限域

A. 动机与背景

接下来，我们将目光转向图 8(a) 所示的哑铃形限域，它由两个半径为 R 、圆心相距 D 的重叠圆构成。此测试案例用作基准，以展示我们的方法无需手动制作掩模 $K(\mathbf{x})$ 即可实现复杂几何形状的能力。

在封闭于 aPDMS 装置 [24, 25], 中的细菌湍流情况下，有研究报告称，哑铃形边界内形成了一对涡旋，每个涡量峰值

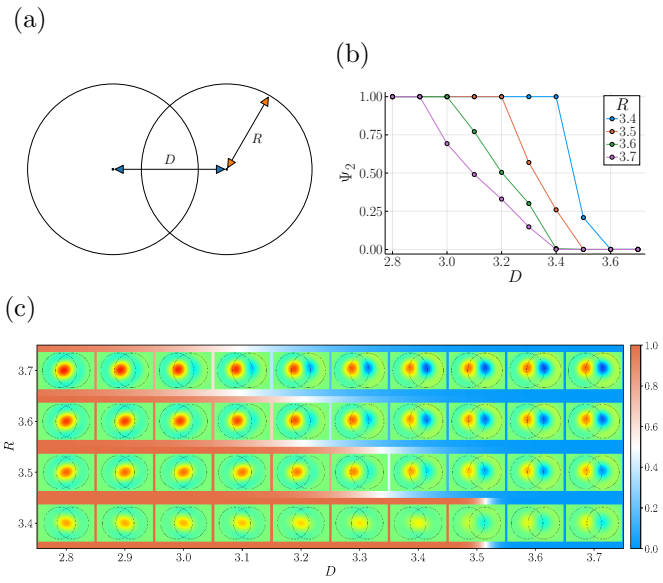

图 8：哑铃形状中的限域。（a）由两个重叠圆构成的哑铃形边界轮廓及相关参数。（b）不同半径 R下，序参量 Ψ_2 与中心间距 D 的关系。根据构造，对于铁磁流，$\Psi_2 = 1$；对于反铁磁流，$\Psi_2 = 0$。（c）在弛豫至稳态后获取的典型涡量快照，展示了不同半径 R和中心间距 D 的情况（色标与图 1(b)相同）。背景颜色根据色条表示Ψ_2 的值。为简单起见，部分快照经过镜像反射处理，使得左半部分的涡量始终为正，并且较强的涡旋具有正涡量（后者可通过施加 $y \mapsto -y$实现）。

都位于圆的中心附近。当阈值距离 $D_c(R) = \sqrt{2}R$时，对于 $D < D_c$，两个涡量峰值的符号相同（铁磁性涡旋序）；而对于 $D > D_c$ [24]，两者符号相反（反铁磁性涡旋序）。因此，值得探究类似的转变是否会在我们的流体动力学装置中发生。

我们对哑铃形限制进行的模拟如下。与细菌实验类似，[24, 25]，我们将空腔半径设定在接近单个涡旋的特征尺寸处，$R \approx \pi$。请注意，尽管在如此小的半径下，即使是单个涡旋也无法出现，R 对于圆形约束的情况（见第 III B 节），但在哑铃形限制中我们确实观察到了涡旋，这可能是因为该限制区域的总面积相对较大。在以下报告的模拟中，对于 R 和 D的每种取值，我们从随机初始状态开始，并舍弃瞬态过程，以确保系统处于稳态。

B. 结果

图 8(c) 展示了我们的模拟结果。对于每个固定的 R，当 D 较小时，我们观察到在哑铃形结构中心附近形成了一个涡旋；而当 D 较大时，在两个空腔的中心附近形成了一对涡旋。在这两种情况下，涡旋在稳态下都是静止的。后者的涡旋对状态对应于先前实验中观察到的反铁磁态[24, 25]。至于前者的单涡旋状态，它与铁磁态类似，因为整个哑铃形区域内的涡量符号相同，但我们没有观察到像实验中那样的涡旋分裂。这种差异可能归因于 Beppu等人的实验条件下存在边缘流 [24, 25], ，而我们对边界条件的选择则基于 Nishiguchi 及其合作者开展的另一种实验设置 [20, 21]。

