arXiv:2602.17350v1 [cs.LG] 19 Feb 2026

几何纽结分类中的捷径学习

Djordje Mihajlovic[1,2] 和 Davide Michieletto[2,3,4]
[1]*School of Mathematics, University of Edinburgh, Edinburgh, EH9 3FD, UK*
[2]*School of Physics and Astronomy, University of Edinburgh, Edinburgh, EH9 3FD, UK*
[3]*MRC Human Genetics Unit, Institute of Genetics and Cancer, University of Edinburgh, Edinburgh, EH4 2XU, UK*
[4]*International Institute for Sustainability with Knotted Chiral Meta Matter (WPI-SKCM²), Hiroshima University, Higashi-Hiroshima, Hiroshima 739-8526, Japan*

闭曲线拓扑的分类是低维拓扑学中的核心问题之一，其应用领域远超数学本身，涵盖蛋白质折叠、高分子物理学，甚至磁流体动力学。其核心问题在于，如何确定一条闭弧的两个嵌入在环境同痕下是否等价。鉴于神经网络展现出解决复杂分类任务的卓越能力，自然会产生这样的问题：能否使用机器学习（ML）来处理纽结分类问题。在本文中，我们研究机器学习为解决纽结分类任务所采用的通用捷径方法，特别发现了通过多边形纽结的分子动力学模拟生成的训练数据中隐藏的非拓扑特征，而机器学习正是利用这些特征得出正类分类结果。随后，我们为未来使用机器学习处理纽结分类任务的尝试提供严格基础，开发了公开可用的：(i) 数据集，旨在消除基于非拓扑特征进行分类的可能性；以及 (ii) 代码，可生成忠实探索选定几何状态空间、同时保持纽结拓扑不变的纽结嵌入。我们预计，这项工作将加速能够解决复杂几何纽结分类任务的机器学习模型的发展。

I. 引言

纽结理论是低维拓扑学的一个研究领域，研究形如 $S^1 \hookrightarrow \mathbb{R}^3$ 的纽结嵌入。若一个嵌入可以通过环境同痕变换为另一个嵌入，则称这两个纽结等价；也就是说，嵌入可以光滑变形，但曲线既不会断裂，也不会穿过自身。环境同痕可以通过图示中的Reidemeister变换实现，因此，若两个嵌入可以通过一系列Reidemeister变换相互转换，则称它们拓扑等价 [1]。

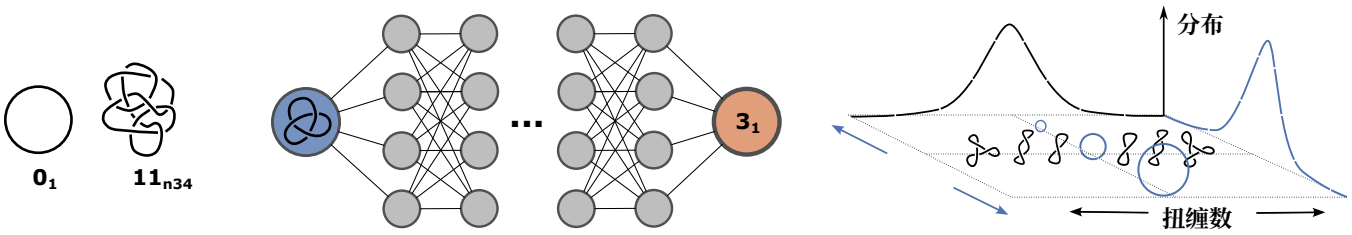
将纽结按拓扑等价分类这一难题可追溯至Peter Guthrie Tait，他受到开尔文勋爵关于打结涡旋原子的构想启发 [2]。在现行的目录中，不同纽结的标签形式为 P_Q，其中P 表示纽结在任意投影中的最小交叉点数，而 Q 表示具有相同交叉点数的纽结中的某种（略显随意的）排序。对于交叉点数超过 10 的纽结，通常还会添加额外标签，以标明交替、 a或非交替、n等性质，从而得到 P_{nQ} （图 1A）。

纽结通过拓扑不变量进行分类，即可在三维嵌入或其二维投影上计算、且在环境同痕（例如 Reidemeister 变换）下保持不变的量。然而，寻找一种“完全不变量”，即能够对任意两个纽结进行唯一分类的不变量，仍然是数学中的一个开放问题 [1]。事实上，数学家已经发展出多种兼具几何与拓扑构造的不变量，例如 Jones多项式 [3], HOMFLY-PT多项式 [4], 双曲体积 [5], 以及 Vassiliev 不变量 [6]。然而，迄今发展的每种不变量都尚未被证明能够唯一识别每一个纽结；也就是说，至今总能找到两个拓扑上不同、却具有相同拓扑不变量的纽结。一个很能说明问题的例子是图 1 中平凡结（0_1）与 Conway结（11_{n34}）的比较：平凡结无法通过光滑形变变为具有 11 个交叉的 Conway结，但二者具有相同的（平凡）亚历山大多项式。

在过去的 $\sim$10 年里，机器学习（ML）已成为学习复杂模式和解决分类任务的理想工具。为此，机器学习模型从带标签数据 $X^{(j)} = \{x_1, ..., x_i\}$， $y^{(j)}$ 中学习函数 f，使得 f: $X^{(j)} \to y^{(j)}$。因此，机器学习技术适用于纽结理论中的问题，并且在分类和猜想生成方面均已取得了一些初步成果 [7–11]。

除了根据嵌入对纽结进行分类这一数学挑战之外，生物物理系统中的纽结（例如 DNA、蛋白质、聚合物或场）还具有额外的物理约束，这些约束通过打结对象的特定几何嵌入体现出来 [12, 13]。重要的是，一些几何特征（如蛋白质折叠）对这类生物物理分子的功能至关重要 [14]。因此，一个耐人寻味的猜想是：物理嵌入具有某些性质，而这些性质反映了对象的底层拓扑。我们希望能够发现一些量，将对功能至关重要的几何特征与打结的生物和物理物质中具有结构信息的拓扑基序联系起来 [14]。

受这一想法启发，数篇论文提出了机器学习模型，利用几何特征分析多边形纽结的嵌入，例如离散化线段的坐标以及其他通过几何推断得出的测量值



玩具示例：纽结分类中的捷径学习

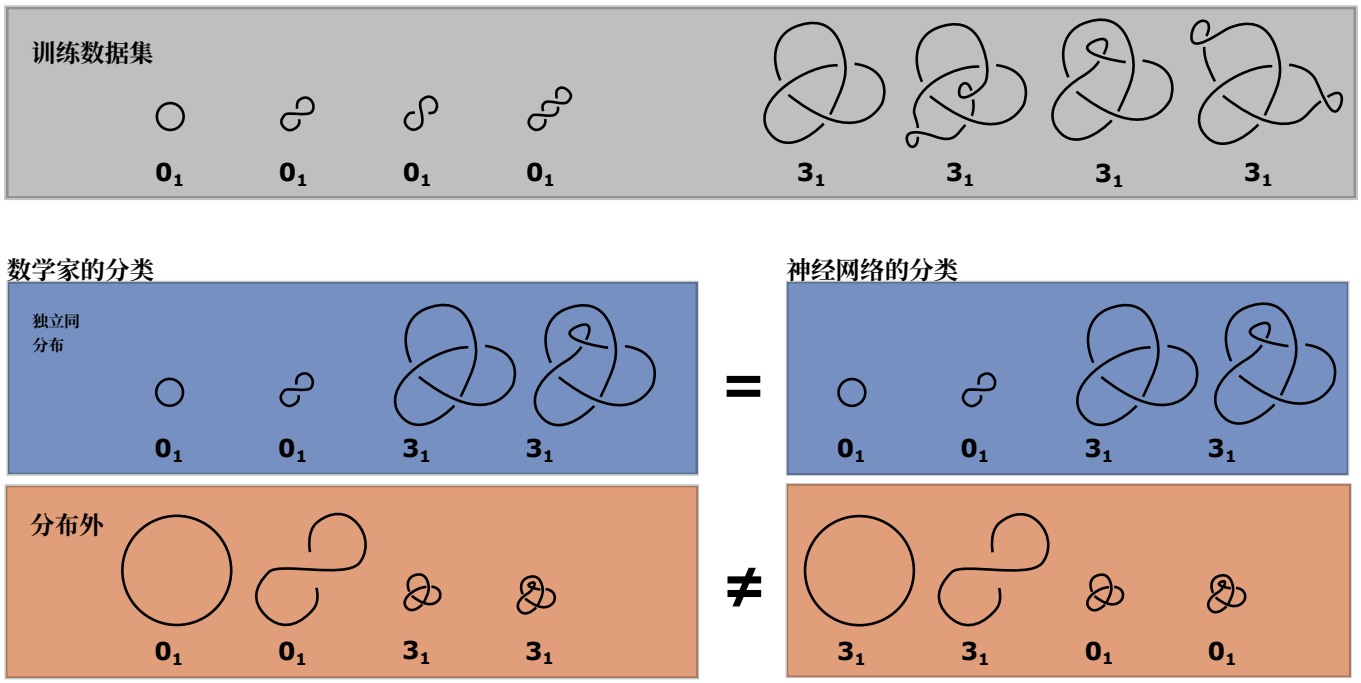


图 1：**纽结拓扑中的捷径学习**。A.) 平凡结（0_1）和 Conway结（11_{34}）具有相同的（平凡）亚历山大多项式，但二者无法相互变形。B.) 神经网络示意图：以纽结嵌入的坐标为输入，输出平凡结与三叶结（0_1 vs. 3_1）的二元分类结果。C.) 纽结嵌入的构象景观示例。这里的两个主要方向是“大小”和“扭缠数”，即曲线自交叉的多少。分子动力学模拟在本质上会使采样偏向自由能较低的嵌入，因此生成的纽结构象在几何性质上的分布较为狭窄。D.) 训练数据集示例，其中机器学习基于嵌入的大小采取了显而易见的捷径。数据集中的所有平凡纽结（0_1）都比三叶结（3_1）小。当机器学习模型面对较大的 0_1 和较小的 3_1 时，就会导致错误分类。图示布局灵感来自 [20]。

例如曲率和局部拧数 [15–19]。尽管这些特征并非拓扑不变，监督机器学习模型似乎还是成功完成了纽结分类任务（准确率达 $> 99\%$），进而引发了这样一个问题：机器学习模型是否正在从这些非拓扑几何特征中的代数模式“学习”拓扑不变量。

