arXiv:2601.04102v1 [cond-mat.stat-mech] 7 Jan 2026

极长离格点自避免多边形中的随机打结

Jason Cantarella

美国佐治亚州雅典，佐治亚大学数学系

Tetsuo Deguchi

日本东京文京区，御茶水女子大学物理系

Henrik Schumacher

数学研究所，亚琛工业大学，德国亚琛

Clayton Shonkwiler

数学系，科罗拉多州立大学，美国科罗拉多州柯林斯堡

Erica Uehara

信息学研究生院，京都大学，日本京都左京区（日期：2026年1月8日）

我们介绍了珠链模型中离格点自避多边形打结的实验结果。我们使用 Clisby树数据结构和尺度无关枢轴算法，对每个介于 k 10 和 27 之间的 k 生成了大小为 $n = 2^k$ 的多边形。借助一种新的纽结图简化方法和无不变量纽结分类代码，我们能够确定每个多边形的精确纽结类型。结果表明，随机 n边形中纽结类型为 K 的素纽结因子数量可由泊松分布很好地描述。我们估算出打结特征长度为 $656\,500 \pm 2500$。我们利用大 n 情况下加项的计数，比以往实验更准确地测量打结率和纽结概率的振幅比。我们的计算结果与以往的格点计算相当吻合，并支持纽结局域化和纽结熵猜想。

I. 引言

具有打结拓扑的自避免多边形（SAPs）在高分子物理、化学和生物学的诸多领域引起了广泛关注，因为它们既能模拟自然界中的打结环状高分子，也能模拟合成化学中的此类高分子。例如，人们在生物体中发现了这类高分子，例如大肠杆菌的环状 DNA $E.\ coli$ [1–4]。

正如 Edwards [5], 所指出的，研究溶液或熔体中环状聚合物的统计性质并非易事。由于无法穿过自身，这类聚合物在热涨落作用下不会改变其拓扑。这种拓扑约束会大幅减少环状聚合物在构型空间中的可用体积或自由度，从而影响环状聚合物的统计性质。例如，打结环状聚合物熔体的结晶行为不同于未打结环状聚合物熔体 [6]。合成聚合物网络的网状结构可能存在自缠结，有研究认为，这些自缠结会提高其弹性模量 [7]。

20世纪60年代，Frisch、Wasserman 和 Delbrück [8, 9] 探讨了这样一个猜想：在大型环状聚合物中，非平凡的打结环状高分子应该十分常见。研究人员利用结不变量 [10–19] 通过数值模拟评估了打结概率，并在 DNA [2, 3]的生物实验中直接测量了这一概率。此外，严格证明了自避

如果自避行走足够长，那么它以指数级趋于必然地会打结 [20, 21]。在所有这些情境中，聚合物的柔韧性和厚度都发挥着重要作用。

具有固定拓扑的长而粗的自避免多边形（SAPs）的渐近打结行为仍未得到充分理解。人们通常认为，在足够长的聚合物上，纽结是局部化且渐近独立的事件 [22–25], ，并且有强有力的数值证据支持这一观点 [26], ，至少对于长度相对较短、加项数量相对较少的多边形是如此。本文考察随机变量

$$m_K^n = \text{纽结类型为 } K \text{ 的素纽结因子数量，在一个 } n\text{-边形中。}$$

如果素纽结因子彼此独立且局部化，那么 m_K^n 应近似服从泊松分布；也就是说，我们应有

$$P(m_K^n = m) \approx \frac{(\lambda_K(n))^m e^{-\lambda_K(n)}}{m!}, \tag{1}$$

其中 $\lambda_K(n)$ 是 m_K^n [27]的期望值。这是随机打结研究群体中的一个古老观察，可能可追溯至 20 世纪 60 年代 [28]。

假设我们处于 n、 m和 K 的范围内，其中（1）是一个很好的近似。令R_K（n） $= \lambda_K$（n）$/n$ 表示纽结类型为 K 的加项生成率（每条边），对于一个 n-边形。由此可知，找到一个不含类型为 K 的素纽结因子的多边形的概率，可很好地近似为

$$P(m_K^n = 0) \approx \frac{(R_K(n)n)^0 e^{-R_K(n)n}}{0!} = e^{-R_K(n)n}.$$

假设当 K 和 K' 是不同的素纽结类型时， m_K^n 和 $m_{K'}^n$ 近似独立，这立即意味着平凡结的概率

$$\begin{aligned} P_{0_1}(n) &\approx \Pi_{K\text{a prime knot type}} P(m_K^n = 0) \\ &= \Pi_{K\text{a prime knot type}} e^{-R_K(n)n} \\ &= e^{-(\sum_K R_K(n))n}, \end{aligned} \tag{2}$$

而 $P_K(n)$ 表示一个 n 边形具有（素）纽结类型 K 的概率

$$\begin{aligned} P_K(n) &= P(m_K^n = 1)\Pi_{K'\neq K} P(m_{K'}(n) = 0) \\ &\approx R_K(n)\, n\, e^{-R_K(n)n}\, e^{-\sum_{K'\neq K} R'_K(n)n} \\ &= R_K(n)\, n\, e^{-(\sum_{K'} R_{K'}(n))n} \\ &= R_K(n)\, n\, P_{0_1}(n). \end{aligned} \tag{3}$$

更一般地，纽结熵猜想 [29, 30] （参见 [31, 32]）指出，对于任意（素或合成）纽结类型 K ，其概率P_K（n）可以用以下表达式很好地近似：

$$P_{\overline{K}}(n) \approx C_{\overline{K}} n^{m(\overline{K})} P_{0_1}(n) \left(1 + \frac{\beta_{\overline{K}}}{n^\Delta} + \frac{\gamma_{\overline{K}}}{n}\right), \tag{4}$$

其中 $m(\overline{K})$ 是 K 的素因子个数，我们称 $m(\overline{0_1}) = 0$，并且

$$P_{0_1}(n) \approx A_{0_1} n^{\alpha_{0_1}} \mu_{0_1}^n. \tag{5}$$

这里，参数 β_K 和 γ_K 描述有限尺寸修正。参数 α_{0_1} （平凡结临界指数）和无量纲比值 $C_K/C_{K'}$ 应当具有普适性，而其他参数 C_K、 Δ、 A_{0_1}和 $\mu_{\overline{0_1}}$ 则依赖于模型。