两种状态之间的转变也存在差异。在我们的模拟中，如图 8(c) 所示，阈值距离 $D_c(R)$随着 R的增加而减小，而在 Beppu 等人的实验 [24]中，随着 $D_c(R) = \sqrt{2}R$ 则呈增加趋势。为了量化这一观察结果，我们测量了一个针对该情形的专门序参量，其定义为 $\Psi_2 = \left|\omega(\mathbf{x}^*_{\text{left}}) + \omega(\mathbf{x}^*_{\text{right}})\right| / \left(|\omega|(\mathbf{x}^*_{\text{left}}) + |\omega|(\mathbf{x}^*_{\text{right}})\right)$，其中 $\mathbf{x}^*_{\text{left/right}} = \text{argmax}_{\text{left/right}} |\omega|$。这里，下标“left”和“right”分别表示从任一空腔中心起、位于 $D/2$ 以内的区域。根据构造，对于铁磁流，$\Psi_2 = 1$；对于反铁磁流，$\Psi_2 = 0$。图8(b) 中的结果清楚地表明，随着 D 增加，Ψ_2 从 ≈ 1 转变为 ≈ 0，且 $D_c(R)$随着 R的增加而减小。因此，我们的 $D_c(R)$受不同于 Beppu 等人的实验[24, 25]中所观察到的标度关系 $D_c(R) \propto R$ 所支配。Beppu 等人 [24] 基于边缘流，即边界上的切向流动，解释了关系$D_c(R) = \sqrt{2}R$；然而，这与此处所选取的边界条件不相容（见第VA 节中的讨论）。因此，可以合理地认为，我们设置中不存在边缘流，可能正是造成这一差异的原因。

V. 讨论

A. 边缘流

这里我们讨论边缘流，即沿边界的切向流，这通常见于圆形限域下的实验 [15, 24, 25, 34]。边缘流涉及边界处不为零的切向速度，$v_\theta \neq 0$ 在圆形约束的情况下尤其如此。在上述实验中，细菌实际上沿边界游动。在枯草芽孢杆菌 [15], 的液滴悬浮液中，也有关于形成反向旋转双层的报道；而在大肠杆菌 被限域于一个

微流控装置 [24, 25]。相比之下，在我们的模拟中， v_θ 由于阻尼项而持续衰减至零，既没有边缘流，也没有反向旋转层。这一差异显然源于我们对边界条件的选择，$\mathbf{v} = \mathbf{0}$ 和 $\omega = 0$；这些边界条件是根据实验观察推导得出的：将浓密的枯草芽孢杆菌悬浮液置于带有微加工柱阵列、并由液-气界面围住的基底上[20, 21]。尽管这些实验中的低倍显微镜观察未发现反向旋转层，但如参考文献 [21]所述，这类旋转层可能存在，并可能因此促成了我们边界条件的设定。因此，我们预计，我们的数值模拟给出的预测适用于与参考文献 [20, 21], 中类似的实验条件，而非现有的圆形约束细菌实验[15, 24, 25, 34]。

为将模型扩展到处理存在边缘流的情形，我们可以（1）引入滑移速度，以允许 v_θ 在 $r = R$ 处不为零；或者（2）使用另一个不会抑制高波数变化的控制方程，从而允许在无滑移边界附近存在流动。我们通过采用一种仅移除径向速度分量 v_r的阻尼方案，对方法（1）进行了测试。然而，在这种情况下，我们无法进行物理上合理的模拟，因为切向分量 v_θ 深入穿透了阻尼区域。顺便指出，这一边界条件使我们能够将圆半径 R 设置得小于第 III 节中报告的最小值，从而生成涡旋。这可能与以下事实有关：对于无滑移条件，恒等式 $\int_{r<R} \omega dxdy = \oint_{r=R} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{x} = 0$保证限域内部必须以相同数量存在正、负涡量；而对于滑移情形， ω 尽管受到阻尼，仍可逃离限域。关于方法（2），我们可以移除 TTSH 方程中的 $\nabla^4 \mathbf{v}$ 项。此时方程化为不可压缩版本的 Toner-Tu 方程；据报道，该方程中会在体相系统中出现涡旋 [41] ，不同于原始的可压缩 Toner-Tu 方程 [42–44]。这些方法或许能够加深我们对限域几何中边缘流对活性流体结构和动力学影响的理解。

B. 边界条件的实现

人们或许会想，是否可以直接施加边界条件，无论是滑移还是无滑移，而不必再借助阻尼方案。在这种情况下，我们必须直接处理任意形状的边界。文献中已有研究在更广泛的背景下采用了这类方法。例如，在计算流体力学中， [45], 任意形状的边界通常通过定制网格来实现，并在该网格上对模型进行离散化和积分。然而，对于 TTSH 方程，四阶导数的离散化以及涡量消失的边界条件在这种网格上并不容易实现。更具体地说，人们可能希望在边界上使用$\mathbf{v}$ 的二阶导数（以采用计算效率更高的拉普拉斯算子），但这与时间演化方程中四阶导数的离散形式不相容。或许可以设计更复杂的算法，但我们怀疑这很难避免不可控的近似，而且这类算法的计算成本可能高于我们采用的伪谱方法。