这些尝试背后的理念是，曲线的拓扑与其嵌入的几何性质之间存在许多已知联系。例如，法里-米尔诺定理指出，若某个嵌入的总曲率小于 4π，则该曲线必定是平凡结 [14], ，这便是利用几何为拓扑提供一个（较弱的）界限。另一个例子是怀特-富勒-C˘阿卢加雷努定理，

$$\mathrm{Lk}(K) = \mathrm{Wr}(K) + \mathrm{Tw}(K) \tag{1}$$

指出（带框架的）纽结的扭缠数（Wr）与扭转（Tw）之和——二者都会受到环境同痕的影响——构成一个形式上的拓扑不变量，不受光滑变形和Reidemeister变换影响。最后，一个更

拓扑与几何密切相关的一个生物学实例，是DNA纽结在凝胶电泳过程中穿过多孔结构的情形 [21]。打结的DNA在凝胶中的移动速度取决于分子在空间中占据的体积，而该体积本身又取决于DNA的拓扑 [21–25]。同样，依赖于嵌入的几何度量（如空间扭缠数）已被证明与物理上真实的系综中的拓扑不变量相关 [26]。

受这些结果的启发，我们旨在评估用于多边形纽结分类的机器学习模型的表现，并从捷径学习的角度分析其性能。捷径学习是指监督式机器学习模型获取训练数据集中不希望出现的特征，并将这些特征与标签关联起来，以完成分类任务的过程。这一过程的极端例子包括：神经网络根据背景中的绿色山丘对牛的图像进行分类 [27] ，或根据动物的纹理错误地对其图像进行分类 [28]。然而，捷径学习也可能更为微妙；正如本文所示，它可能导致不准确的解读，而这些解读反过来又能为理解受能量约束的生物系统中的拓扑分类提供有益启示。研究拓扑分类中的捷径学习，将增进我们对机器学习在数学和物理学中的应用的理解，并提高构建未来模型的可能性，使其能够基于几何信息学习真正的拓扑信息。

为更好地了解捷径学习是否影响现有机器学习模型，本文考察了经训练以解决简化结分类任务的神经网络：区分平凡纽结（0_1）与选定的非平凡结（3_1, 图 1B）。我们还设计了一种方法，根据输入数据集中的多种几何度量计算互信息分数，以推断可能存在的捷径。我们认为，这种简化设置已足以满足研究目的。具体而言，如果存在捷径学习，那么在区分最简单的非平凡结与平凡结这一层面上就必然已经存在。此设置中可利用的任何非拓扑几何特征，都可能在更高交叉数范围内持续存在，甚至产生叠加效应。我们用于标记潜在捷径的方法无法直接揭示捷径学习过程；不过，它能标记输入数据中可能被模型学习的特征。例如，我们发现，分子动力学（MD）模拟生成的纽结（如文献 [15–19]）具有较高的互信息分数，这很可能是由模拟在弯曲刚度、长度和能量学方面的限制所致；这些限制极大地约束了所探索的几何构象空间。这些约束使输入数据集的构象分布十分狭窄，因而可能产生基于几何景观的拓扑捷径学习（图 1C）。为解决这一问题，本文还介绍了GEOKNOT，这是一个开源软件包，可在用户定义的几何景观区域内采样多边形纽结。我们证明，在分子动力学生成的纽结上具有较高纽结分类准确率的模型，在GEOKNOT生成的数据上表现并不理想，这进一步支持了这些模型中存在捷径学习的观点。

本文结构如下：在第 II 节中，我们定义可在输入数据上计算的方法与可观测量集合，用以诊断它们导致机器学习模型发生“捷径学习”的可能性，并报告本工作所考虑的机器学习模型的细节。在第 II 节中，我们将介绍用于生成输入数据集的算法，既包括 [15–19] 中所规定的分子动力学意义下的算法，也包括借助我们新的纽结采样工具GEOKNOT的算法。在第 III 节中，我们将展示实验结果；简而言之，我们发现，以几何无偏算法采样得到的纽结，无法被此前在几何约束样本上展现出高分类准确率的机器学习模型准确分类。我们认为，最初基于分子动力学训练的模型进行的是一种捷径学习，其依据是纽结的几何特征，而这些特征在分布外设置中与底层拓扑并无关联。最后，在第 IV 节中，我们总结研究发现，并提出未来方向，以推动学界更好地训练机器学习模型在几何设定中“学习”拓扑不变量。

我们强调，本研究并未声称机器学习模型无法学习纽结拓扑；相反，我们探讨了数据采样的重要性，并发现，多边形纽结分类中常用的方法会内在地使几何特征相关联，而这些特征本身并非拓扑不变。因此，我们的目的不是否定先前的研究结果，而是厘清在特定情境下表现强大的几何探针与真正的拓扑分类之间的区别，并增进对这一领域机器学习可解释性的理解。

II. 方法

在本研究中，我们将每个数据点 x视为单个多边形结嵌入（例如 $\mathbb{R}^3$中一条离散化的、闭合的、不相交的曲线）。每个数据点都附有一个标签 y ，用于编码拓扑，即“纽结类别”（在本研究中为 0_1 或 3_1 ）。随后，我们的机器学习模型将在几何输入上训练；该分类任务本质上可以通过两种方式求解：（i）模型学习对数据进行代数运算，以找到一种环境同痕不变量度量，或一条“拓扑忠实”的决策规则；或者，（ii）模型基于数据集中未能在所有纽结类别上充分体现的特征来完成分类任务。例如，如果多项式曲线在三维空间中所占尺寸对平凡结曲线系统性地大于非平凡结曲线，机器学习模型就很容易学会对纽结进行分类（见图1D）。在这种

情况下，虽然该模型很容易达到很高的分类准确率，但它并没有学到关于这些曲线拓扑的任何内容，因为纽结的三维尺寸在环境同痕下并非不变量。相反，它学到的只是标签 y 与输入曲线几何尺寸之间的简单相关性。

通过使用与标签相关、但在概念上没有意义的特征来学习解决分类任务，这被称为捷径学习。在纽结分类这一具体情形中，我们将任何几何泛函 $\phi(x)$称为捷径，因为它并非用于度量拓扑，因此不具备环境同痕不变性。然而，这种几何泛函 $\phi(x)$仍可能与纽结类型存在统计相关性，因此模型可能会利用它进行捷径学习。

在此类数据上训练的模型很可能取得较高的分布内分类准确率，从而造成一种错误的假象，让人以为机器学习网络严格意义上“学会了拓扑”。重要的是，捷径依赖是模型与相应数据集交互作用的一种属性；同一架构是否依赖捷径，取决于数据集中是否存在可利用的捷径。

由于机器学习模型具有“黑箱”特性，通常很难检验捷径学习。因此，我们通过在数据集层面引入一种诊断工具，即“捷径”探针，来评估那些在纽结分类任务中表现出高准确率的机器学习模型。这种探针旨在识别与标签高度相关、但不具备环境同痕不变性的特征，因此这些特征可能导致捷径学习。

捷径探针的构造如下：给定一个表示映射 $r(x)$（例如多边形线段的三维坐标）以及一组几何泛函 $\Phi = \{\phi_j\}_{j=1}^{k}$（其中 k 为不同泛函的数量，见下一节），我们计算数据集中每个几何泛函 ϕ_j 与标签 y 之间的互信息。如果互信息较大，那么 ϕ_j 与标签高度相关。

这种方法常用于机器学习中的特征工程 [29], ，但我们在此将其用于检测捷径学习。我们强调，这一过程有意采取保守策略：互信息得分高并不能证明模型会利用该特征进行学习，得分低也不能排除存在其他更复杂的捷径；相反，这一过程旨在识别出在给定数据集中足以支持正类分类的几何可观测量。

拓扑分类中捷径学习的诊断探针

为了诊断拓扑分类任务中的几何捷径学习，我们设计了一些量，用于检测可能与纽结拓扑相关的纯几何特征。我们提出以下“捷径探针”算法：

算法 1 捷径探针

要求：数据集 $D = \{x^{(i)}, y^{(i)}\}_{i=1}^{n}$**，每个** x **的表示** $r(x)$**，特征泛函集合** $\Phi = \{\phi_j\}_{j=1}^{k}$。**1:** $\mathcal{R} \leftarrow \varnothing$**2: 对于** $x, y \in D$ **，执行 3:** $z \leftarrow r(x)$ **4: 对于** $\phi_j \in \Phi$ **，执行 5:** $v_j \leftarrow v_j \cup \phi_j(z)$ **6: 结束循环 7: 结束循环 8: 对于** $j \in (1, k)$**，执行 9:** $s_j \leftarrow I(v_j, y)$ **10:** $\mathcal{R} \leftarrow \mathcal{R} \cup \{(\phi_j, s_j)\}$**11: 结束循环 返回** $\mathcal{R}$

算法 1 返回数据集中给定数据点的探针；随后，互信息计算如下：

$$I(X;Y) = \sum_{y \in Y} \sum_{x \in X} p(x,y) \log \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}\,, \tag{2}$$

它提供了一种度量，用于确定给定 X 时，标签 Y 的不确定性。换言之，捷径探针算法中的 $I(v_j; y)$ 量化了不同几何量（通过泛函 ϕ_j计算）可能被用于解决分类任务的可能性。

在实际应用中，为了计算连续变量 X 与离散变量 Y之间的互信息，我们采用 Scikit-learn [30] 中现成的方法。这些方法基于由 k近邻距离 [31, 32]进行的熵估计，属于非参数方法。为了在纽结分类任务中使用这一探针，我们选择了多种泛函

($\Phi = \{\phi_j\}$)，用于捕捉多边形曲线的几何性质，例如多边形纽结中线段之间成对距离矩阵 M_{ij}的变化、空间扭度总和以及多边形曲率。此外，我们还考虑了标量值，例如成对距离矩阵之和 (Σ_+)，以及在不同容差下的最大值之和 n，在 M_{ij} (Π_n) 范围内。我们在表 I 中总结并定义了本研究使用的泛函。