平凡结的特征长度为 $N_{0_1} := -1/\log \mu_{0_1}$，解结概率约为 $\exp(-n/N_{0_1})$。如果线段数 n 远大于 N_{0_1}，这意味着多边形很可能是打结的。

比较（2）和（5），我们看到在此模型中，$A_{0_1} = 1$ 和 $\alpha_{0_1} = 0$，而

$$\mu_{0_1} = e^{-\left(\sum_K R_K(n)\right)}. \tag{6}$$

由于$m_K^n = 1$ 对于素结，结合（3）、（4）和（5）可得

$$R_K(n) \approx C_K \left(1 + \frac{\beta_K}{n^\Delta} + \frac{\gamma_K}{n}\right). \tag{7}$$

直接检验（4）很困难，因为 P_K（n）$\to 0$ 呈指数级快速变化，随着 $n \to \infty$ 对任意素结 K而言，因此难以收集较大 n 时的数据（见 [33, 34]）。这使得准确计算 C_K 的值非常困难。不过，我们可以通过收集 C_K 的数据来计算，并由此估算P_K（n）。此外，正如 Janse van Rensburg 所指出的 [35],

$$\frac{C_K}{C_{K'}} = \lim_{n\to\infty} \frac{P_K(n)}{P_{K'}(n)} = \lim_{n\to\infty} \frac{R_K(n)}{R_{K'}(n)} = \lim_{n\to\infty} \frac{\lambda_K(n)}{\lambda_{K'}(n)}.$$

也就是说，振幅比是随机自避 n边形中，纽结类型为 K 的素纽结因子平均数量与纽结类型为 K' 的素纽结因子平均数量之比。尽管C_K 的值依赖于模型，我们预期这一比值应当具有普适性（见表 I）。

在本文中，我们收集实验数据，以检验上述近似在自避免多边形的离格“珍珠串”模型 [36] 的中大型 n 范围内是否成立。我们重点使用新的计算工具，这些工具使我们能够生成极大的多边形，并准确判定其纽结类型。

我们进行了四项实验检验。首先，我们计算了交叉数不超过 6 的纽结类型的经验分布 m_K^n，以及 $n = 2^k$和 $k \in \{10, 11, \ldots, 27\}$。对于 2^k边多边形，我们至少抽样了2^{43-k} 个多边形，因此每个 k抽取的边总数至少为 $2^{43} \approx 8.8 \times 10^{12}$。我们检验发现，经验分布与相应经验均值 $\lambda_K(n)$所对应的泊松分布非常接近。这些经验均值会变得相当大，因此对于较大的 n，很容易准确地进行抽样。例如，$\lambda_{3_1}(2^{27}) \approx 193.82 \pm 0.09$（不确定性为标准误差）。

其次，我们计算相同对象的打结率 $R_K(n)$，并发现 K 和 n 的 (7) 能很好地解释有限尺寸效应。

第三，我们利用这些打结率估算平凡结的打结概率，并将结果与数据中平凡结的计数进行比较。我们发现，结果与 (5) 给出的“纯指数”模型吻合良好，并据此估算了打结特征长度 $(656\,500 \pm 2500)$。

最后，我们回到 (4)，计算简单结的打结概率 $P_K(n)$，发现 (3) 拟合良好，且对三叶结给出的 C_K 值几乎完全相同（β_K 和 γ_K 的值也相近）。其余纽结类型在这三个参数上都显示出显著差异。我们认为，这表明从 $P_K(n)$ 数据中计算 C_K 的难度很大。

总体而言，我们的结果完全符合以下假设：泊松模型（1）能够有效描述随机自避免多边形的打结情况。在 n 远大于以往实验所能检验的范围内，结果支持纽结局域化（进而支持纽结熵猜想）。此外，我们的数据也支持有限尺寸修正的标准模型（3）。

II. 方法

为了生成多边形，我们对经典多边形折叠方法进行了改进 [37]。每个试验步骤中，我们在自避免多边形上均匀随机选择一个顶点 v_i。对于一个 n边形，我们随后在x 上均匀抽样 $[1,\log_2(n)]$, ，并将 2^x 舍入到最近的整数 k，这遵循了 Clisby 提出的“无尺度抽样”方法 [38]。随后，将多边形中顶点 v_i 和 $v_{i\pm k}$ 之间的边定义为“可移动弧”（两者被选中的概率相等）。提议的移动从绕过 v_i 和 $v_{i\pm k}$ 的直线旋转，以及关于包含 v_i和 $v_{i\pm k}$的平面反射中均匀抽样。每种情况下，若新构型仍然自避免，则接受提议的步骤。我们测量了接受概率 $\approx 0.63\,n^{-0.057}$。该算法满足细致平衡，因此产生均匀抽样。我们尚未证明，从起始构型（正 n边形）可以到达每一种珠链自避免多边形，不过我们猜想确实如此。

我们对每次运行进行了 $20\,n$ 次尝试步的预热，随后每隔 $n/30$次尝试步采集一次样本。除 n 外，所有情况下我们都使用了 64 条参数相同的并行马尔可夫链；在 2^{27}, 时则使用了 128 条并行链。我们为 Clisby树编写了一套全新且高性能的实现 [39, 40] （另见 [41–43]）。这种数据结构能够以 $O(\log n)$ 次折叠完成操作（包括碰撞检测），同时将所有顶点位置的计算保持在 $O(n)$ 复杂度。对于非常大的多边形，我们的实现需要相当多的内存（ 2^{27}边形需要 ≈ 30 gb），因此我们在京都大学 System C（Cinnamon）的高内存节点上运行了 2^{24}–2^{27}边形，并在佐治亚大学佐治亚先进计算资源中心（GACRC）的 Sapelo2集群上完成其余计算。我们的代码 polyfold 可在 GitHub 上获取 [44]。

我们生成的自避免多边形在其平面投影中有大量交叉数。平均而言， 2^{27}边形的投影有 $\approx 2^{25}$ 个交叉。我们使用极为谨慎的浮点计算来检测线段相交，从而以经验证的准确性为这些纽结构造平面图编码（见 [45, 46]）。为了识别所得纽结，我们编写了一个名为 Knoodle [44, 47]的新程序，用于高效地对纽结图进行组合化简。其关键思想是：如果图中的一段弧只从其他弦上方交叉经过，就可以按需重新布置这段弧，以减少图中的交叉数（在纽结理论中，这称为“穿越变换”，我们将这一过程称为“穿越约简”）。SnapPy 也能进行类似的化简，但寻找每次变换都需要（至少） $O(n)$ 的内存和时间，因此整个化简过程的复杂度为 $O(n^2)$。我们的程序基本上能以恒定的时间和内存开销找到化简方式，使整个过程的时间复杂度大致为线性（见 [47]）。实际使用中，它比 SnapPy 快好几个数量级。