VI. 总结备注

在这项工作中，我们对具有任意形状边界的 TTSH 方程进行了数值模拟，并给出了两个代表性测试案例的结果，即圆形限域和哑铃形限制。

从计算角度来看，我们首先强调，图形处理器实现使计算快速且经济实惠，无需使用超级计算机或等待数周。事实上，本文包含若干模拟，若使用工作站级中央处理器（通常为 $10^1 \sim 10^2$ threads，3 GHz），则需要数月甚至数年才能完成。

最后，我们讨论本研究的物理意义。我们利用 TTSH 方程进行的数值研究，至少在定性上成功再现了实验中报道的涡旋有序态。同时，研究也揭示，限域几何的细微差异会导致涡旋结构在定量上有所不同。具体而言，我们利用 TTSH 方程探究了圆形约束下通向混沌和湍流的一条新路径。该路径始于有序涡旋向一对振荡涡旋的滞后转变，这与亚临界霍普夫分岔相符。随后，系统依次经历周期态、准周期态和混沌振荡之间的重入转变，最终达到活性湍流态。由于我们的边界条件是根据文献 [21], 报道的特定实验实现推断得出的，因此，未来一项重要工作是研究我们的发现对于其他模型和边界条件是否稳健；这些模型和边界条件可能更适用于其他实验装置。在此背景下，值得注意的是，另一种无限域但活性可变的极性活性流体模型也曾报道出现霍普夫分岔 [28], ，这表明经由振荡态通向极性活性湍流的路径或许具有一定普适性。我们预计，本研究结果将有助于从基础层面理解活性物质系统中湍流结构的形成过程。

附录 A: 线性化 TTSH 方程的解析解

遵循文献 [21], ，这里我们给出线性化 TTSH 方程的解析解，即在方程（2）中令（$b,\ \lambda$） $=$ （0，0）。请注意，被舍弃的非线性项不能视为微扰。因此，本节所述的解析解未必能近似反映数值观测结果。尽管如此，这些解析解仍有助于解释第 III 节中呈现的一些数值结果。

在定常性条件下，涡量的线性化 TTSH 方程为：

$$0 = a\omega - \left(1+\nabla^2\right)^2\omega. \tag{A1}$$

在极坐标系（$r,\ \theta$）中，基于拉普拉斯算子的实值特征函数 $J_n(kr)\cos(n\theta + \text{const.})$，可以很容易地求解，其中 J_n 是第一类贝塞尔函数，$k>0$，且 $n=0,1,\ldots$。相应的特征值为 $-k^2$。因此，方程（A1）的解需要满足 $0 = a-(1-k^2)^2$，即 $k = k_\pm \equiv \sqrt{1\pm\sqrt{a}}$。一般解可表示为这些函数的线性组合：

$$\omega(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\pm} C_n^{\pm}\omega_n^{\pm}(r,\ \theta), \tag{A2}$$

$$\omega_n^{\pm}(r,\ \theta) \equiv J_n(k_\pm r)\cos\Theta_n, \tag{A3}$$

与 $\Theta_n \equiv n\theta + \text{const}$。

此外，对于本文所研究的二维不可压缩流体，可以利用流函数，根据涡量场 $\omega(\mathbf{x})$ 重构速度场 $\mathbf{v}(\mathbf{x})$。首先，通过求解 $\nabla^2\psi = -\omega$得到流函数 $\psi(\mathbf{x})$，随后可得 $v_x = \partial_y\psi$ 和 $v_y = -\partial_x\psi$。这给出

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\pm} C_n^{\pm}\mathbf{v}_n^{\pm}(r,\ \theta), \tag{A4}$$

$$v_{n,x}^{\pm}(r,\ \theta) = \frac{J_n'(k_\pm r)}{k_\pm}\cos\Theta_n\sin\theta - \frac{nJ_n(k_\pm r)}{k_\pm^2 r}\sin\Theta_n\cos\theta, \tag{A5}$$

$$v_{n,y}^{\pm}(r,\ \theta) = \frac{J_n'(k_\pm r)}{k_\pm}\cos\Theta_n\cos\theta + \frac{nJ_n(k_\pm r)}{k_\pm^2 r}\sin\Theta_n\sin\theta, \tag{A6}$$

使用与公式 (A2)中相同的 $C_n^{\pm}$。这里，$v_{n,x}^{\pm}$ 和 $v_{n,y}^{\pm}$ 分别是 $\mathbf{v}_n^{\pm}$ 的 x 和 y 分量。