$\phi_j(\boldsymbol{x})$	定义（关于 $\boldsymbol{x}$）
$\boldsymbol{\Sigma}_+$	$\sum_{i,j} \lvert\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\rvert$
$\boldsymbol{\Omega}_+$	$\sum_{i,j} (d\boldsymbol{x}_i \times d\boldsymbol{x}_j) \cdot (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j)/\lvert\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\rvert^3)$
$\boldsymbol{\kappa}_+$	$\sum_i \arccos((\boldsymbol{x}_i \cdot \boldsymbol{x}_{i+1})/(\lvert\boldsymbol{x}_i\rvert\lvert\boldsymbol{x}_{i+1}\rvert))$
$\mathbf{M}$	$\mathrm{Max}(\lvert\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\rvert)$
$\boldsymbol{\Pi}_n$	$\sum_{i,j} \pi_{ij}, \pi_{ij} \in M_{ij}\rvert$ 连通分量 $> n$

表 I：用于识别潜在捷径学习的泛函（ϕ_j）。这里，$\boldsymbol{x}_i = r(x_i)$表示多边形纽结中顶点 i 的三维坐标。从上到下：$\boldsymbol{\Sigma}_+$ 是线段成对距离之和，$\boldsymbol{\Omega}$+ 是总扭度，$\boldsymbol{\kappa}_+$ 是总曲率，$\mathbf{M}$ 是最大的成对距离，而 $\boldsymbol{\Pi}_n$ 是成对距离矩阵中峰值的数量，其中峰值高于容差 n。

根据捷径探针的计算，自然可以定义“捷径指数” τ：通过比较使用原始特征训练的机器学习模型与仅使用探针标记出的捷径特征训练的机器学习模型来计算。捷径指数用于量化模型利用这些特定捷径探针解决纽结分类任务的可能性。为了实际计算 τ，我们将捷径探针得分较高的特征作为模型输入，而不是使用坐标数据和/或其他输入。将这些模型的准确率 m_a 与使用未经变换的数据训练的模型的准确率 m进行比较，随后将 τ 定义为两者的比值 m_a/m。重要的是，计算 τ 时采用固定的架构和训练设置，使得 m 与 m_a 仅在所用输入数据的特征空间上有所不同。 τ 的这一定义使我们能够量化几何特征在多大程度上足以解释模型性能的很大一部分，并以此作为捷径学习的迹象。

机器学习模型架构、训练与测试的详细信息

我们使用 PyTorch [33]中的简单前馈神经网络训练模型。除非另有说明，模型均由 4 层组成，每层有 320 个神经元；数据经必要的展平处理后传入网络。例如，对于基于坐标的数据，按坐标展平，使结构为 x_1，y_1，z_1，x_2，.....，z_n；矩阵也遵循类似逻辑，按行展平。此外，我们通过减去每个构型的质心使其居中，并对尺度进行归一化，以避免绝对位置和整体尺度产生误导性线索。使用 Adam 优化 [34] 以确保训练效果最佳，并采用 10^{-3} 学习率。分类交叉熵损失可在训练过程中准确评估模型。最后，模型权重采用标准 He 初始化 [35]。我们选择一致且简单的模型，以复现参考文献 [17], 报告的结果；该研究发现，这种架构能够以 95% 的准确率准确分类多达 250 种不同的纽结类型。可以认为，如果简单的前馈神经网络模型仅凭捷径特征就能达到较高准确率，那么使用类似方式生成的数据集（如参考文献 [15–19]所述）训练的复杂架构也应具备利用相同捷径的能力。因此，捷径指数 τ 为使用给定数据训练的复杂模型对捷径的依赖程度提供了一个保守的下限。

数据集创建与主要输入表示

在本实验中，相较于以往的研究，我们考虑一个简化的分类任务。具体而言，我们将数据集限制为由平凡结（0_1）和三叶结（3_1）构成的集合。我们认为，这一简化任务足以展示捷径学习在通用纽结分类任务中的潜力。我们创建的数据集包含至少 1000 个不同嵌入，分别对应这两种纽结类别。为确保可复现性，两个数据集均使用选定的随机种子进行打乱，并在所有训练实例中采用 [训练集 : 验证集 : 测试集] 划分比例 [0.8 : 0.05 : 0.15] 。我们主要使用两种输入表示来训练模型：（i）多边形纽结中每条线段的三维坐标数据；（ii）“缠绕矩阵”$\Omega_{\alpha\beta}$，它表示每个多边形纽结离散化后的空间缠绕密度，计算方式如下 [36]:

$$\Omega_{\alpha\beta} = \dot{r}^i(x_\alpha)\dot{r}^k(x_\beta)\epsilon_{ikm}\frac{(r(x_\alpha) - r(x_\beta))^m}{4\pi|r(x_\alpha) - r(x_\beta)|^3} \tag{3}$$

在这项工作中，我们还比较了三个主要数据集，其中两个是使用 LAMMPS 中的分子动力学模拟创建的，另一个则是使用蒙特卡罗算法创建的。

Molecular Dynamics sampling of polygonal knots

目前，已发表的关于纽结机器学习分类的大多数研究都采用了基于分子动力学模拟的通用数据生成策略。此处我们考虑了参考文献 [17] 中的数据集，该数据集通过使用 KnotPlot [37] 初始化所需的多边形纽结，并将其表示为长度为 N 的闭合珠簧链而生成。随后，根据考虑珠子间排除体积、沿链相邻珠子之间的键，以及相邻三珠组之间“角度”势的势能，利用朗之万方程更新每个珠子（顶点）的位置 [17]。这些势能的参数和积分时间步长（$dt = 0.01\tau_{\mathrm{LJ}}$）经过设定，以便始终保持链拓扑 [38]（我们还通过追踪链演化过程中的亚历山大行列式来检查拓扑是否得到保持）。朗之万方程的演化在固定粒子数、体积和温度的条件下，使用 LAMMPS 中的速度 Verlet 格式进行 [17, 39]。每隔 $10^7 dt = 10^5 \tau_{\mathrm{LJ}}$ 保存一次链的构型，便可获得在统计和热力学上无关联、但拓扑相同的曲线构象。

现有研究的主要差异在于物理状态，而非建模原理。文献 [16, 19] 在强球形限域下对完全柔性环进行采样，生成致密的球状构象；而文献 [17, 18]则在无外部限域的条件下生成构型，其中包括链长和温度固定的半柔性与柔性聚合物。然而，所有情况下的数据集均源自参数（链长、刚度、限域、密度）固定且受能量约束势作用的珠簧聚合物模型。在这些模拟中，纽结几何嵌入空间的探索受到能量势的限制，进而使纽结嵌入的几何尺寸 $R_g^2 = (1/N^2)\sum_{ij}^{N}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j)^2$ 以及整体扭缠数 $Wr = \oint_1 \oint_2 (d\boldsymbol{x}_i \times d\boldsymbol{x}_j) \cdot (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j)/|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|^3$ 等指标的分布相对狭窄。换言之，由于这两个特征均受链柔性和链长控制，采用恒粒子数、恒体积、恒温分子动力学模拟进行温度恒定的模拟，会限制可探索的 R_g和 Wr 空间。

作为比较，我们在研究中使用 LAMMPS 在两种不同温度 $T = 1$ （低温）和 $T = 10$ （高温）下采样纽结，以加快对嵌入几何形态的探索。具体而言，当前所有文献 [16–19] 均采用低温 $T = 1$，而高温 $T = 10$ 则用于扩大所采样构象的范围，同时保持纽结拓扑不变。

Biased Monte Carlo sampling of polygonal knots: GEOKNOT

为了创建一个尽可能降低捷径学习风险的数据集，我们开发了自己的马尔可夫链蒙特卡罗采样器，称为“GEOKNOT”。该采样器允许用户对状态空间中的采样范围进行偏置，从而高效采样具有指定几何特征的随机嵌入。值得注意的是，构象的演化是在格点上进行的，因为格结的演化和几何性质计算都比非格点纽结快得多 [40]。具体而言，我们采用 BFACF算法 [41]执行局部拓扑保持移动，确保在每种纽结类型内进行遍历采样 [42]。此外，我们还采用枢轴移动 [43]，以高效地进行非局部几何重排。枢轴移动能够加快几何探索，但代价是无法保持拓扑不变性。为保持拓扑一致性，我们在每次移动后使用 KymoKnot [44]计算亚历山大多项式，以验证各构型的拓扑。随后，我们引入由固定随机种子控制的小幅位移，使纽结脱离格点并生成最终嵌入。由于亚历山大多项式并非唯一的纽结不变量，我们还会对第二和第三阶 Vassiliev 不变量进行辅助检查，以便在每次蒙特卡罗迭代中进一步确认曲线所属的纽结类别。

我们假设，这些不变量的组合足以确保拓扑一致，因为同时具有全部三个不变量的示例极其罕见，在前 10 个交叉的素结（> 250）中并不存在。不过，为尽可能减少误差，我们会随机抽取 GEOKNOT 中一小部分样本的拓扑进行测试：在 KnotPlot [37] 中通过能量最小化来优化构型，使三维构型得以简化，从而仅凭目视检查便足以确定拓扑。

除了这些移动之外，我们还明确地对构型施加偏置，使其探索广泛的几何特征。例如，我们促使全空间扭缠数、平均交叉数和长程缠结在状态空间中呈现宽广而平坦的分布。具体做法是，在提议移动过程中跟踪所有可能的几何特征，并施加一种偏向空白区域的采样偏置；只有能够填充用户指定的某个几何属性区域的候选构型才会被接受。实际上，我们的算法会不断更新偏置，作为传统 Wang-Landau采样器的一种变体 [45]。

因此，GEOKNOT会生成彼此无关联的构象，并能在所需几何方向上呈现可控的宽分布。GEOKNOT 中的每个构型都会经过自避性和拓扑保持验证，并导出为三维坐标序列，可直接用于机器学习流程。完整的算法细节

以及度量定义分别见附录 A 和附录 B。GEOKNOT 的一个局限是：如果用户需要更复杂的纽结类别，采样时间就会变长。例如，由于改变拓扑的枢轴移动被拒绝的可能性更大，采样一个 11交叉纽结会比采样 3交叉纽结的效率更低。此外，多项式不变量的计算开销很大，会成为大规模计算的瓶颈；近期研究探讨了用于计算琼斯多项式的并行算法，这或许有助于解决这一领域的问题 [46]。因此，本研究的数据分析仅考虑平凡结（0_1）与三叶结（3_1）之间的采样。满足空箱要求后，我们便保存相应构型，从而生成至少包含 1000 个无关联构象的数据集。由于该数据集不受能量势和温度的约束，并且旨在对几何空间进行广泛采样，因此预计其产生捷径学习的可能性较低。