此外，结图中仅通过两条弧与其余部分相连的部分，可以识别为连接和项，并立即分离出来以便进一步化简。此过程几乎总能得到拓扑最简交叉图。若未能如此，我们便使用图嵌入技术构造一条与该结图具有相同纽结类型的新格曲线，将其旋转至不同视角，然后继续穿越化简过程（更多详情请参见 [47] ）。Knoodle 可在 GitHub [44]上获取。

我们总共在 $\approx 1.72\times10^{10}$ 个多边形中识别出 $\approx 2.5\times10^{8}$ 个素纽结因子。经过化简后，除 17 个外，其余的交叉数均为 ≤ 13 。通过将它们与预计算结图列表进行匹配（参见 [48]），我们无需使用结不变量便能迅速完成分类。剩下的 17 个纽结全都是双曲纽结，我们通过使用 SnapPy 识别其结补空间，确定了它们的纽结类型。

虽然在识别纽结类型时，我们能够区分纽结的对称类型（例如 3_1 及其镜像3_1^m），但为了与现有文献保持一致，我们在分析中将它们归为一组（例如用 $3_1/3_1^m$表示所有三叶结）。按照这一约定，对于 6 个或更少交叉数的 7 种非平凡素纽结类型，我们有足够的观测数据进行统计分析。我们偶尔也观测到复杂得多的 纽结；例如，我们观测到的最复杂加项是交叉数为 16 的纽结 $16a_{61\,059}$和 $16n_{521\,027}$。

这些纽结类型显然比交叉数为 ≤ 6 的纽结少见得多，但我们的相关数据过于稀疏，无法准确量化这一点。

原始数据和汇总统计量均存档于 Dryad [49]。汇总统计量也收录在补充数据中。

III. 结果

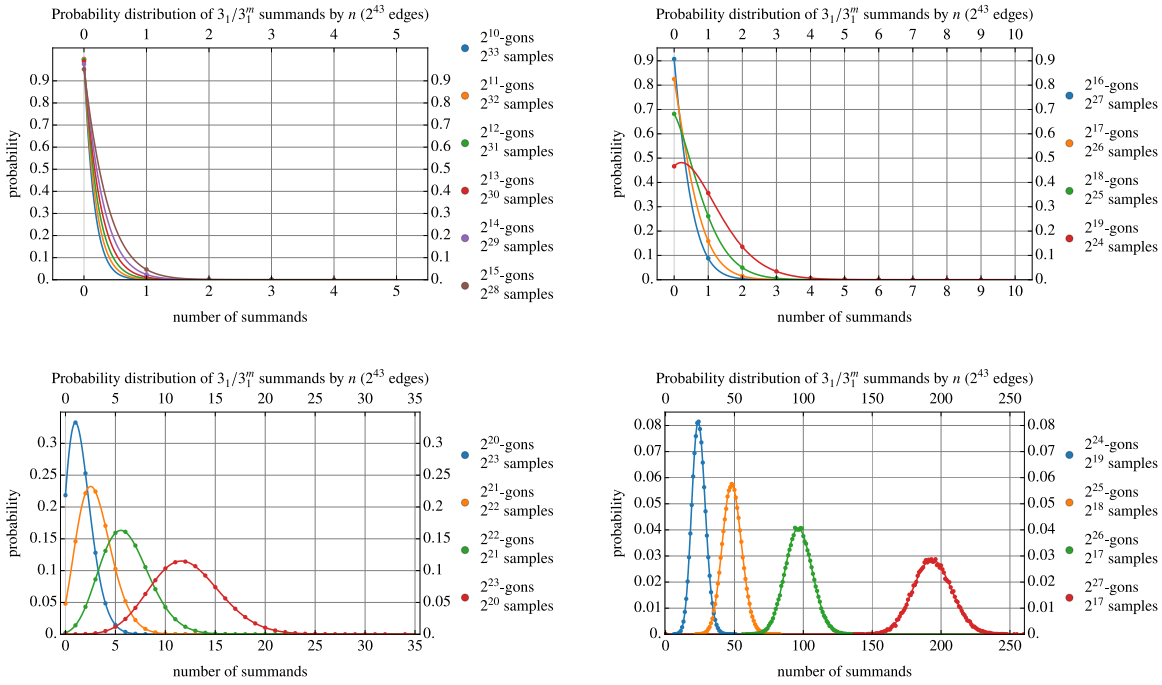

图 1. 这些图展示了在长度为 n 的离格点自避多边形中观察到 m 个三叶结和因子的概率，以及泊松分布函数 $\frac{e^{-\lambda_K(n)}(\lambda_K(n))^m}{m!}$，取自（1）。该函数仅在整数 m处有定义，但我们绘制了连接曲线以便观察。采样的 n边形数量（$2^{43}/n$）随 n增加而减少，因此 n较大时数据看起来更粗糙。

我们将分析范围限定为 K 和 n，在这些情况下，我们在每条并行马尔可夫链中观察到至少 10 个类型为 K 的加项。这样剩下 7 种具有 ≤ 6 个交叉数的纽结类型。对于每条≥ 64 马尔可夫链，我们使用 Geyer 的 IPS 估计计算 [50] 的样本均值和均值标准误，然后在并行链之间合并这些估计（假设彼此独立）。由此得到 $\lambda_K(n)$ 的经验值及其误差估计。根据这些估计，$\lambda_K(n)$ 的最大相对（标准）误差小于 3%。

利用这些 $\lambda_K(n)$数值，我们能够计算等式（1）右侧的泊松分布。图1和图2展示了 m_K^n 在三叶结、八字结以及5_1, 5_2,和 6_1 对应的各种 n的经验分布，以及相应的泊松分布。