关于我们对有限半径圆形区域 R （第 III 节）的结果，首先注意到，如果任意特殊解 $\omega_n^{\pm}(r,\ \theta)$ 和 $\mathbf{v}_n^{\pm}(r,\ \theta)$ 同时满足 $\omega_n^{\pm}(R,\ \theta) = 0$以及 $\mathbf{v}_n^{\pm}(R,\ \theta) = 0$，那么除去被忽略的非线性项外，这可以视为圆形区域情形的一个解。然而，这两个条件实际上从未能同时满足，因为所有 $x>0$ $J_n(x)$ 和 $J_n'(x)$ 的根都不重合。我们可以通过将两个模态与 $k=k_\pm$ 结合，使 $\omega(\mathbf{x})$ 和 $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ 在 $r=R$ 处更接近于零，但边界条件无法得到精确满足。这一点在第 III C 节中有所说明。

附录 B：符号说明

表 I 总结了本文中使用的参数和符号。

表 I：参数和符号表。

符号	描述
$\lambda = 9$	平流强度
$a = 0.5$	活性参数
$b = 1.6$	非线性参数
$\gamma_{\mathbf{v}} = 40$	速度阻尼强度
$\gamma_\omega = 4$	涡量阻尼强度
$N = 8192$[a]	每个维度的网格点数
$\Delta x = 0.005$[a]	空间离散化间隔
$\Delta t = 0.01$	时间离散化间隔
$L = N\Delta x$	计算区域的边长
$\hat{*}$，离散傅里叶变换[$*$]	$*$ 的离散傅里叶变换
逆离散傅里叶变换[$*$]	$*$ 的逆离散傅里叶变换
$\mathbf{k} \in \left[-\frac{\pi}{\Delta x},\ \frac{\pi}{\Delta x}\right]^2$	离散傅里叶变换波数
$\Delta k = \frac{2\pi}{L}$	$\mathbf{k}$ 的离散化间隔
$K(\mathbf{x})$	预处理阻尼掩模

[a] $(N,\ \Delta x) = (16384,\ 0.0025)$ 用于图 6(f) 中所示的振荡周期 T。

附录 C：计算方案

算法1是我们基于伪谱方法和欧拉方法求解 TTSH 方程的积分方案。

算法 1 积分方案

输入： $(\mathbf{v}(t),\ \hat{\omega}(t))$

右侧项$_1 = -b\mathbf{v}^2\mathbf{v} - \gamma_{\mathbf{v}} K\mathbf{v}$

$\mathrm{rhs}_2 = -\lambda\mathbf{v}\cdot$ 逆离散傅里叶变换$[i\mathbf{k}\hat{\omega}] - \gamma_\omega K\omega$

右端 $= i\mathbf{k}\times \hat{\mathbf{rhs}}_1 + \hat{\mathrm{rhs}}_2$

$\hat{\omega}_{\mathrm{naive}} = \exp\left[\left\{a-\left(1-\mathbf{k}^2\right)^2\right\}\Delta t\right]\left(\hat{\omega}+\hat{\mathrm{rhs}}\Delta t\right)$

对所有 k 执行

  如果 $\mathbf{k}=\mathbf{0}$ 则

    $\hat{\omega}_{\mathrm{new}}(\mathbf{0}) = 0$

    $\hat{\mathbf{v}}_{\mathrm{new}}(\mathbf{0}) = \exp\left[(a-1)\Delta t\right]\cdot\sum_{\mathbf{x}} \frac{1}{\sqrt{N^2}}\left(\mathbf{v} + \mathbf{rhs}_1\Delta t\right)$

  否则如果 $\mathbf{k}^2 > \left(\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{\Delta x}\right)^2$ 则

    $\hat{\omega}_{\mathrm{new}}(\mathbf{k}) = 0$

    $\hat{\mathbf{v}}_{\mathrm{new}}(\mathbf{k}) = \mathbf{0}$

  else

    $\hat{\omega}_{\mathrm{new}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}\{\hat{\omega}_{\mathrm{naive}}(\mathbf{k}) + \hat{\omega}_{\mathrm{naive}}(-\mathbf{k})^*\}$

    $\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \frac{\hat{\omega}_{\text{新}}(\mathbf{k})}{\mathbf{k}^2}$

    $\hat{\hat{\mathbf{v}}}_{\mathrm{new}}(\mathbf{k})|_x = i\mathbf{k}_y\psi(\mathbf{k}),\qquad \hat{\mathbf{v}}_{\mathrm{new}}(\mathbf{k})|_y = -i\mathbf{k}_x\psi(\mathbf{k})$

  结束条件

结束循环

输出： $(\mathbf{v}_{\mathrm{new}}, \hat{\omega}_{\mathrm{new}}) = (\mathbf{v}(t+\Delta t), \hat{\omega}(t+\Delta t))$