III. 结果

机器学习模型无法对 GEOKNOT 数据集进行分类

首先，我们按照第 II 节中的描述生成三个数据集：其中两个通过高温和低温下的分子动力学模拟生成，另一个使用GEOKNOT。三个数据集均由每个纽结类别 1000 个实例组成，并且每个嵌入的多边形长度均为 100 个顶点（示例见图 2A）。随后，我们训练并测试机器学习模型，以使用两种类型的数据表示对这些数据集中的纽结进行分类：嵌入线段的三维坐标（如文献 [15, 18, 19]）和缠绕矩阵表示（如文献 [17]）。

在 LAMMPS 数据集上训练并在 LAMMPS 数据集上测试的模型，取得了此前发表的高准确率：在高温和低温数据集中，超过 99% 的构象都被正确分类。然而，在GEOKNOT 数据集上训练的模型表现不佳（见图 2B-C 中的混淆矩阵），无论输入表示形式如何。

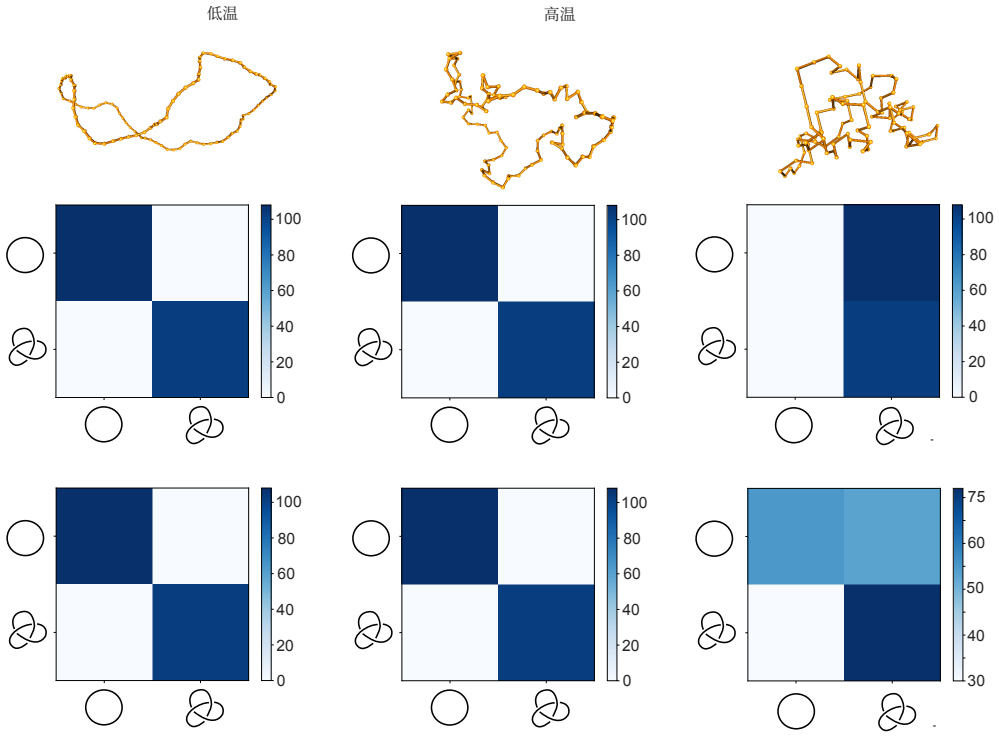


图 2：**机器学习模型无法对 GEOKNOT 数据集进行分类。A** 低温和高温下分子动力学模拟生成的纽结嵌入以及GEOKNOT中的纽结嵌入示例。三个嵌入均包含 100 个节点。使用 KnotPlot [37] 绘制。**B** 分别使用坐标数据作为特征输入、在 $\mathrm{MD}^{\mathrm{Low\ T}}$、$\mathrm{MD}^{\mathrm{High\ T}}$ 和 GEOKNOT 上训练的模型的混淆矩阵。**C** 分别使用缠绕矩阵数据作为特征输入、在 $\mathrm{MD}^{\mathrm{Low\ T}}$、$\mathrm{MD}^{\mathrm{High\ T}}$ 和 GEOKNOT 上训练的模型的混淆矩阵。

最后，在分子动力学数据上训练、随后在GEOKNOT嵌入上测试的模型，分类准确率也较低（坐标训练模型为 $\simeq 50\%$，缠绕矩阵训练模型为 $\simeq 70\%$）。

这些结果表明，GEOKNOT 数据集更难分类，而且通过分子动力学数据集训练的模型难以泛化到其他类型的纽结嵌入。GEOKNOT 数据集的GEOKNOT 可学习性较差，一个显而易见的原因可能是其几何复杂度更高（例如，参见 2A 中的快照）。然而，正如我们将在接下来的章节中讨论的，主要原因在于GEOKNOT 嵌入中缺乏与纽结拓扑强相关的几何特征。

捷径探针检测分子动力学采样纽结中几何嵌入与纽结拓扑之间的相关性

为更好地理解为何在分子动力学模拟纽结上表现出高准确率的机器学习模型，却无法对GEO-KNOT 数据进行分类，我们分析了 (i) 不同数据集中扭缠数等几何量的分布（详情见附录 B），以及 (ii) 几何泛函 ϕ_j 之间的互信息（见算法 1）。

首先，我们观察到，分子动力学生成的数据集在全空间扭缠数、平均交叉数和长程缠结方面呈现较窄的分布（见图 3 左列）。然而，高温分子动力学数据集中的分布范围更广，但两个纽结类别仍明显可分（见图 3 中列）。事实上，尽管高温分子动力学生成的样本具有更宽广的扭缠数值范围，这通常是通过嵌入中的微小短程扰动实现的，例如短扭转，而非长程盘绕。

这一观察表明，分子动力学嵌入仅覆盖状态空间中受几何约束的一部分。事实上，尽管多边形纽结样本的构象在统计上相互独立——这一点可从长于嵌入弛豫时间的时刻观察到——但它们仍只覆盖固定拓扑下所有可能构象中相对较小的区域。

与 MD 生成的数据集相比，GEOKNOT数据集呈现出非常宽泛的几何构象分布。值得注意的是，这些关键几何量的分布在不同纽结类别之间存在显著重叠（见图 3 最右列）。

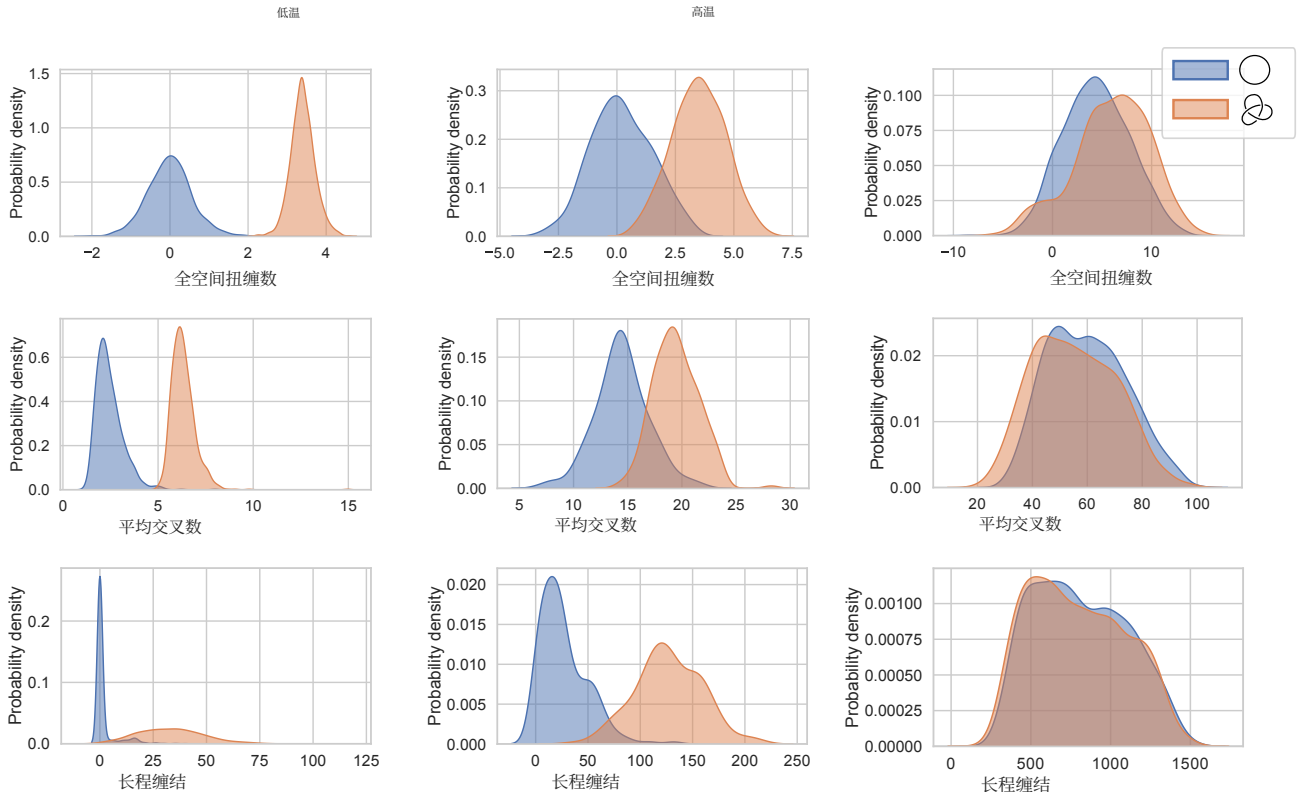


图3：**MD 数据集对几何形状的采样有限。** 平凡结（0_1）和三叶结（3_1）的**A** 总扭度、**B**平均交叉数和**C** 长程缠结的分布。从左至右依次展示低温分子动力学、高温和GEOKNOT 数据集的分布。这些量的定义见附录 B。