我们计算了 [51] 的经验分布与泊松模型之间的全变差距离（TV） m_K^n。结果见图3；结果表明，除0.01外（且通常远小于该值），这一距离均小于该值；仅在少数 $m_{3_1/3_1^m}^n$和 $m_{4_1}^n$ 取值下，n 非常大时例外。在这些情况下，TV 最大可达0.03。关于 $\lambda_K(n)$ 的估计值及其估计误差和全变差距离，详见补充数据和 Dryad 数据集 [49]。

起初，TV 随着 n 增加而上升，这似乎有悖直觉；在渐近极限下，泊松近似本应更准确。我们认为这是实验设计造成的假象，因为

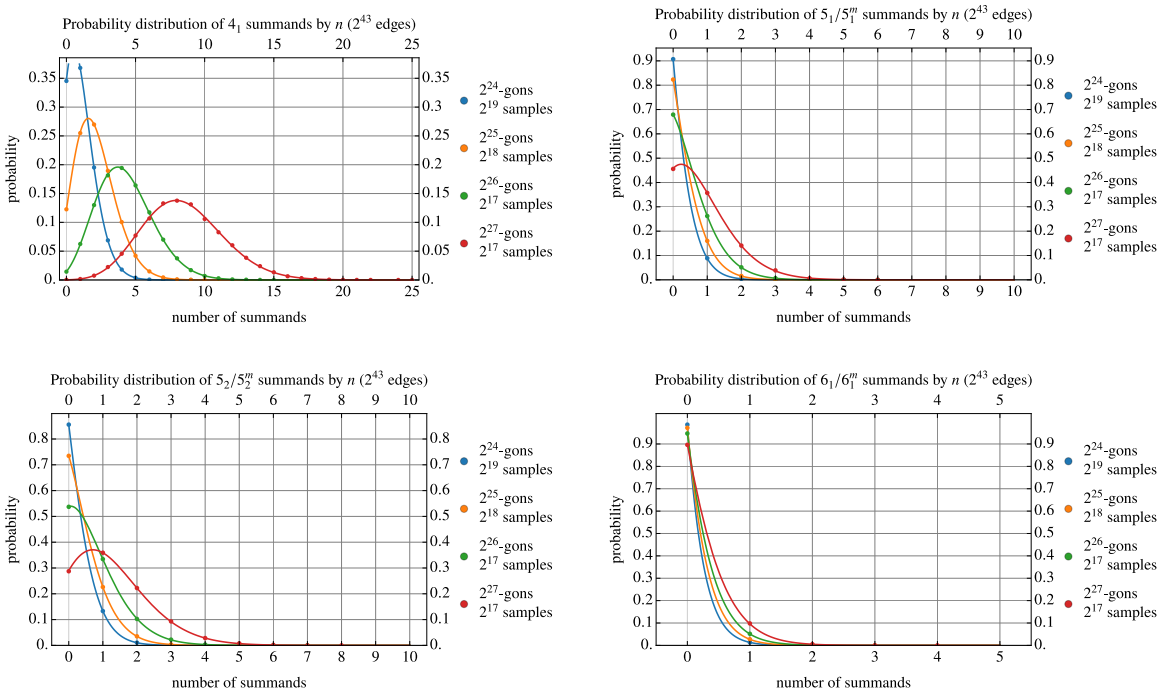

图2。这些图展示了在长度为 n 的离格点自避多边形中，观察到 m 个类型为 **41**、$5_1/5_1^m$、$5_2/5_2^m$ 或 $6_1/6_1^m$ 的纽结加项的概率 $P(m_{4_1}(n) = m)$、$P(m_{5_1}(n) = m)$、$P(m_{5_2}(n) = m)$ 和 $P(m_{6_1}) = m)$，以及式（1）中的泊松分布函数 $\frac{(\lambda_K(n))^m}{m}e^{-\lambda_K(n)}$！由于这些纽结比三叶结罕见得多，因此这里只展示 n 的较大取值。泊松拟合仍然非常好。

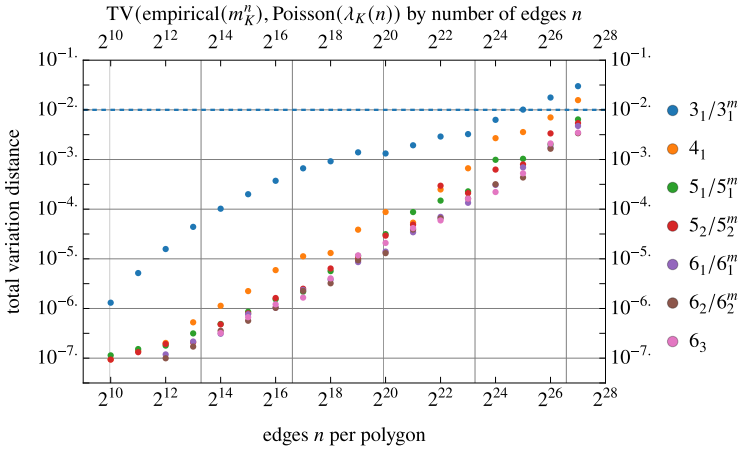

图3。该图展示了全变差距离 $\mathrm{TV}(p_1, p_2) = \sum_m |p_1(m) - p_2(m)|$ 在离格点自避免多边形中，纽结类型为 K 的素纽结因子数量的经验分布 n-边形m_K^n 与均值为 $\lambda_K(n)$的相应泊松模型之间的距离；其中使用了根据我们的数据集对 $\lambda_K(n)$ 的估计。可以看到，几乎所有这些距离都非常小，这证实了式（1）对这些 K 和 n的近似是准确的。

抽样的多边形数量会随着 n 增加而减少。为验证这一点，我们进行了皮尔逊 χ^2 检验，以检验大-n 数据是否是从泊松分布中抽取的，其中 $m^n_{3_1/3_1^m}$ 和 $m^n_{4_1}$。正如预期的那样，对于 $K = 3_1/3_1^m$ 和 $2^{23} \le n \le 2^{27}$ 以及 $K = 4_1$ 和 $2^{18} \le n \le 2^{27}$

