arXiv:2603.18768v1 [math.GT] 19 Mar 2026

（无色）粘结结与链的分类

Matic Simoni˘c[1],Bo˘stjan Gabrov˘sek[1,2,3],和 Wanda Niemyska[4]

[1]卢布尔雅那大学，数学与物理学院，斯洛文尼亚[2]鲁道尔福沃—新梅斯托科学技术中心，斯洛文尼亚[3]卢布尔雅那大学，教育学院，斯洛文尼亚[4]华沙大学，数学、信息学与力学学院，信息学研究所，波兰电子邮箱：matic.simonic@fmf.uni-lj.si, bostjan.gabrovsek@pef.uni-lj.si, wanda@mimuw.edu.pl

2026年3月20日

摘要

我们系统地分类了奇异数不超过七的无色粘结结。键合结为带有分子内桥（例如二硫键）的闭合蛋白质链提供了一种拓扑模型。遵循结的编目传统，我们描述了一种基于生成平面图、将其转换为带键结图，并结合使用山田多项式与蛮力 Reidemeister 变换来区分拓扑打结类型的程序。

1 引言

生物聚合物中缠结的研究已成为重要的研究领域，因为目前已知蛋白质数据库（PDB）中约有 1% 的条目包含纽结[4] （见图1a）。尽管罕见，打结蛋白质却存在于生命各域的生物体中，凸显了它们在生物学中的根本作用 [14]。经典纽结理论关注闭合环，而生物结构往往包含分子内键——例如二硫键、氢键和盐桥，这些键决定了分子的折叠模式和稳定性 [17]。值得注意的是，若将二硫键纳入考量，约 30% 的蛋白质至少含有一个此类共价键 [15], ，这大幅扩大了可通过粘结缠结分析拓扑类型的生物分子比例。这些键形成了蛋白质中观察到的多种拓扑基元，包括胱氨酸结、由单个键形成的 θ-曲线结构、更复杂的涉及多个键的键合结，以及主链片段穿过由主链和一个键张成的曲面的套索蛋白质（图1）。

空间图为此类粘结构象提供了一种自然的模型。在这一框架中，聚合物主链被表示为空间中的一条曲线，而额外的分子内键则对应于连接链上不同部分的边 [6, 8]。这种视角已被证明有助于研究 DNA重组和蛋白质折叠；在这些研究中，额外键的存在会显著影响分子的整体拓扑。

为了对这些结构建模，我们采用键合结 [6, 1]这一概念。这种方法将蛋白质主链与连接不同残基的化学键区分开来，并将蛋白质的“回路拓扑”概念 [13], （该概念仅描述键的组合排列）扩展至涵盖主链的空间打结。

本文对最多有七个所谓奇点（交叉数加顶点数）的键合结构进行分类，拓展了 Moriuchi 对 θ-曲线（带有一个键的键合结）所做的先前研究，

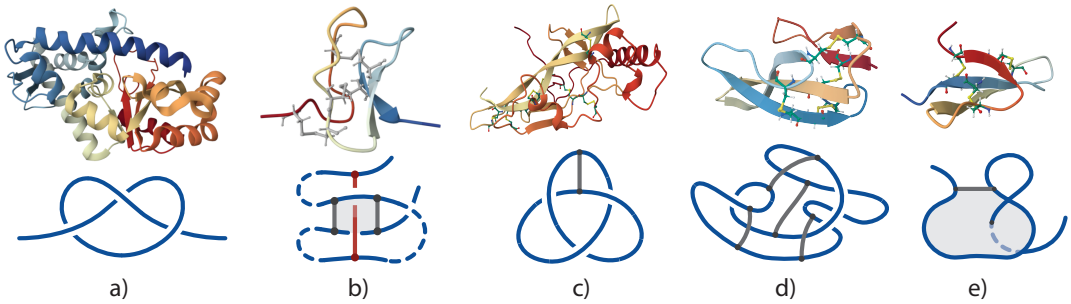


图1：纠缠蛋白质拓扑的典型示例。上：蛋白质结构的带状表示；下：对应的骨架链及分子内键。a）由骨架链形成的经典蛋白质结，b）形成穿孔圆盘的两个桥所构成的胱氨酸基序，c）由一条共价键连接骨架两个片段形成的θ曲线，d）由多条分子内键形成的键合结，以及e）套索蛋白质拓扑，其中骨架片段穿过由骨架和二硫键张成的最小曲面。