为评估几何约束对学习过程的影响，我们随后计算互信息$I(X;\ Y)$（见公式（2））， 其中 X为先前定义的泛函之一（Σ_+，Ω+，κ_+，$\cdots$），而 Y为纽结类型。通过这一计算，我们能够更准确地量化每个几何泛函与纽结类型之间的相关性。该过程的结果汇总于表 II，其中显然可以看出，我们的捷径探针在 MD 数据中标出了若干高度相关的几何特征。

DATA	$\boldsymbol{\Sigma_+}$	$\boldsymbol{\Omega_+}$	$\boldsymbol{\kappa_+}$	M	$\boldsymbol{\Pi_5}$	$\boldsymbol{\Pi_{10}}$	$\boldsymbol{\Pi_{20}}$
分子动力学$^{\text{Low T}}$	0.65	0.69	0.02	0.57	0.083	0.53	0.45
分子动力学$^{\text{High T}}$	0.45	0.47	0.00	0.28	0.25	0.02	0.05
GEOKNOT	0.02	0.03	0.05	0.01	0.02	0.01	0.00

表 II：**互信息揭示了几何特征与纽结类型之间的相关性**。比较低温 MD、高温 MD 和GEOKNOT 数据集在不同几何特征上的互信息 $I(X;Y)$。从左到右依次为：成对距离之和（Σ_+）、总空间扭缠数之和（Ω+）、总曲率（κ_+）、最大成对距离（M），以及在不同容差下成对矩阵上的峰值数量（Π_n, $n = 5$,10, 20）。MD 数据集中的高互信息值反映了几何约束下的构象空间，而嵌入只能探索该空间；这表明存在捷径学习的可能性。

具体而言，成对距离之和 Σ_+、总空间扭缠数 Ω+、最大成对距离 M，以及在不同容差 n,$\Pi_{n=10}$ and $\Pi_{n=20}$下成对矩阵上的峰值（连通分支）数量，均呈现出较强的相关性。相反，在GEOKNOT生成的数据集中，所有受测几何特征的相关性实际上都为零。因此可以得出结论：MD（LAMMPS）采样的数据未涵盖几何上复杂的长程缠结；否则，成对距离之和 Σ_+ 就不会对拓扑分类毫无信息。相比之下，无论采用哪种探测量，GEOKNOT生成的数据集的互信息都非常低，这意味着对纽结几何嵌入空间的采样更加均匀。

神经网络可以利用几何特征，通过捷径学习纽结拓扑

在证明我们的捷径探针与 MD 生成的数据集中的纽结拓扑相关之后，我们现在希望确定机器学习模型能否利用这些相关特征来实现高准确率。具体而言，本节比较了在不同数据集（即 MD（LAMMPS）与GEOKNOT）以及不同输入特征（即曲线坐标、扭缠数和互信息较高的泛函）上训练的模型性能。表 III 汇总了结果，结果表明，神经网络利用了我们先前识别出的捷径探针，根据曲线的几何形状推断纽结标签，而不是学习计算拓扑不变量。这是因为 MD 数据集（包括低温和高温数据集）都呈现出与拓扑高度相关的几何特征，而我们识别出的探针在低温区间尤其相关。事实上，仅使用捷径探针（Σ_+、Ω+、..）训练神经网络，在低温分子动力学数据集中即可达到 99.9% 的分类准确率（见表 III 第三列）。

DATA	坐标准确率	扭缠数准确率	捷径探针准确率	$\boldsymbol{\tau_{\text{coord}}}$	$\boldsymbol{\tau_{\text{wr}}}$
分子动力学 低温	99.9	99.9	99.9	1.00	1.00
分子动力学 High 温度	99.9	96.7	83.1	0.83	0.86
GEOKNOT	49.9	67.2	62.3	-	0.93

表 III：**机器学习分类准确率揭示了捷径学习**。 各类输入数据下模型及其最佳准确率汇总。准确率大幅下降表明，GEOKNOT 模型无法对几何特征分布广泛的曲线拓扑进行分类。“捷径探针准确率”列报告了仅使用我们的算法识别出的捷径探针训练机器学习模型所获得的准确率。请注意，GEOKNOT 数据中省略了 $\boldsymbol{\tau}_{coord}$，因为坐标模型的准确率相当于随机猜测（$\simeq$ 50%），这意味着在这种情况下，τ 无法反映对捷径的依赖。

为了定量衡量神经网络在多大程度上依赖几何探针来正确预测纽结拓扑，我们将“捷径学习指数” $\tau = m_a/m$ 定义为：基于捷径探针训练的机器学习模型所获得的准确率（m_a）与基于未经变换的数据训练的机器学习模型准确率（m）之比。

从表 III 的第 4 列和第 5 列可以看出，在被我们的捷径探针标记为“高度相关”的几何特征上训练机器学习模型，其准确率与在局部缠绕数矩阵和

坐标数据上训练的模型相近，尤其是在低温数据集中。“捷径学习指数”的值 $\tau = m_a/m \simeq 1$ 表明，这些模型很可能通过这些几何特征对拓扑进行“捷径学习”。换言之，这些几何探针足以解释低温分子动力学数据分类，但不足以完全解释较高温度下观察到的高准确率；后者可能利用了更复杂的几何泛函。

最后，为了确定哪些特征对于在分子动力学训练模型中实现高分类准确率最为重要，我们通过将类别得分反向传播到输入数据来进行显著性分析，以识别对预测影响最大的特征。

我们观察到，Ω+，即全空间扭缠数，对低温数据集中分类决策的影响远大于任何其他特征（见图4左）。这再次证明了MD（LAMMPS）数据集中存在受限采样。具体而言，我们将这一结果理解为：分子动力学中大多数采样得到的纽结构象只是相对于理想构象的相当微小的扰动，因而并未在成对距离矩阵中贡献有意义的特征。换言之，涨落大多表现为短尺度扭曲，很少出现在有意义的长度尺度上。事实上，在低温和高温分子动力学状态中，长程缠结分布的高度可分离度量（见图3C）进一步支持了这一论点。

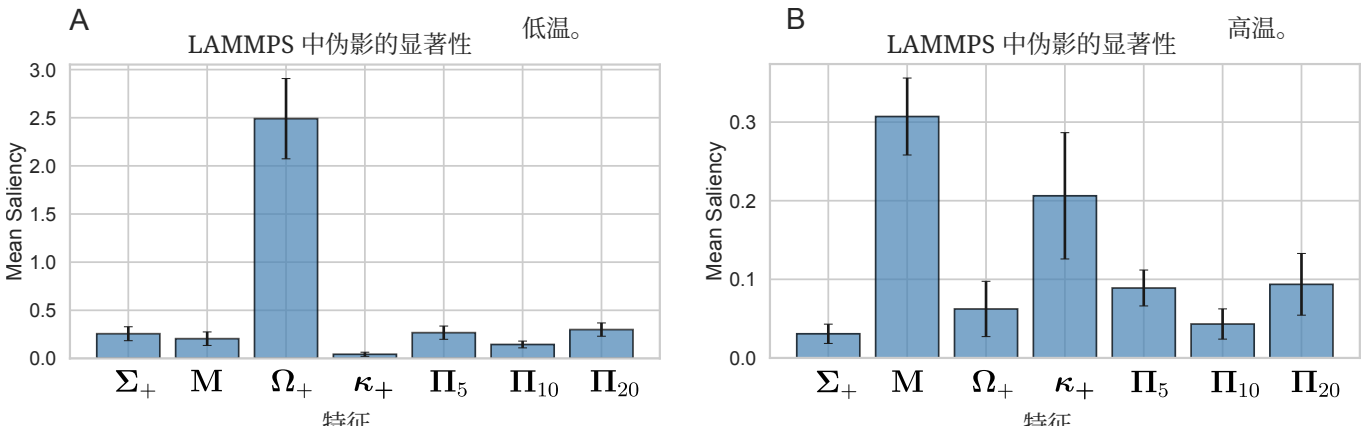


图 4：**显著性分析识别出用于正确分类的关键几何探针**。对使用低温（A）和高温（B）分子动力学（LAMMPS）数据集训练的、基于几何探针的机器学习模型进行显著性分析。在低温下，Ω+ 特征对于正确分类的重要性远超其他特征，这表明全空间扭缠数是一种占主导地位的捷径特征。

拓扑　　保持拓扑不变的形变揭示机器学习模型对几何捷径的依赖　　s

本文及该领域先前研究的核心问题是：机器学习模型能否真正学会并理解特定嵌入的拓扑，而非与之相关的几何特征。有趣的是，如果机器学习模型理解的是拓扑而非几何，那么该模型就应当对环境同痕具有鲁棒性，也就是说，对保持拓扑不变的形变具有鲁棒性。事实上，判断机器学习模型能否学会拓扑，可以转化为检验模型的预测是否在Reidemeister变换下保持不变。

为检验这种不变性，我们对测试样本进行连续形变，并实施所谓的“消融”，在保持拓扑不变的同时修改嵌入。鉴于目前的结果表明，机器学习模型是通过几何隐藏特征进行捷径学习的，我们推测，基于 MD 生成的数据训练的机器学习模型，其预测在测试集连续形变下不会保持不变。

对于测试集，我们使用 KnotPlot [37] 通过最小化对称能量，生成一条连续的嵌入路径 $\{X(s)\}_{s\in[0,1]}$。具体而言，我们从 GEOKNOT 中选取在分子动力学数据集上训练的模型未能正确分类的平凡结样本（预测为 3_1 ）。这些样本往往具有“高复杂度”，也就是说，与分子动力学数据集中的样本相比，它们的全空间扭缠数或交叉数可能显著更高。我们沿着演化路径 $s \in [0,1]$对不同嵌入进行采样，跟踪分类器的响应 $\hat{p}(s) = \mathbb{P}_\theta(0_1 \mid X(s))$，最后绘制预测概率随所选几何泛函 $G(s) = \phi(X(s))$变化的曲线。我们特别关注全空间扭缠数 Ω+ ，因为它是嵌入几何的一种连续且易于解释的全局特征。为确保拓扑一致性，我们通过检查嵌入的亚历山大多项式，确保拓扑在每个时间步都保持不变。