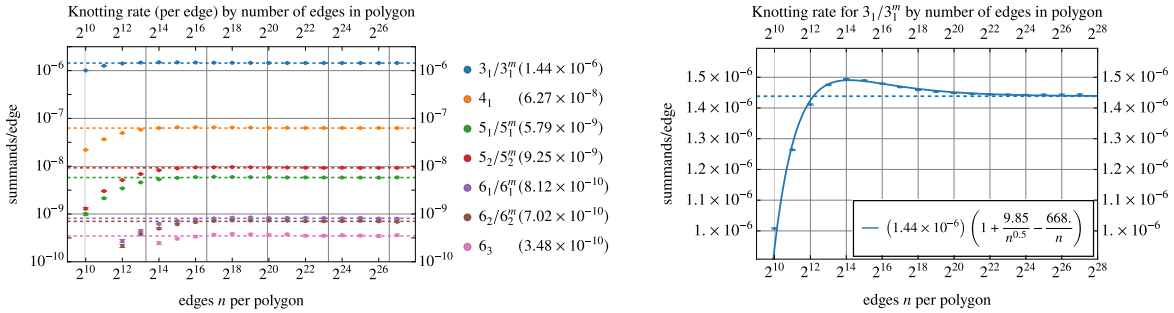

图4。左侧的双对数图显示了每条边的打结率： $R_K(n) = \lambda_K(n)/n$ 这是根据我们的实验估算得出的。99% 置信区间也已纳入，但数值太小，在图中无法看清。这些值趋于在 n 处保持恒定，这一事实支持了我们的结论：渐近打结率$C_K = \lim_{n\to\infty} \lambda_K(n)/n$ 存在。我们对 C_K 的估算结果及其纽结类型一并给出。右侧的半对数图仅显示了三叶结的这一概率，以及我们提出的有限尺寸修正拟合（7）。

（涵盖所有 TV ≥ 0.01 的情形），该检验无法在 $p = 0.05$ 下拒绝这一假设。

随后，我们计算了数据集中和项的生成率（每条边）： $R_K(n) = \lambda_K(n)/n$ 。同样，我们有足够的数据来计算交叉数不超过六的纽结的这些生成率。图4 展示了结果；所有打结率都有有限尺寸修正，且修正因纽结类型而异。此外，带有7的式子 $\Delta = 0.5$ 可以较好地解释有限尺寸修正。我们注意到，随着纽结变得越来越复杂，其渐近生成率会迅速下降，每增加一个交叉数就下降一个数量级以上。这意味着在该模型中，绝大多数打结由三叶结和八字结加项构成，而相比之下，所有其他纽结类型都极为罕见。Baiesi、Orlandini 和 Stella [52] 以及 Rechnitzer 和 Janse van Rensburg [33]通过计算 C_K/C'_K来估算渐近比值 $P_K(n)$，发现这些比值与晶格无关。我们可以对非晶格模型作出相应的估算，通过C_K 根据 $R_K(n)$进行计算；结果见表 I。

-/-	4_1			$5_1/5_1^m$			$5_2/5_2^m$			$6_1/6_1^m$		$6_2/6_2^m$		6_3	
	（新）	BOS	JvRR	（新）	BOS	JvRR	（新）	BOS	JvRR	（新）	BOS	（新）	BOS	BOS	
$3_1/3_1^m$	22.9	22.12	28	248	197	400	156	140	280	1770	2633	2050	1668	4140	2677
4_1	-	-	-	10.8	8.89	15	6.78	6.33	9	77.2	119	89.4	75.4	180	121
$5_1/5_1^m$	-	-	-	-	-	-	0.626	0.712	0.67	7.13	13.39	8.25	8.48	16.7	13.61
$5_2/5_2^m$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11.4	18.08	13.2	11.9	26.6	19.12
$6_1/6_1^m$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.16	0.63	2.34	1.01
$6_2/6_2^m$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.02	1.60

表 I。该表给出了振幅比 $C_K/C_{K'}$，其中 K 在各行中保持不变，而 K' 在各列中保持不变。我们的数据位于标有 (new) 的列中；标有 BOS 的列包含来自 Baiesi、Orlandini 和 Stella 的简单立方晶格数据，数据范围为 n 不超过 200000 [52]。标有 JvRR 的列包含来自 Janse van Rensburg 和 Rechnitzer 的 SCC、FCC 及体心立方晶格数据，数据范围为 n 不超过 512 [33]。我们的数据与这些晶格研究具有可比性，这一事实支持了这样一种观点：珠链模型和晶格模型都属于同一个普适类。

我们只能直接测量少数几种纽结的打结率 R_K（n）。根据（5），

$$\sum_K R_K(n) = -\frac{1}{n}\log P_{0_1}(n)$$

其中求和遍及所有素纽结类型 K。由于我们可以通过统计样本中的无结多边形来测量小 n 时的 $P_{0_1}(n)$，因此可以据此粗略估计以下对象的生成率：

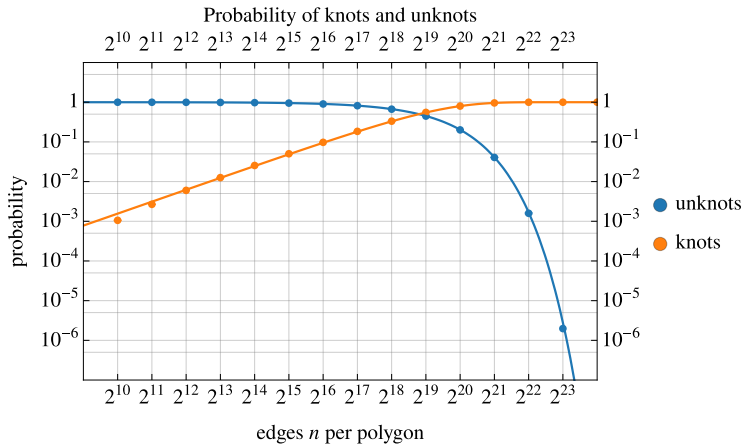

图 5. n 条边自避多边形中纽结和平凡结所占的比例，以及 e^{-n/n_0} 和 $1-e^{-n/n_0}$ 的图像，其中特征长度 $n_0 = 656\,500$ 根据打结率估算。由于对于更大的 n，我们未观测到平凡结自避多边形，因此图像在 $n = 2^{23}$ 处截止。

更复杂的纽结

$$R_{\text{complex}}(n) := \sum_{K\,:\,\text{cr}(K)>6} R_K(n) = -\frac{1}{n}\log P_{0_1} - \sum_{K\,:\,\text{cr}(K)\leq 6} R_K(n)$$