关键操作是离散傅里叶变换 (DFT)，定义为 $\hat{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N^2}}\sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$，其逆变换（逆离散傅里叶变换）类似地定义为 $f(\mathbf{x}) \frac{1}{\sqrt{N^2}}\sum_{\mathbf{k}} \hat{f}(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$。借助它们，我们可以将所有的 ∇ 替换为 $-i\mathbf{k}$。请注意，这里隐含地假设了周期性边界条件，即 $f(x,\ y) = f(x\pm L,\ y) = f(x,\ y\pm L)$；只要墙足够厚，使得$\mathbf{v}(\mathbf{x})$和 $\omega(\mathbf{x})$在周期性边界处足够小，由此产生的伪影便可忽略不计。

第一步，图形处理器使用逐元素运算和离散傅里叶变换计算所有非线性项，然后将其存储到 rhs 中。这里需要注意混叠，即实空间中的乘法导致$\mathbf{k}$ 范围扩大的伪影。为了解决这个问题，我们需要在此步骤前后消除高波数模态，不过实际上可以省去“之前”的操作以进行优化。对于包含三次项 $b\mathbf{v}^2\mathbf{v}$ 的 TTSH 方程，适当的截断值为 $\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{\Delta x}$ （1/2 截断规则）。

接下来，图形处理器通过欧拉方法计算 $\hat{\omega}$ 的时间演化，并将结果存储到 $\hat{\omega}_{\mathrm{naive}}$ 中。这里的替换 $\nabla\to -i\mathbf{k}$ 发挥着关键作用，因为借助指数乘子，我们可以将时间演化方程中的线性项分离出来并精确积分。如果没有这一技术，除非使用小得不切实际的 $\Delta t\sim\Delta x^4$，否则计算将会发散。

作为最后一步，图形处理器执行后续计算操作。对于 $\mathbf{k}=\mathbf{0}$，$\hat{\omega}$ 被修正为精确值 0，而$\hat{\mathbf{v}}$ 则根据$\mathbf{v}$的时间演化方程直接计算，因为这个空间均匀分量无法可由 ω 恢复。具体而言，我们使用了以下方程，该方程通过对 TTSH 方程 [式（2）] 两侧取空间平均得到：

$$\frac{\partial\langle\mathbf{v}\rangle}{\partial t} = (a-1)\langle\mathbf{v}\rangle - b\langle\mathbf{v}^2\mathbf{v}\rangle - \gamma_{\mathbf{v}}\langle K(\mathbf{x})\mathbf{v}\rangle, \tag{C1}$$

其中，括号表示空间平均。注意，由于周期边界条件，$\boldsymbol{\nabla}p$、$\nabla^2\mathbf{v}$ 和 $\mathbf{v}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v} = \boldsymbol{\nabla}\cdot(\mathbf{vv})$ 均为零。对于 $\mathbf{k}^2 > \left(\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{\Delta x}\right)^2$，将所有量设为 0，以避免混叠。对于 $0<\mathbf{k}^2\le\left(\frac{1}{2}\cdot\frac{\pi}{\Delta x}\right)^2$，对 $\hat{\omega}$ 进行修正，使其满足 $\hat{\omega}(\mathbf{k}) = \hat{\omega}(-\mathbf{k})^*$，然后根据修正后的 $\hat{\omega}$ 恢复 $\mathbf{v}$。该修正对于稳定计算至关重要；否则，累积的数值误差会破坏 $\hat{\omega}_{\mathrm{naive}}(\mathbf{k}) = \hat{\omega}_{\mathrm{naive}}(-\mathbf{k})^*$，而这对于实值 ω 是必要的。对于 $\mathbf{v}$，图形处理器求解流函数 $\psi(\mathbf{x})$、$\nabla^2\psi = -\omega$ 的方程，并由 ψ 得到 $\mathbf{v}$。该技术适用于本文研究的二维不可压缩流动，并且 $\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v} = 0$ 会自动得到满足。如果不采用这一方法，就可能需要求解关于压力的泊松方程，这会严重耗时；但在这里，只需将 ψ 除以 $\mathbf{k}^2$ 即可绕过这一过程。

附录 D：处理掩膜 $K(\mathbf{x})$

如上一节所述，为避免混叠，在实空间乘法之后必须应用低通滤波器。掩膜 $K(\mathbf{x})$ 也需要满足这一要求。因此，我们必须设计一个合适的掩膜场 $K(\mathbf{x})$，使其不含高波数模式，同时在感兴趣区域内非负、$K\simeq 0$在其他区域则 $K\simeq 1$。这一过程可以自动化如下：