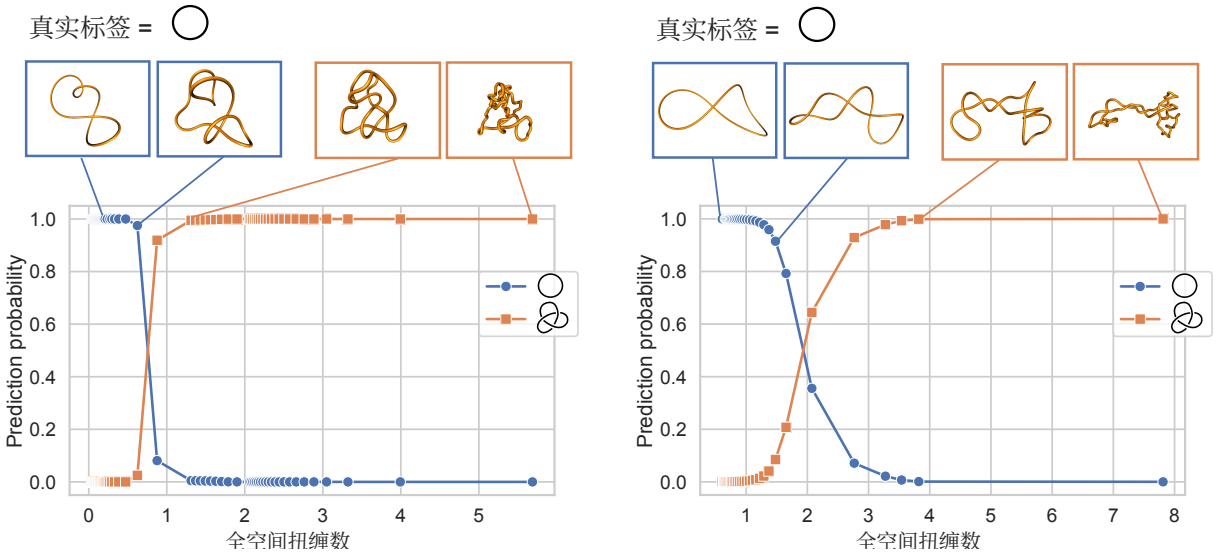


图 5：**机器学习模型的预测不具有环境同痕不变性**。在**A** 和**B** 中，我们展示了两个由GEOKNOT 生成的0_1 嵌入示例，这些嵌入被基于 MD 数据训练的机器学习模型错误分类为 3_1 。使用 KnotPlot 对这些嵌入进行最小化，直到移除所有非拓扑自交。在**A** 中，模型基于 MD 数据的 XYZ 坐标进行训练。在**B** 中，模型基于 MD 数据的缠绕矩阵进行训练。请注意，为了清晰展示，两个图中均提供了平滑后的纽结嵌入图。

在图 5) 中，我们展示了两个来自 GEOKNOT 的曲线示例。由于它们的全空间扭缠数较大，在分子动力学数据集上训练的模型将它们分类为 3_1 。然而，在最小化过程中，这些曲线的扭缠数和自交叉逐渐减少，最终收敛为简单的平凡结。当全空间扭缠数低于 3 时，基于分子动力学数据训练的机器学习模型会切换预测结果；这与模型利用低维几何捷径预测纽结拓扑，而非真正学习拓扑本身的情况一致。

已发表模型存在捷径学习的证据

为了进一步推广本文的主要结果，本节将使用参考文献 [17–19]中已发表的架构和权重来测试已发表模型。

首先，我们使用不同模型测试分子动力学生成的数据集（低温和高温），以验证我们的实现和数据。如表 IV（前两行）所示，所有三个已发表模型对我们的数据集进行分类时，准确率都非常高。还应注意，上述模型的输入表示各不相同：Sleiman 等人训练的模型以“缠绕矩阵”表示作为输入，而 Braghetto 和 Zhang 的模型使用坐标表示进行训练，后者还加入了“键向量”。我们在所有情况下都传入了相应的输入。

在对现有模型的实现进行基准测试后，我们现在测试它们在 GEOKNOT数据集上的表现。如表 IV（最后一行）所示，所有现有模型的表现都不佳。具体而言，Sleiman 等人 [17] 和 Braghetto 等人 [19] 的模型会将输出预测为 5 种纽结类型之一（$0_1, \cdots 5_2$），而 Zhang 等人 [18] 的模型会将纽结类型预测为 8 种中的一种（$0_1, \cdots 6_3$）。有趣的是，各模型取得的实际准确率略高于随机猜测。

因此，我们的结果表明，现有已发表的机器学习模型都存在捷径学习问题，因为它们无法预测那些具有几何结构复杂嵌入、扭缠数较大且存在非局部自交叉的纽结。

GEOKNOT 数据集可通过 Vassiliev 不变量进行拓扑学习

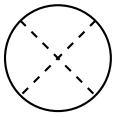
鉴于已有的机器学习模型表现不佳，无法准确对我们的 GEOKNOT 数据集进行分类，我们要探究的是，能否通过坐标数据和缠绕矩阵来学习该数据集。为此，我们现在采用

缠绕矩阵表示，在GEOKNOT 数据上计算 Vassiliev（或有限型）不变量。

Vassiliev 不变量仅凭缠绕矩阵输入即可近似获得。事实上，可以采用微扰三维 Chern-Simons 理论的视角 [47], , 根据一组规则（见附录 C），将这些不变量表示为“费曼图”，最终写成积分表达式。具体而言，第二 Vassiliev 不变量 $\mathcal{I}_{V_2}$ 的积分表达式为

$$\mathcal{I}_{V_2} = \frac{A}{16\pi^2}\int d_{x_1,\ldots,x_4}\epsilon_{ijk}\epsilon_{lmn}\frac{(r(x_1)-r(x_3))^k}{|r(x_1)-r(x_3)|^3}\frac{(r(x_2)-r(x_4))^n}{|r(x_2)-r(x_4)|^3}\dot{r}^i(x_1)\dot{r}^j(x_2)\dot{r}^l(x_3)\dot{r}^m(x_4)$$
$$+\frac{B}{128\pi^3}\int dx_{1,2,3}\int_{\mathbb{R}^3} d^3z\epsilon^{i'j'k'}\epsilon_{ii'i''}\epsilon_{jj'j''}\epsilon_{kk'k''}\frac{(r(x_1)-z)^{i''}}{|r(x_1)-z|^3}\frac{(r(x_2)-z)^{j''}}{|r(x_2)-z|^3}\frac{(r(x_3)-z)^{k''}}{|r(x_3)-z|^3}\dot{r}^i(x_1)\dot{r}^j(x_2)\dot{r}^k(x_3)$$

其中，$r(x_i)$ 是嵌入中线段 x_i 的三维位置。构成缠绕矩阵 Ω（公式 3）的数据，是 Gauss 链接 2-形式的一种离散化、按线段取平均的近似；对矩阵元素进行代数运算，可得到如下图示



$$= \sum_{i<j<k<l}^{N}\Omega[i][k]*\Omega[j][l]$$

其中，$\Omega[i][j]$ 是线段 i 和 j 之间的缠绕值。

我们强调，这并不构成一个建设性的一般性证明，无法证明缠绕矩阵能够确定 Vassiliev 不变量；相反，它支持这样一种观点：可以通过明确的、受图示启发的缩并，从缠绕矩阵中提取低阶有限型信息。

事实上，在GEOKNOT 数据集上运行这一计算，所得数值与第二 Vassiliev 不变量高度相关；对于 0_1 和 3_1 个样本，相关值分别为 -0.07 ± 0.21 和 0.72 ± 0.25，分类准确率接近 100%（$\approx 98.3\%$）（图 6）。

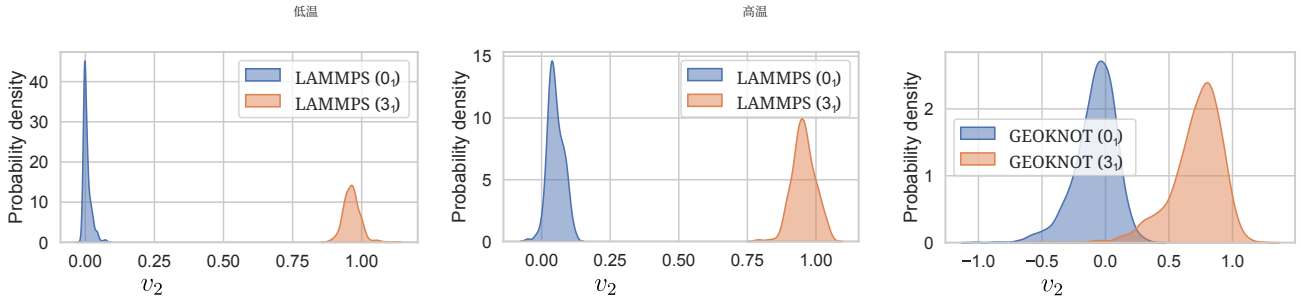


图 6：使用缠绕矩阵数据，根据低温和高温 LAMMPS 与 GEOKNOT 数据集中的缠绕矩阵，近似得到 v_2 。

这表明，缠绕表示编码了非平凡的低阶有限型信息，但标准机器学习模型无法恢复其背后的代数结构，尤其是超出一阶的部分，$\Sigma_{i<j}\Omega[i][j]$。

这种现成的、基于规则的代数计算让我们不禁思考：足够大的机器学习模型最终能否学会重构上述费曼图，进而恢复与拓扑不变量相关的已知图示结构。更令人振奋的是，机器学习模型或许还能学会对给定输入进行新的代数运算，从而产生新的拓扑基序。

模型 表示	**Sleiman 等人** [17] 缠绕矩阵	**Braghetto 等人** [19] 坐标	**Zhang 等人** [18] 坐标和键向量
LAMMPS 低温	100.0	100.0	97.7
LAMMPS $^{\text{High T}}$	96.7	100.0	97.2
GEOKNOT	52.3	31.6	14.4

表 IV：**测试现有机器学习模型对纽结进行分类的表现。机器学习模型在当前文献中报告的分类准确率，与我们的分子动力学（LAMMPS）数据集及 GEOKNOT** 数据集进行对比。

IV. 讨论与结论

本文重新评估了近期机器学习模型根据不同类型的嵌入对复杂纽结进行分类的成功表现 [15–19]。我们发现，有证据表明，所有已发表的机器学习模型以及大多数最新模型都表现出所谓的“捷径学习”：模型学会分类纽结，并非因为它们理解了拓扑，而是因为它们检测到在给定数据集中与纽结拓扑高度相关的几何特征（图 1-2）。