他在 [11] 中枚举了最多有七个交叉的 θ 曲线。

2 定义与预备知识

一个打结图（或空间图）是嵌入三维球面 S^3 [12] 中的图。键合结被定义为一对（L，$\mathbf{b}$），其中 L 是嵌入在 S^3 中的纽结，而$\mathbf{b} = \{b_1, b_2, \ldots, b_n\}$ 是一组两两不相交的键（闭区间），它们恰当地嵌入到 $S^3 \setminus L$ 中，其端点位于 L 上；这些键是在 [1] 和 [6] 中独立引入的。在无色情形下，我们不通过着色函数为这些键指定不同的化学类型。相反，我们考虑带有完美匹配的三价图，即存在一个与每个顶点关联的边的子集，且该子集中任意两条边都不共享顶点。键合结及类似的键合结构已在 [9, 6, 10, 8, 5, 3] 中得到研究。

2.1 等价性与 Reidemeister 变换

如果两个键合结环境同胚，则认为它们等价，也就是说，可以通过环境空间的连续变形将一个变为另一个。

从图示上看，这种等价性由图2所示的有限个*Reidemeister* 变换序列生成。对于键合结，这些变换包括标准移动（I、II 和 III），以及处理键与骨架相接处顶点之间相互作用的移动 IV 和 V [12, 6]。Kauffman [12]区分了刚性打结图（不包含移动 V）和拓扑打结图（包含移动 V）。由于刚性结构高度依赖所选的投影，这里我们只关注拓扑情形；由于缺乏现有的不变量，这种情形的研究要困难得多 [12]。

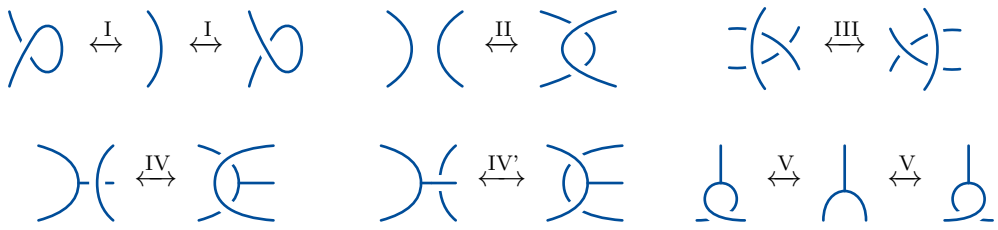


图2：三价打结图的 Reidemeister 变换。

键合结在广义 Reidemeister 变换下的交叉数 $c(K)$，是所有表示 K 的图示中交叉数的最小值。令 $b(K)$ 表示 K的键数 。由于每个键对应一对顶点，我们定义奇异数

$$s(K) = c(K) + 2b(K).$$

本文将奇异数为 s（K） ≤ 7 的（无色）键合结分类 .

键合结可以用平面图（*PD*）记号编码如下。设 K 为图 3 中的一个键合结。我们将各条弧依次编号为 0 至 $n-1$。对于每个顶点（键端点或交叉点），我们按逆时针顺序记录与之相连的弧；若该顶点为交叉点，则从下穿弧开始记录。PD 编码是由两个端点条目以及对应于所有交叉点的条目按顺序组成的列表。图 3 所示图示的 PD 编码为

PD($B(3, 1)_1$) = `V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,4,5,6],X[7,8,3,2],X[8,9,10,5],X[6,10,9,7].`

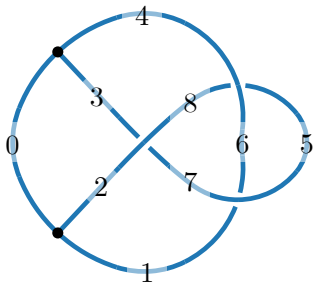


图 3：键合结 $B(3,1)_1$. 的弧编号

3 方法

纽结的编目可追溯至 19 世纪末。Kirkman 和后来 Tait 受 Kelvin 涡旋原子理论的部分启发，开始按交叉数编制纽结表。Tait 列出了交叉数不超过十的交替结，Little 后来又将非交替结纳入这些表中。早期的表并非完全可靠；一个著名的例子是 Perko 对：两个图最初被列为不同的十交叉纽结，后来证明它们实际上表示同一个纽结。

20世纪，始于 Alexander 多项式的结不变量不断发展，为区分这些表格中出现的纽结提供了系统化工具。此后，Conway 记号以及使用 Dowker–Thistlethwaite 编码的计算机方法等进展，使人们能够枚举交叉数大得多的纽结。