算法 2 掩膜处理方案

输入： K_{naive}

$\hat{K}_{\mathrm{naive}} =$离散傅里叶变换$[K_{\mathrm{naive}}]$

对所有 k 执行

  如果 $\mathbf{k}^2 > \left(\frac{1}{4}\cdot\frac{\pi}{\Delta x}\right)^2$ **然后**

    $\hat{K}_{\mathrm{naive}}(\mathbf{k}) = 0$

  else

    modify $\hat{K}_{\mathrm{naive}}(\mathbf{k})$（可选）

  结束如果

结束 for

$K =$ 逆离散傅里叶变换$[\hat{K}_{\mathrm{naive}}]^2$

输出： 已处理 $K(\mathbf{x})$

首先，算法 2 计算 K_{naive} 的离散傅里叶变换，随后进行1/4 截断的低通滤波。该截断确保输出 $K(\mathbf{x})$ 不违反用于抗混叠的1/2 截-断规则（下面将说明为什么是 1/4）。然后，可以选择在 **else** 块中加入额外的低通操作（或任何其他处理），只要满足 $\hat{K}_{\mathrm{naive}}(\mathbf{k}) = \hat{K}_{\mathrm{naive}}(-\mathbf{k})^*$。在最后一步，$\hat{K}$ 被替换为 K_{naive}的平方 逆离散傅里叶变换。这确保了$K\ge 0$，同时不会改变掩模的基本形状。

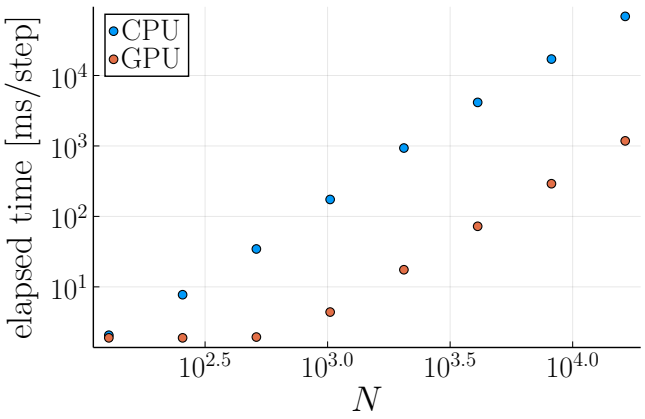

图9：欧拉方法的一次迭代所需时间与晶格尺寸 N的关系，对比了中央处理器（Intel Xeon W-2295）和图形处理器（NVIDIAA6000）。这表明，对于较大的 N，图形处理器的速度约快 60 倍。

正是由于这个平方项，我们才为K_{naive}选择了1-4 截断，以满足最终得到的 K-(x）中的1 2 规则。

我们对输入使用了二值掩码。对于圆形情形，我们将 $K_{\mathrm{naive}}(\mathbf{x}) = 1$ 设置为 $\|\mathbf{x}\| \geq R$，其他情况下设为 0。对于哑铃形情形， K_{naive} 通过对两个圆进行逻辑与获得。我们没有使用任何可选操作，因为任何额外的截断都会使设计几何形状与获得的 $K(\mathbf{x})$之间的差异变大。

附录 E：为什么图形处理器?

核心观察是，解释如上的计算方案中的任何操作，最终都会归结为实空间或傅里叶空间中的逐元素算术运算。逐元素运算很容易实现并行化，而借助 cuFFT 库，离散傅里叶变换的速度会大幅提升。需要注意的是，为了获得更好的性能，应从图形处理器代码中清除所有if语句；在当前方案中，可以从性能关键组件中消除所有条件分支。

因此，尽管我们的大规模模拟的计算成本远高于先前的研究，图形处理器仍能足够快速地处理它们，如图 9 所示。

附录 F：影片说明

在影片 S2–S8 中，速度场箭头的尺度以及涡量场的颜色均保持不变。颜色刻度与图 1(b) 中使用的相同。

影片S1：使用 Emoji边界的模拟得到的涡量场。见正文图1。**影片S2：** 半径为 $R = 5.2$、5。4、.....、 8。0 的圆形约束下的涡量场。

影片 S3: $R = 5.2$ （单涡旋定常态）的速度（箭头）和涡量场（颜色）。此视频包含从随机初始条件开始的瞬态过程。

影片 S4： $R = 5.4$ （涡旋对振荡态）的速度（箭头）和涡量场（颜色）。

影片 S5： $R = 5.6$ （混沌态）的速度（箭头）和涡量场（颜色）。

影片 S6： $R = 5.8$ （准周期态）的速度（箭头）和涡量场（颜色）。

影片 S7： $R = 7.2$ （周期态）的速度（箭头）和涡量场（颜色）。

影片S8： $R = 7.6$ （混沌状态）的速度（箭头）和涡量场（颜色）。

附录 G：代码可用性

本工作所用的代码及相关信息可应要求提供。

致谢

我们感谢 Yusuke T. Maeda、Kazusa Beppu 和Lailai Zhu 的有益讨论，感谢 Susumu Goto、YujiHattori 和 Soshi Kawai 从流体力学角度进行的讨论，感谢 Henning Reinken 和 Ryuna Nagayama协助调试，以及感谢 Taichi Taniguchi 进行代码重构。本文中的计算部分由 Kugui 图形处理器超级计算机（ISSP，东京大学）和 nekoya/ai 集群（ipi，东京大学）完成。本研究部分得到了 JSPS KAKENHI 资助项目编号 JP19K23422、JP19H05800 和 JP20K14426，以及日本 JST PRESTO 资助编号 JPMJPR21O8 的支持。