事实上，我们发现，机器学习模型在现有纽结分类任务中取得的惊人准确率（$> 99\%$），仅适用于通过分子动力学（MD）模拟采样纽结嵌入所生成的数据集。我们推测，由于分子动力学模拟中的力场，纽结嵌入采样的构象空间有限，因此其几何特征与底层拓扑高度相关。通过测量若干选定“几何泛函”的分布（见图 3-4），我们证实了这一点：这些分布明显可分，因此是捷径学习的有力候选对象。受此启发，我们提出，在今后该领域的研究中，可使用“捷径几何探针”分析数据集，再用其训练机器学习模型。

为进一步探索这一想法，我们创建了一种新的偏置采样算法 GEOKNOT，能够生成不受几何空间限制的打结构型，因此其扭缠数及其他几何特征的分布范围很广；而由于标准能量势的限制，这些特征在分子动力学模拟中通常受到严格限制。我们发现，当前机器学习模型无法学习这个新数据集，因为它们无法达到此前的准确率。此外，我们发现，在 LAMMPS 数据上训练的模型无法泛化到 GEOKNOT 数据集，这进一步凸显了捷径学习此前已然存在。有趣的是，对 GEOKNOT数据集中误分类的平凡结进行最小化后发现，经分子动力学训练的机器学习模型高度依赖全空间扭缠数，才能正确分类纽结（图 4-5）。

我们强调，本研究的发现并不否定以往研究结果的有效性，而是明确了其适用范围与领域。在受特定能量约束统计规律支配的物理聚合物、蛋白质或丝状链情境中，基于 MD 生成的数据训练、用于识别不同拓扑的机器学习模型，可作为有效且准确的探针。然而，我们认为分子动力学模拟并非生成数据集以训练机器学习模型理解拓扑的最佳方式。具体而言，我们认为基于 MD 数据训练的机器学习模型在测试样本的连续形变下并不保持不变，因此无法编码拓扑不变量。

我们通过表明缠绕矩阵可能编码了足以学习真实拓扑不变量良好近似的信息来结束本研究，然而本文所考虑的机器学习模型尚不足以学习这些不变量。我们希望本研究能助力该领域的未来探索，并加速对新拓扑不变量的机器学习引导的发现。

V. 数据与代码可用性

用于生成所选几何形状纽结的代码以及GEOKNOT 数据集可在以下网址获取:
https://github.com/djordjepmihajlovic/GEOKNOT

VI. 致谢

Djordje Mihajlovic 的工作得到了 UKRI 代数、几何与量子场博士培训中心（AGQ）的支持，资助编号 EP/Y035232/1。Davide Michieletto 感谢英国皇家学会、欧洲研究理事会（资助协议编号 947918，TAP）和 Leverhulme 信托基金提供的资助。作者还感谢 COST 行动 Eutopia（CA17139）的贡献。我们感谢 Tudor Dimofte、Renzo Ricca 和 Alex Klotz 富有启发性的交流。我们感谢 Enzo Orlandini、Marco Baiesi 和 Anna Braghetto 向我们提供他们训练好的模型。为实现开放获取，我们已将知识共享署名许可协议（CCBY）应用于本次投稿所产生的任何作者接受稿版本。

---

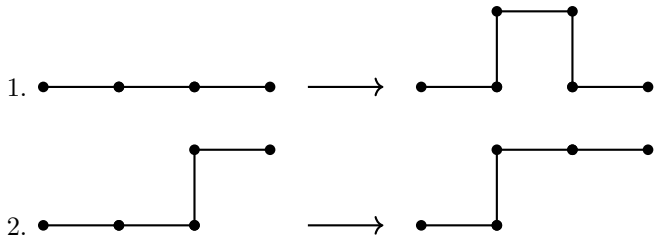
[1] C. C. Adams, *The knot book: an elementary introduction to the mathematical theory of knots*（美国数学学会，2004年）。
[2] J. H. Przytycki, 《纽结理论》的古典根源，《混沌、孤子与分形》**9**，531（1998年）。

[3] V. F. Jones，辫群的 Hecke 代数表示与链环多项式，载于 *New Developments in the Theory of Knots* 1987 20 73 （世界科学出版社，）第 – 页。[4] P. Freyd、D. Yetter、J. Hoste、W. R. Lickorish、K. Millett 和 A. Ocneanu，纽结和链环的一种新多项式不变量，载于 *New Developments In The Theory Of Knots*（世界科学出版社，1990年）第 12–19 页。[5] W. P. Thurston, *The geometry and topology of three-manifolds: With a preface by Steven P. Kerckhoff*，第 27 卷（美国数学学会，2022年）。[6] V. Vassiliev，纽结空间的上同调，《奇点理论及其应用》1，23（1990年）。[7] S. Gukov、J. Halverson、F. Ruehle 和 P. Su **2**, lkowski, 025035 2021 学习解开纽结，《机器学习：科学与技术》（）。[8] A. Davies、P. Veli˘ckovi´c、L. Buesing、S. Blackwell、D. Zheng、N. Toma˘sev、R. Tanburn、P. Battaglia、C. Blundell、A. Juh´asz、M. Lackenby、G. Williamson、D. Hassabis 和 P. Kohli，通过引导人类直觉推进数学研究，《自然》600，70（2021年）。[9] V. Jejjala、A. Kar 和 O. Parrikar，深度学习纽结的双曲体积，《物理快报B》799，135033（2019年）。[10] J. Craven、M. Hughes、V. Jejjala 和 A. Kar，跨维度学习纽结不变量，《SciPost物理学》14，021（2023年）。[11] S. Gukov、J. Halverson、C. Manolescu 和 F. Ruehle，利用机器学习寻找带状纽结，《机器学习：科学与技术》（2023年）。[12] R. L. Ricca 和 X. Liu 编，*Knotted Fields*，《数学讲义》第 2344 卷（施普林格·海德堡，2024年）。[13] A. Stasiak、V. Katritch 和 L. H. Kauffman，*Ideal Knots*，《纽结与万物》第 19 卷（世界科学出版社，1998年），第 414 页。[14] L. Tubiana、G. P. Alexander、A. Barbensi、D. Buck、J. H. Cartwright、M. Chwastyk、M. Cieplak、I. Coluzza、S. ˘Copar、D. J. Craik、M. D. Stefano、R. Everaers、P. F. Fa´ısca、F. Ferrari、A. Giacometti、D. Goundaroulis、E. Haglund、Y.-M. Hou、N. Ilieva、S. E. Jackson 等，以及 S. ˘Zumer，软物质和生物物质中的拓扑，《物理学报告》1075，1（2024年）。[15] O. Vandans、K. Yang、Z. Wu 和 L. Dai，利用机器学习识别聚合物构象的纽结类型，《物理评论E》101，022502（2020年）。[16] A. Braghetto、S. Kundu、M. Baiesi 和 E. Orlandini，机器学习理解打结聚合物，《大分子》56，2899（2023年）。[17] J. L. Sleiman、F. Conforto、Y. A. G. Fosado 和 D. Michieletto，纽结拓扑的几何学习，《软物质》20，71（2024年）。[18] Z. Zhang、Y. Zhu 和 L. Dai，利用机器学习识别并生成打结分子结构，arXiv 预印本 arXiv:2501.12780（2025年）。[19] A. Braghetto、S. Kundu、M. Baiesi 和 E. Orlandini，变分自编码器理解纽结拓扑，《物理评论E》112，025418（2025年）。[20] R. Geirhos、J.-H. Jacobsen、C. Michaelis、R. Zemel、W. Brendel、M. Bethge 和 F. A. Wichmann，深度神经网络中的捷径学习，《自然·机器智能》2，665（2020年）。[21] V. Katritch、J. Bednar、D. Michoud、R. Scharein、J. Dubochet 和 A. Stasiak，纽结的几何与物理学，《自然》384，142（1996年）。[22] J. Arsuaga、M. V´azquez、S. Trigueros、D. W. Sumners 和 J. Roca，受限体积中 DNA 分子的打结概率：噬菌体衣壳中的 DNA 纽结，《美国国家科学院院刊》99，5373（2002年）。[23] S. Trigueros 和 J. Roca，在噬菌体衣壳内通过柯斯质粒环化产生高度打结的 DNA，《BMC生物技术》7，94（2007年）。[24] D. Michieletto、D. Marenduzzo 和 E. Orlandini，DNA 纽结二维凝胶电泳中的拓扑模式，《美国国家科学院院刊》112，E5471（2015年）。[25] A. Vald'es、B. Mart'inez-Garc'ia、J. Segura、S. Dyson、O. D' iaz-Ingelmo 和 J. Roca，通过高分辨率二维凝胶电泳定量揭示 DNA 纽结手性，《核酸研究》47，e29（2019年）。[26] F. Tho mpson、M. Maalouf 和 A. R. Klotz，聚合物纽结的空间缠绕数与特征，《欧洲物理学杂志B》98，89（2025年）。[27] S. Beery、G. Van Horn 和 P. Perona，在未知领域中的识别，载于 *Proceedings of the European conference on computer vision (ECCV)* 2018 456 473 （），第 – 页。[28] R. Geirhos、P. Rubisch、C. Michaelis、M. Bethge、F. A. Wichmann 和 W. Brendel，基于 ImageNet 训练的卷积神经网络偏向纹理；增强形状偏差可提升准确率和鲁棒性，载于 *International conference on learning representations* 2018 （）。[29] J. R. Vergara 和 P. A. Est´evez，基于互信息的特征选择方法综述，《神经计算与应用》24，175（2014年）。[30] F. Pedregosa、G. Varoquaux、A. Gramfort、V. Michel、B. Thirion、O. Grisel、M. Blondel、P. Prettenhofer、R. Weiss、V. Dubourg、*et al.*, Scikit-learn：Python 中的机器学习，《机器学习研究杂志》12，2825（2011年）。[31] B. C. Ross，离散与连续数据集之间的互信息，《公共科学图书馆·综合》9，e87357（2014年）。[32] A. Kraskov、H. St¨ogbauer 和 P. Grassberger，互信息估计，《物理评论E：统计、非线性与软物质物理学》69，066138（2004年）。[33] A. Paszke、S. Gross、F. Massa、A. Lerer、J. Bradbury、G. Chanan、T. Killeen、Z. Lin、N. Gimelshein、L. Antiga、*et al.*，PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库，《神经信息处理系统进展》32（2019年）。[34] D. Kinga、J. B. Adam、*et al.*，一种随机优化方法，载于 *International conference on learning representations (ICLR)* 5 2015 ，第 卷（加利福尼亚；，）。