使用这种方法，我们得到一个保守估计：对于 $2^{10} \leq n \leq 2^{21}$，有 $R_{\text{complex}}(n) < 10^{-8}$。假设这一界限对更大的 n也成立，我们可以估算特征长度$n_0 = 1/\sum_K C_K$为 $n_0 \approx 656\,500 \pm 2500$。图 5 显示，对于较大的 n，近似式 $P_{0_1}(n) \approx e^{-n/n_0}$ 能够相当有效地估算平凡结的概率和打结的概率。我们注意到，[14] 基于该模型的 $n_0 \approx 800\,000$ 估算采用了≤ 1000 颗珠子的模拟。

现在，我们可以回到最初的纽结熵猜想，将不同素纽结类型的观测概率 $P_K(n)$ 与公式 (4) 的预测进行比较。我们的目标是检验纽结概率的预测是否准确，并确认通过拟合 (7) 得到的 C_K、β_K 和 γ_K 的拟合值，是否与通过拟合 (7) 得到的 $R_K(n)$ 相当。图 6 展示了三叶结的结果。在这里，对于纽结类型为 $3_1/3_1^m$ 的纽结，我们有大量观测结果，因此所有结果都相当相似。对于其余的纽结类型，我们关于 $P_K(n)$ 的数据要少得多，结果也有所不同；拟合 $R_K(n)$ 得出的 C_K 渐近值比拟合 $P_K(n)$ 得出的值低约 10%。完整结果汇总见表 II。

IV. 结论与未来方向

我们针对“串珠项链”模型中的超大离格点自避多边形，提出了支持纽结局域化和纽结熵猜想的新证据。三项因素使我们的实验成为可能：我们将重点从计算单个纽结类型的概率转向统计素分解中的加项数，从而获得了一个新的目标观测量；我们实现了适用于多边形的 Clisby树，使我们能够处理大型多边形；此外，我们还开发了新的纽结化简与分类代码，使我们能够计算这一观测量。

以往的实验基本上都受限于为大型多边形计算结不变量的困难。事实证明，对于我们的实验而言，限制因素是预热生成多边形的马尔可夫链所需的时间，这占用了大部分计算时间

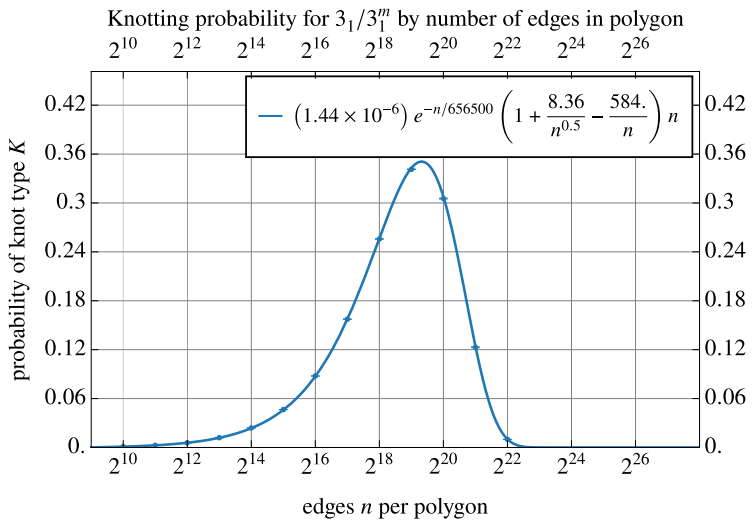

图6. 纽结类型 $K=3_1$ 或 $K=3_1^m$，以及 99% 置信区间，基于数据集中观测到的计数（误差通过对每条马尔可夫链使用 Geyer 的 IPS 估计得出，再假设并行链相互独立并进行合并）。数据与标准模型（3）拟合良好。系数 C_K 以及 β_K 和 γ_K 的有限尺寸修正，与针对$R_K(n)$ 测得的数值相近，见图4。

	C_K		β_K	γ_K		调整后的 R^2
$3_1/3_1^m$	1.44×10^{-6}	(1.44×10^{-6})	9。85 (8。36)	$-668.$	$(-584.)$	1. (0.99991)
4_1	6.27×10^{-8}	(6.71×10^{-8})	19。4 (-8.94)	$-2390.$	$(-424.)$	0.99999 (0.99837)
$5_1/5_1^m$	5.79×10^{-9}	(6.53×10^{-9})	17。1 (-29.8)	$-3320.$	(67.8)	0.99992 (0.99651)
$5_2/5_2^m$	9.25×10^{-9}	(1.06×10^{-8})	17.9 (-35.3)	$-3780.$	(219.)	0.9999 (0.99662)
$6_1/6_1^m$	8.12×10^{-10}	(9.04×10^{-10})	28.7 (-37.1)	$-9370.$	$(-520.)$	0.99981 (0.99857)
$6_2/6_2^m$	7.02×10^{-10}	(8.16×10^{-10})	45.5 (-48.1)	$-12800.$ (44.8)		0.9998 (0.99862)
6_3	3.48×10^{-10}	(3.89×10^{-10})	86。2 (-14.4)	$-22600.$	$(-4150.)$	0.99962 (0.99915)

表 II. 此表展示了我们最终得到的振幅 C_K 以及有限尺寸修正系数 β_K和 γ_K。这些数值是通过将数据集中的观测打结率 $R_K(n)$拟合到式 (7) 得出的。最后一列显示了拟合 $R_K(n)$速率随 n变化时调整后的 R^2 值。这些拟合效果极佳。括号内是通过将式 (3) 拟合到我们关于$P_K(n)$的有限得多的数据所得的相应预测值；最后一列显示了拟合 $P_K(n)$时调整后的 R^2。对于三叶结，两者相当吻合。在其余情况下，我们认为 $R_K(n)$的预测更准确，因为这些情况下我们拥有更大 n 的数据。

对于 2^{26}边和 2^{27}边形（参见 [39]的第 4 节）。我们认为，预热所需的步数无法从当前的 $20\,n$进一步减少。因此，若能找到生成初始多边形的更好策略，将会非常有意义。

对于非三叶结，通过拟合 R_K 和 P_K 得到的振幅 C_K 之间的差异也是一个值得关注的问题。我们认为，这种差异主要与数据质量有关；例如，如果进行规模大得多、包含更多多边形的实验，或许就能观测到足够多的“纯”八字结，从而使 C_K 数值吻合。不过，有限尺寸效应模型也可能需要改进。这个问题同样留待未来研究。