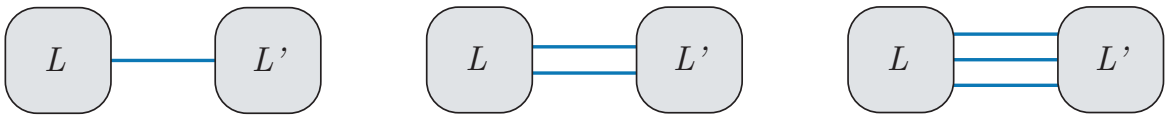
现代结的编目之所以变得更加可行，另一个原因是结补空间的几何结构。根据 Thurston 的研究，结补空间分为三类：环面型、卫星型和双曲型。大多数纽结都是双曲型的，而且可以高效地计算双曲补空间的典范三角剖分。实际上，这为区分交叉数非常大的纽结提供了主要工具之一。

相比之下，空间图（包括带键纽结）通常不具有双曲补空间。因此，经典纽结编目所用的几何工具无法应用。取而代之的是，分类依赖于组合不变量，尤其是山田多项式，并结合对广义 Reidemeister 变换进行穷举搜索，这使编目问题变得困难得多。

我们的编目过程包含多个步骤，将在本节中逐一介绍。所有计算均使用 Python 和 KnotPy [7] 库实现，该库提供了处理纽结和空间图图示、执行 Reidemeister 变换以及计算不变量的工具。分类所用的完整源代码可在 [16] 获取。

空间图的连通和可以通过几种不同的方式形成。按照 Moriuchi[11], 的说法，一阶连通和是通过桥边连接两个图示，从而沿图的分离边进行分解（图 4a）。二阶连通和类似于纽结的经典连通和，即沿骨架的一段弧连接两个图示（图 4b）。最后，Moriuchi 提出了三阶连通和的概念，即在一个三价顶点处连接两个打结图（图 4c）。

本文采用如下约定：如果一个键合结不能分解为一阶或二阶连通和，且分解所得的两个纽结均为非平凡纽结（或平凡纽结），或者均为平凡键合纽结（平凡θ曲线或平凡手铐链环），那么该键合结就是素的。三阶连通和被视为素结，因为它们不具有唯一分解。请注意，Moriuchi [11]将三阶连通和视为非素。



(a) $L\#_1 L'$ (b) $L\#_2 L'$ (c) $L\#_3 L'$

图 4：键合结的连通和。操作 $\#_1, \#_2,$ 和 $\#_3$ 分别对应 Moriuchi [11] 描述的 1 阶、2 阶和 3 阶连通和。

我们用于分类素纽结键合结的步骤如下。

步骤 1：生成。我们首先使用 plantri 软件 [2] 生成所有顶点数不超过 7 的非同构图示。我们选择连通度为 ≥ 1 的图，最小度为 1，最小边数为 $\lceil n/2 \rceil$ （其中 n 表示顶点数）。最大边数设为 $2n$，对应于具有 n 个顶点的 4-正则图的边数。

我们只考虑顶点度为 3 或 4 的图。若某个顶点的度小于 4，则通过对与该顶点相连的边进行平行化，生成额外的图；当所添加的边所连接的任一顶点的度将超过 4 时，停止平行化。在所得图中，4价顶点被解释为交叉，3价顶点被解释为键的端点。这种解释还要求 3价顶点的数量必须为偶数。平行化步骤后不满足这些条件的图均予以舍弃。

这一过程总共生成了 927 个候选图。

步骤 2：转换。将平面图中的每个四价顶点替换为一个交叉（下交叉或上交叉），如图 5 所示，从而生成所有可能的带键结图。由此得到 20019 个候选图示。



图 5：将一个 4 度顶点替换为两种可能的交叉类型。

随后，使用蛮力 Reidemeister 变换简化这些图，并通过 KnotPy 的 simplify 和 canonical 方法将其化为规范形式。规范化会将图示转换为唯一表示，且该表示在图示对称性下保持不变。简化过程系统地执行所有可能的 Reidemeister 变换，并探索不超过固定增加交叉数深度的变换序列，最后返回最简图。在此步骤中，我们选择不进行增加交叉数的变换。最终剩下 1437 个图示规范代表。