[1] L. Landau 和 E. Lifshitz， *Fluid Mechanics*，第 2 版（Elsevier，1987）。

[2] J. P. Eckmann，《耗散动力系统中的湍流之路》，Rev. Mod. Phys. **53**，643（1981）。

[3] R. Alert、J. Casademunt 和 J.-F. Joanny，《活性湍流》，《Annu. Rev. Condens.MatterPhys.》13，143（2022）。[4] H. Chat´e，《干燥对齐型稀薄活性物质》，《Annu. Rev. Condens.Matter Phys.》11，189（2019）。[5] A. Bricard、J.-B. Caussin、N. Desreumaux、O.Dauchot 和 D. Bartolo，《运动胶体群体中宏观定向运动的涌现》，《自然》503，95（2013）。[6]D.Nishiguchi、K. H.Nagai、H. Chat´e和 M. Sano，《游动丝状细菌悬浮液中的长程向列序与反常涨落》，《Phys. Rev. E》95，020601（2017）。[7] J. Iwasawa、D. Nishiguchi 和M.Sano，《交流电场驱动的 Janus粒子有序群集中的代数关联与反常涨落》，《Phys. Rev. Res.》3，043104（2021）。[8] T. Sanchez、D. T. N. Chen、S. J.DeCamp、M.Heymann和 Z. Dogic，《层级组装活性物质中的自发运动》，《自然》491，431（2012）。[9] D. Nishiguchi和M.Sano，《交流电场下自驱动 Janus粒子中的介观湍流与局域有序》，《Phys. Rev. E》92，052309（2015）。[10] A. Creppy、O. Praud、X. Druart、P. L.Kohnke和 F.Plourabou´e，《群游精子的湍流》，《Phys. Rev. E》92，032722（2015）。[11] C. Blanch-Mercader、V.Yashunsky、S. Garcia、G. Duclos、L.Giomi和 P.Silberzan，《上皮细胞培养物的湍流动力学》，《Phys. Rev. Lett.》120，208101（2018）。[12] H. H. Wensink、J. Dunkel、S. Heidenreich、K. Drescher、R. E. Goldstein、H.L¨owen 和 J. M.Yeomans，《活性流体中的介观湍流》，《美国国家科学院院刊》109，14308（2012）。[13] J. Dunkel、S. Heidenreich、K.Drescher、H. H. Wensink、M.B¨ar和 R.E. Goldstein，《细菌湍流的流体动力学》，《Phys. Rev. Lett.》110，228102（2013）。[14] J. Dunkel、S. Heidenreich、M. B¨ar 和 R.E. Gold¨stein，《致密活性流体中结构形成的最简连续介质理论》，《New J.Phys.》15，045016（2013），arXiv:1208.4464。[15] H. Wioland、F. G. Woodhouse、J. Dunkel、J.O.Kessler和R.E. Goldstein，《限域将细菌悬浮液稳定为螺旋涡旋》，《Phys. Rev. Lett.》110，268102 2013（）。[16] H. Wioland、E.Lushi 和 R. E. Goldstein，《通道限域下细菌的定向集体运动》，《NewJ. Phys.》18，075002（2016）。[17] K. Doxzen、S. R.K. Vedula、M. C. Leong、H. Hirata、N. S. Gov、A. J.Kabla、B.Ladoux和 C. T. Lim，《基底几何形状对细胞集体迁移的引导》，《Integr. Biol.》5，1026（2013）。[18] K. T.Wu、J. B.Hishamunda、D. T. Chen、S. J.De´Camp、Y.-W.Chang、A. Fern´andez-Nieves、S.Fraden 和Z.Dogic，《受限三维活性流体中从湍流到相干流的转变》，《科学》355，1284 2017（）。[19] A.Opathalage、M. M. Norton、M.P. N. Juniper、B. Langeslay、S. A.Aghvami、S. Fraden和 Z. Dogic，《受限活性向列相的自组织动力学与向湍流转变》，《美国国家科学院院刊》116，4788（2019）。[20] D. Nishiguchi、I. S. Aranson、A.Snezhko 和 A.Sokolov，《通过直接激光光刻构建细菌涡旋晶格》，《Nat. Commun.》9，4486（2018）。[21] H. Reinken、D. Nishiguchi、S. Heidenreich、A. Sokolov、M. B¨ar、S. H. L. Klapp 和 I. S. Aranson，《利用周期性障碍阵列组织细菌涡旋晶格》，《Commun. Phys.》3，76（2020）。[22] N. Figueroa-Morales、M. M. Genkin、A. Sokolov 和 I. S. Aranson，《活性液晶中拓扑缺陷的非对称钉扎》，《Commun. Phys.》5，301（2022）。