Whittington 认为， [28] 打结率 $R_K(n)$ 应随着 n 的增加而继续上升；随着越来越大的 K 型纽结出现，这种上升或许会非常缓慢。这是一个非常有趣的想法。我们确实看到 $R_{3_1/3_1^m}$ 在 $n=2^{26}$ 和 $n=2^{27}$ 中略有上升，不过误差棒不足以让我们明确判定这一点。归根结底，这个问题必须通过一个定理，或者通过

比我们在这里所做的实验规模大得多的实验来解决。

我们的纽结简化与识别工具链 [44] 适用于规模大得多的多边形，而且不依赖于生成这些多边形所用的模型。因此，我们希望其他作者也能尝试类似的格点实验，尤其是尝试改进晶格上的振幅比估计。将我们的工具链应用于非自避多边形也会很有意思，我们打算着手进行这项工作。初步测试表明，这些多边形含有许多简单纽结和因子，但似乎也含有一两个打结方式复杂得多的素因子。

当然，既然我们现在能够生成包含许多三叶结和因子的大型多边形样例，若能在几何上将这些因子分离出来并直接测量其大小，将会很有意思。这项挑战并不简单，我们留待未来研究。不过，值得鼓舞的是，式（1）中的泊松模型与纽结局域化猜想相当吻合；该猜想认为，大多数素因子都应当是紧致的，并彼此隔离。

最后需要注意的是， [17, 53] 关于 $P_{K\#K'}(n)$ 的“求和规则”是式（1）中泊松模型的直接推论。我们的数据集中的 $P_{K\#K'}$ 经验测量也验证了这些规则。

致谢

我们衷心感谢各位同事进行了许多富有帮助的讨论，尤其感谢 Nick Beaton、Mark Dennis、Shura Grosberg、Esias Janse van Rensburg、Enzo Orlandini、Andrew Rechnitzer、Chris Soteros 和 Stuart Whittington。本文的几项重要改进源自 BIRS 研讨会 25w5490，聚合物建模与 *DNA* 拓扑：理论、计算与实验的相互作用 此外，一些关键工作是在 BIRS 的 25rit038 研讨会期间完成的，棍数与多边形纽结理论。我们感谢日本科学技术振兴机构（CREST 项目编号 JPMJCR19T4）和美国国家科学基金会（DMS–2107700）的支持。H.S. 得到了研究培训小组“能量、熵与耗散动力学（EDDy）”的资助，该小组由德国研究联合会（DFG）资助，项目编号为 320021702/GRK2326。

---

[1] M. A. Krasnow、A. Stasiak、S. J. Spengler、F. Dean、T. Koller 和 N. R. Cozzarelli，DNA 纽结和链环的绝对手性测定，《自然》304，559（1983）。[2] V. V. Rybenkov、N. R. Cozzarelli 和 A. V. Vologodskii，DNA 打结的概率与 DNA 双螺旋的有效直径，《美国国家科学院院刊》90，5307（1993）。[3] S. Y. Shaw 和 J. C. Wang，闭环过程中 DNA 链的打结，《科学》260，533（1993）。[4] R. K. Sharma、I. Agrawal、L. Dai、P. S. Doyle 和 S. Garaj，利用纳米孔传感器检测复杂 DNA 纽结，《自然·通讯》10，4473（2019）。[5] S. F. Edwards，具有拓扑约束的统计力学：II，《物理学杂志 A：普通物理》1，15（1968）。[6] K. Hagita、T. Murashima、N. Sakata、K. Shimokawa、T. Deguchi、E. Uehara 和 S. Fujiwara，具有三叶结的环状聚乙烯熔体中拓扑势垒对结晶行为的分子动力学研究，《大分子》56，15（2023）。[7] W. W. Graessley 和 D. S. Pearson，含有非局域连接点的聚合物网络中的应力–应变行为，《化学物理学杂志》66，3363（1977）。[8] H. L. Frisch 和 E. Wasserman，化学拓扑学，《美国化学会志》83，3789（1961）。[9] M. Delbrück，生物学中的纽结问题，载于《生物科学中的数学问题》，《应用数学专题讨论会论文集》第14辑，R. E. Bellman 编（美国数学会，1962），第55–63页。