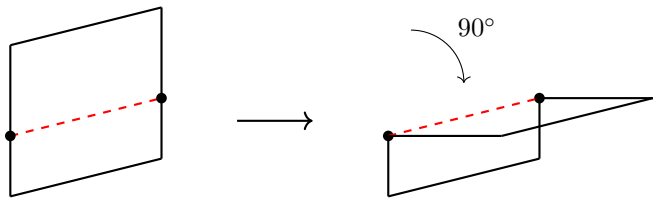
[35] K. He、X. Zhang、S. Ren 和 J. Sun，《深入研究整流器：在 ImageNet 分类任务上超越人类水平的表现》，载于 *Proceedings of the IEEE international conference on computer vision* (2015年)，第1026–1034页。[36] T. Banchoff，《空间多边形的自链接数》，《印第安纳大学数学杂志》**25**，1171（1976年）。[37] R. G. Scharein 和 K. S. Booth，《使用 KnotPlot 进行交互式纽结理论研究》，载于 *Multimedia tools for communicating mathematics*（施普林格，2002年），第277–290页。[38] K. Kremer 和 G. S. Grest，《缠结线性聚合物熔体的动力学：分子动力学模拟》，《化学物理学杂志》**92**，5057（1990年）。[39] S. Plimpton，《短程分子动力学的快速并行算法》，J. Comp. Phys. **117**，1（1995年）。[40] D. Cimasoni，《计算纽结的扭缠数》，《纽结理论及其应用》**10**，387（2001年）。[41] C. A. De Carvalho 和 S. Caracciolo，《一种研究自避随机游走临界性质的新蒙特卡罗方法》，《物理学杂志》**44**，323（1983年）。[42] E. J. van Rensburg，《三维中BFACF算法的遍历性》，《物理学杂志A：数学与通论》**25**，1031（1992年）。[43] N. Madras 和 A. D. Sokal，《枢轴算法：一种高效的自避游走蒙特卡罗方法》，《统计物理学杂志》**50**，109（1988年）。[44] L. Tubiana、G. Polles、E. Orlandini 和 C. Micheletti，《KymoKnot：用于识别和定位线性或环状聚合物轨迹中纽结的网络服务器和软件包》，《欧洲物理学杂志E》**41**，72（2018年）。[45] D. P. Landau、S.-H. Tsai 和 M. Exler，《统计物理学蒙特卡罗模拟的新方法：Wang–Landau采样》，《美国物理学杂志》**72**，1294（2004年）。[46] K. Barkataki 和 E. Panagiotou，《一种用于计算Jones多项式的并行算法》，arXiv预印本 arXiv:2505.23101（2025年）。[47] D. Bar-Natan，《微扰切恩-西蒙斯理论》，《纽结理论及其应用》**4**，503（1995年）。

附录 A：BFACF算法与基于枢轴的纽结采样

为确保充分探索纽结嵌入的几何状态空间，采用马尔可夫链蒙特卡罗方法，使用 BFACF [41] 和枢轴 [43] 算法演化 $\mathbb{Z}^3$ 中的格点纽结。BFACF算法是一种作用于 $\mathbb{Z}^3$ 中一维多边形链的局部蒙特卡罗算法，由以下更新规则之一作用于随机选取的多边形链顶点；



更新移动要被接受，必须满足每次更新后顶点之间不存在交叉，且边仍与至少两个顶点相连；这些条件确保系统的拓扑在更新过程中保持不变。研究表明，BFACF算法对于每个纽结类别都是遍历的 [42], ，这意味着经过足够长的时间，BFACF算法应能探索某个有界$N \times N \times N$ 盒子内某个格结可能的几何构型。不过，目前尚不清楚遍历所有构型需要多长时间；此外，由于该算法只进行局部操作，嵌入多边形需要很长时间才能演化为完全去相关的几何形态（相对于回转半径或其他选定的度量而言）。为加快多边形几何演化，采用枢轴算法实现非局部更新移动。与BFACF算法类似，枢轴算法是一种作用于 $\mathbb{Z}^3$中的一维多边形链的蒙特卡罗算法。更新移动的定义是：随机选取链上两条不相等的边，以随机选取的度绕由所选边之间最短距离定义的轴，对连接这两条边的较大弧进行枢转。



由于更新移动是非局部的，枢轴算法能够高效地探索嵌入的几何空间。然而，枢轴算法无法保持系统的拓扑，因此需要进行平衡

并采用相应方法确保更新后的构型具有一致的拓扑。为此，我们利用 KymoKnot[44] 确定亚历山大多项式以及二阶和三阶 Vassiliev 不变量。为优化探索速度，仅在执行一定次数的枢轴更新移动后检查拓扑；如果发现拓扑不一致，则回滚这些移动。

附录 B：离散多边形情形中的几何特征

在此，我们定义了几何状态空间中的若干状态，并希望使用 GEOKNOT 对其进行探索。文中还列出了从每种特征的分布中采样得到的纽结示例。

a. Pairwise distance

成对距离是 多边形纽结上离散点之间距离的总和 t.

$$D_{polygon} = \sum_{x=0}^{n} \sum_{y=0}^{n} |r(x) - r(y)| \tag{B1}$$

因此，在连续情形下

$$D = \int_x \int_{y>x} |r(x) - r(y)| \tag{B2}$$

b. Long-range entanglement

长程缠结是一个分数，用于追踪扭缠数等度量中出现“非局部”贡献的频率。其计算方法是评估彼此距离在某个（较小）阈值内的多边形顶点数量。这里， $q(x, y)$ 是 x 与 y 之间的索引编号差。此外，对于我们的用途， d_L （距离阈值）和 d_p （序列阈值）分别设为 5 和 10。

$$E_{polygon} = \sum_{x=i}^{p} \sum_{y=i+1}^{p} d(x, y), \text{ where } d(x, y) = \begin{cases} 1 \text{ if } |r(x) - r(y)| < d_L \text{ and} \\ \min(q(x, y), p - q(x, y) < d_p = 1 \\ 0 \text{ otherwise} \end{cases} \tag{B3}$$

c. Total writhe

对于三维空间中的曲线，全空间扭缠数定义如下：

$$\Omega = \frac{1}{4\pi} \oint_x \oint_y \frac{r(x) - r(y) \cdot (dr(x) \times dr(y))}{|r(x) - r(y)|^3} \tag{B4}$$

在格点情形下，为了高效地演化纽结采样，我们采用 [40] 中开发的计算方法；值得注意的是，该方法将计算限制为 4 个投影 $T_K(A_i)$。

$$Wr_{lattice} = \frac{1}{4} \sum_{i}^{4} T_K(A_i) \tag{B5}$$

这里，立方格子的指示曲线将一个半球划分为面积为 $\frac{\pi}{2}$ 的连通分支 A_i ，而 $T_K(A_i)$ 是在投影到 A 后，由所有（带符号的）双重点 v 定义的泰特数，

$$T_K(A) = \sum_{v} s(v), \quad s(v) = \pm 1(\text{sign of crossing}). \tag{B6}$$

为在格子外计算该量，我们采用 Banchoff 在 [36] 中引入的方法。具体而言，对于离散化的多边形纽结，可以利用多边形链顶点上的立体角公式，以高精度计算方程 B7 中给出的核。总之，令 ω_{ij} 表示沿离散化的 x_1 和 x_2 分别方向上， i^{th} 与 j^{th} 分支之间的核元素。定义点 x_1, x_2 为离散化线段 i 的起点和终点，并定义点 x_3, x_4 为 j（即多边形纽结的边）的起点和终点。于是，我们可以定义点 x_l 与 x_m 之间的向量，将其记为 r_{lm}。最后，令

$$n_1 = \frac{r_{13} \times r_{14}}{|r_{13} \times r_{14}|}, \quad n_2 = \frac{r_{14} \times r_{24}}{|r_{14} \times r_{24}|}, \quad n_3 = \frac{r_{24} \times r_{23}}{|r_{24} \times r_{23}|}, \quad n_4 = \frac{r_{23} \times r_{13}}{|r_{23} \times r_{13}|}$$

$$\omega_{ij}^* = \arcsin(n_1 n_2) + \arcsin(n_2 n_3) + \arcsin(n_3 n_4) + \arcsin(n_4 n_1)$$

由此可得

$$\omega_{ij} = \omega_{ij}^* \text{sign}((r_{34} \times r_{12}) r_{13})$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} \omega_{ij} = \Omega$$

d. Average crossing number

平均交叉数 ACN 直接取自对扭缠数进行的无符号计算：

$$ACN = \frac{1}{4\pi} \oint_x \oint_y \left|\left| \frac{(r(x) - r(y)) \cdot (dr(x) \times dr(y))}{|r(x) - r(y)|^3} \right|\right| \tag{B7}$$

因此，在多边形情形下

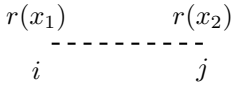
$$\frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} ||\omega_{ij}|| = ACN$$

附录 C：Vassiliev 不变量的费曼规则

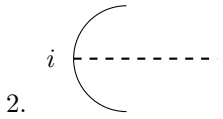
在陈-西蒙斯理论中，图示的外环 X 是威尔逊环，用于测量规范联络沿闭合环路的整体性。在这里，我们可以将其理解为所选纽结经过的路径。具体而言，此处的费曼图是陈-西蒙斯量子场论微扰展开的可视化表示；

$$S_{CS}(A) = \int_{M^3} \text{tr}(A \wedge dA + \frac{2}{3} A \wedge A \wedge A) \tag{C1}$$

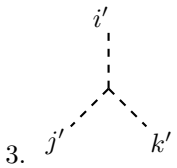
图示 1 表示每个展开中的一个“传播子”，以虚线表示；图示 2 表示传播子在威尔逊环上的入射点。图示 3 表示费曼图中 3 个重合的传播子；有关详细说明，请参见 [47]。

1. 

$= \epsilon_{ikm} \frac{(r(x_1) - r(x_2))^m}{4\pi |r(x_1) - r(x_2)|^3}$

2. 

$= \dot{r}^i(s_n)$

3. 

$= -\frac{1}{6} \int_{\mathbb{R}^3} dz \epsilon^{i'j'k'}$