[23] H. Wioland、F. G. Woodhouse、J. Dunkel 和 R. E. Goldstein，《细菌涡旋晶格中的铁磁序与反铁磁序》，《Nat. Phys.》12，341（2016）。[24] K. Beppu、Z. Izri、J. Gohya、K. Eto、M. Ichikawa 和 Y. T. Maeda，《几何驱动的细菌涡旋集体有序化》，《Soft Matter》13，5038（2017）。[25] K. Beppu、Z. Izri、T. Sato、Y. Yamanishi、Y. Sum[26] ino 和 Y. T. Maeda，《手性细菌涡旋中的边缘流与配对序转变》，《美国国家科学院院刊》118，e2107461118（2021），https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.2107461118。[26] L. Giomi、L. Mahadevan、B. Chakraborty 和 M. F. Ha[27] gan，《活性向列相中的可激发图样》，《Phys. Rev. Lett.》106，218101（2011）。[27] L. Giomi、M. C. Marchetti 和 T. B. Liverpool，《活性极性薄膜中的复杂自发流动与浓度条带》，《Phys. Rev. Lett.》101，198101（2008）。[28] L. Giomi 和 M. Cristina Marchetti，《活性流体中的极性图样》，《Soft Matter》8，129（2012）。[29] A. Doostmohammadi、T. N. Shendruk、K. Thijssen 和 J. M. Yeomans，《活性向列相中介观尺度湍流的起始》，《Nat. Commun.》8，15326（2017）。[30] M. Sano 和 K. Tamai，《通道流向湍流的普适转变》，《Nat. Phys.》12，249（2016）。[31] G. Lemoult、L. Shi、K. Avila、S. V. Jalikop、M. Avila 和 B. Hof，《库埃特流中通向持续湍流的定向渗流相变》，《Nat. Phys.》12，254（2016）。[32] 参见补充材料：[URL]，其中包含影片 S1-Sx。[33]TwitterOSS，twemoji，https://github.com/twitter/twemoji。[34]E. Lushi、H. Wioland 和 R. E. Goldstein，《游动细菌产生的流体流动驱动受限悬浮液中的自组织》，《美国国家科学院院刊》111，9733（2014），https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.1405698111。[35] S. H. Strogatz，*Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics Biology Chemistry and Engineering*，，，，2001《非线性研究》（Westview 出版社，）。[36] I. Shimada 和 T. Nagashima，《耗散动力系统遍历问题的数值方法》，《Prog. Theor. Phys.》61，1605（1979）。[37] G. Benettin、L. Galgani、A. Giorgilli 和 J.-M. Strelcyn，《光滑动力系统和哈密顿系统的李雅普诺夫特征指数：计算全部指数的方法。第一部分：理论》，《Meccanica》15，9（1980）。[38] D. Ruelle 和 F. Takens，《论湍流的本质》，《Commun. Math. Phys.》20，167（1971）。[39] J. M. Hyman 和 B. Nicolaenko，《Kuramoto-Sivashinsky 方程：偏微分方程与动力系统之间的桥梁》，《Physica D》18，113（1986）。[40] S. Kida、M. Yamada 和 K. Ohkitani，《通向混沌与湍流的路径》，《Physica D》37，116（1989）。[41] M. Besse、H. Chat´e 和 A. Solon，《恒密度群集的亚稳态》，《Phys. Rev. Lett.》129，268003（2022）。

[42]J. Toner 和 Y. Tu, 《二维动力学 XY 模型中的长程有序：鸟类如何协同飞行》, 《Phys. Rev. Lett.》**75**, 4326（1995）, arXiv:adap-org/9506001。[43] J. Toner 和 Y. Tu, 《鸟群、兽群与鱼群：群集行为的定量理论》, 《Phys. Rev. E》**58**, 4828（1998）。

[44] J. Toner, 《流体极性有序群集的流体动力学理论再分析》, Phys. Rev. E **86**, 031918（2012）, arXiv:1204.4527v1。

[45] H. K. Versteeg 和 W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*（Pearson education, 2007）。