[10] A. V. Vologodskii、A. V. Lukashin、M. D. Kamenetskiĭ 和 V. V. Anshelevich，聚合物链统计力学中的纽结问题，《苏联实验与理论物理学杂志》39，1059（1974年）。[11] J. des Cloizeaux 和 M. Mehta，聚合物环的拓扑约束与临界指数，《物理学杂志》40，665（1979年）。[12] M. L. Bret，蒙特卡罗计算未打结和已打结圆形 DNA 的超螺旋能、沉降常数和回转半径，Bioploymers 19，619（1980年）。[13] J. P. J. Michels 和 F. W. Wiegel，聚合物环中的纽结概率，《物理快报A辑》90，381（1982年）。[14] K. Koniaris 和 M. Muthukumar，环状聚合物的成结性，《物理评论快报》66，2211（1991年）。[15] T. Deguchi 和 K. Tsurusaki，利用 Vassiliev 不变量对随机打结进行统计研究，《纽结理论及其应用杂志》3，321（1994年）。[16] T. Deguchi 和 K. Tsurusaki，随机打结的普适性，《物理评论E辑》55，6245（1997年）。[17] E. Uehara 和 T. Deguchi，拓扑约束下自避免多边形的打结概率，《化学物理学杂志》147，094901（2017年）。[18] A. Xiong、A. J. Taylor、M. R. Dennis 和 S. G. Whittington，等边随机多边形的纽结概率，《物理学杂志A：数学与理论》54，405001（2021年）。[19] J. Cantarella、H. Schumacher 和 C. Shonkwiler，等边闭合多边形的更快直接抽样算法及其打结概率，《物理学杂志A：数学与理论》57，285205（2024年）。[20] D. W. Sumners 和 S. G. Whittington，自避免行走中的纽结，《物理学杂志A：数学与通论》21，1689（1988年）。[21] N. Pippenger，随机行走中的纽结，《离散应用数学》25，273（1989年）。[22] V. Katrich、W. K. Olson、A. Vologodskii、J. Dubochet 和 A. Stasiak，随机打结的紧致性，《物理评论E辑》61，5545（2000年）。[23] B. Marcone、E. Orlandini、A. L. Stella 和 F. Zonta，聚合物中纽结的长度是多少？《物理学杂志A：数学与通论》38，L15（2005年）。[24] B. Marcone、E. Orlandini、A. L. Stella 和 F. Zonta，环状聚合物中纽结的大小，《物理评论E辑》75，041105（2007年）。[25] E. Orlandini、A. L. Stella 和 C. Vanderzande，聚合物中纽结的大小，《物理生物学》6，025012（2009年）。[26] E. Orlandini、E. J. Janse Van Rensburg、M. C. Tesi 和 S. G. Whittington，打结格点多边形的熵指数，载于《聚合物科学中的拓扑与几何》，IMA数学及其应用丛书第103卷，Whittington、S. G.、Sumners、D. W. 和 Lodge、T. 编（施普林格，纽约，1998年），第9–21页。[27] 对于非常大的 m，我们知道 $P(m_K^n = m) = 0$，而 $(\lambda_K(n))_m$ $m e^{-\lambda_K(n)}$ $! > 0$，因此式（1）的两边不可能完全相等。[28] S. G. Whittington，（2025年），个人通信。[29] N. R. Beaton、K. Ishihara、M. Atapour、J. W. Eng、M. Vazquez、K. Shimokawa 和 C. E. Soteros，聚合物在纳米通道中纽结局域化的首个证明，《物理学杂志A：数学与理论》57，38LT01（2024年）。[30] N. R. Beaton、K. Ishihara、M. Atapour、J. W. Eng、M. Vazquez、K. Shimokawa 和 C. E. Soteros，格点管中聚合物的缠结统计与四股辫闭合图的解纽结，《离散应用数学》379，242（2026年）。[31] E. Orlandini、M. C. Tesi、E. J. Janse van Rensburg 和 S. G. Whittington，指定纽结类型的格点多边形的熵指数，《物理学杂志A：数学与通论》29，L299（1996年）。[32] E. Orlandini、M. C. Tesi、E. J. Janse van Rensburg 和 S. G. Whittington，打结格点多边形的渐近性质，《物理学杂志A：数学与通论》31，5953（1998年）。[33] E. J. Janse Van Rensburg 和 A. Rechnitzer，纽结概率比的普适性，《物理学杂志A：数学与通论》44，162002（2011年）。[34] E. Uehara 和 T. Deguchi，重新审视打结概率的特征长度，《物理学杂志：凝聚态》27，354104（2015年）。[35] E. J. Janse van Rensburg，格点多边形中的打结概率，载于《物理纽结：R^3中的几何对象的打结、链环与折叠：美国数学会物理成结专题会议及解纽结-

议程，拉斯维加斯，内华达州，2001年4月21日至22日，《当代数学》第304卷，Calvo, J. A.、Millett, K. C. 和 Rawdon, E.J. 编（美国数学会，普罗维登斯，罗得岛州，2002年）。[36] 此处，环状聚合物由以 $v_1, \ldots, v_n$ 为球心、内部互不相交且直径为单位长度的球体建模，其中以 v_i 和 v_{i+1}（以及 v_n 和 v_1）为球心的球体必须相切 [54–56]。[37] N. Madras 和 A. D. Sokal，《枢轴算法：一种用于自避行走的高效蒙特卡洛方法》，《统计物理学杂志》50，109（1988年）。[38] N. Clisby，《通过枢轴算法计算自避行走的连接常数》，《物理学杂志A：数学与理论》46，245001（2013年）。[39] N. Clisby，《用于自避行走的枢轴算法的高效实现》，《统计物理学杂志》140，349（2010年）。[40] N. Clisby，《通过快速实现枢轴算法精确估计自避行走的临界指数》 ν，《物理评论快报》104，055702（2010年）。[41] N. Clisby 和 D. T. C. Ho，《枢轴算法的非格点与并行实现》，《物理学杂志：会议系列》2122，012008（2021年）。[42] S. Schnabel 和 W. Janke，《二维至五维中长硬球聚合物链的蒙特卡洛模拟》，《大分子理论与模拟》32，2200080（2023年）。[43] S. Schnabel 和 W. Janke，《借助树形数据结构和精简的梅特罗波利斯算法加速聚合物模拟》，《计算机物理学通讯》256，107414（2020年）。[44] H. Schumacher 和 J. Cantarella，Knoodle，https://github.com/HenrikSchumacher/Knoodle（2025年）。[45] S. Boldo，《用于正确判别式计算的卡汉算法终于得到形式化证明》，《IEEE计算机汇刊》58，220（2009年）。[46] C.-P. Jeannerod、N. Louvet 和 J.-M. Muller，《进一步分析卡汉算法，以准确计算 2×2 行列式》，《计算数学》82，2245（2013年）。[47] J. Cantarella、H. Schumacher 和 C. Shonkwiler，《难解平凡结换个角度看往往很容易》（准备中）。[48] J. Cantarella、H. Schumacher 和 C. Shonkwiler，《一种极快的代码，可对交叉数不超过 13 的纽结进行分类》（准备中）。[49] J. Cantarella、T. Deguchi、H. Schumacher、C. Shonkwiler 和 E. Uehara，《数据集：超长非格点自避多边形中的随机打结》 [数据集]（2025年），Dryad。[50] C. J. Geyer，《实用马尔可夫链蒙特卡洛》，《统计科学》7，473（1992年）。[51] 这是根据两个分布计算的任意事件（例如 $m_K^n = m$）概率之间的最大差值。[52] M. Baiesi、E. Orlandini 和 A. L. Stella，《打结的熵代价》，《统计力学杂志：理论与实验》2010，P06012（2010年）。[53] T. Deguchi 和 E. Uehara，《DNA打结概率中的拓扑求和规则》，载于《生物聚合物的拓扑与几何》，《当代数学》第746卷，E. Flapan 和 H. Wong 编（美国数学会，普罗维登斯，罗得岛州，美国，2020年），第57–83页。[54] S. D. Stellman 和 P. J. Gans，《聚合物构象的高效计算机模拟。I. 硬球模型的几何性质》，《大分子》5，516（1972年）。[55] R. Kenyon 和 P. Winkler，《支化聚合物》，《美国数学月刊》116，612（2009年）。[56] A. McMullen、M. Holmes-Cerfon、F. Sciortino、A. Y. Grosberg 和 J. Brujic，《由液滴构成的自由连接聚合物》，《物理评论快报》121，138002（2018年）。