步骤 3：不变量计算。对于每个图，我们计算其山田多项式。山田多项式是一种空间图多项式不变量，由 [18], 提出；我们根据该多项式的值对图进行分组。

山田多项式仅出现一次的图会组成单例群，因此根据多项式的不变性，这些图与其他所有图都不同。由此得到 47 个这样的图。其余 1390 个图被划分为 137 组，这些组内图的等价性仍有待确定。

步骤 4：简化。对于同一组中的图，我们使用 KnotPy 的 reduce equivalent diagrams 方法，通过 Reidemeister 变换序列进行穷举比较。该算法同时探索所有输入图的 Reidemeister 变换空间。每当两个图的可达集合相交时，就将相应的图认定为等价，并仅保留一个（最简）代表；否则，该图定义一个不同的等价类。

搜索在 Reidemeister 变换空间中以逐渐增加的交叉数深度进行。

深度 1 后，我们得到 92 个额外的唯一图，剩下 267 个未确定的图，分布在 45 个组中。

深度 2 后，我们得到 13 个额外的唯一图，剩下 128 个未确定的图，分布在 32 个组中。

深度 3 后，我们又得到 2 个唯一图，剩下 100 个未确定的图，分布在 30 个组中。

最后，在深度 3 中纳入飞跃变换（图 6）后，不再有进一步的化简。由于探索深度 4 的计算成本很高，我们对剩余的 30 个组进行人工分析。大多数组由不交并或连通和构成的图组成，一眼便可识别。只有三个组仍需进一步考察，每组

包含两个图。



图 6：一次飞跃变换。虽然一次飞跃变换可以分解为一系列 Reidemeister 变换，但在某些计算中，我们将其视为基本变换。

其中两组由镜像对组成，因此只需详细考察两组。第一组中的两个图示可通过移除连接顶点的键来区分：一种情况下得到霍普夫链环，另一种情况下得到由一个三叶结和一个平凡纽结组成的链环。第二组中的图示在分支数量上有所不同：一个图示有两个分支，另一个则只有一个。

步骤5：移除不可容许图。此时我们得到165个不同的图。首先移除对应于不交并和连通和的图示，剩下103个图示。移除经典结与链环后，还剩下51个带键结图。镜像



(a) 第一等价组　　(b) 第二等价组

图7：剩余的两组（互不等价的）图示具有相同的山田多项式，需要进行人工分析。它们对应于表10和表11中的键合链环 $H(5,1)_1$, $H(5,1)_2$, 和 $L(4,1)_1$, $H(4,1)_1$。

像代表不同的键合结类型，但表格只列出每个镜像对中的一个代表，并标注其为手性或非手性。为高效识别镜像对，首先根据山田多项式将图划分为取值唯一和非唯一的两类。

对于山田多项式唯一的图示，我们计算每个图示的镜像，并分别计算原图示和镜像图示的山田多项式。由于列表包含所有可能的图示，原列表中的每个多项式都会出现在镜像列表中。如果匹配多项式的位置相同，则该图示为非手性；否则，该图示为手性，并删除相应的镜像图示。最终剩下31个不同的图，但由于图8中的图示不是键合结，最终得到30个不同的图。

4 结果

我们通过列表整理得到的键合结，根据底层图的拓扑类型，自然分为三个不同的类别。

键合结。 键合结这一类由如下空间图构成：其底层图不包含简单环，且不是链环（不包含额外的连通分支）。它们代表了键合结的一般情形，我们将这类图示记为

$$B(c,b)_i,$$

其中， c 表示交叉的（最小）数目， b表示键的数目， i表示在具有相同 c 和 b值的键合结中的索引。此类键合结共有20个。

表1中给出了山田多项式和手性，表4中给出了PD编码，图9中绘出了这些图。

粘结手铐链环。 粘结手铐链环这一类由底层图包含一个环（与自身相邻的顶点）的图构成。这些结构是对手铐链环的推广，我们将这些图记为

$$H(c,b)_i,$$

其中， c 同样表示交叉的（最小）数目， b 表示键的数目， i 指定索引。此类键合结共有6个。

与前一种情况一样，表2列出了山田多项式和手性，表5列出了 PD 编码，图10展示了相应的图示。

键合链环。 第三类键合链环由具有额外连通分支的键合图组成。我们将这些图记作

$$L(c,b)_i,$$

其中， c 表示交叉数， b 表示键数， i 表示指标。我们有4个这样的键合链环。

与之前一样，表3包含山田多项式和手性，表6列出了 PD 编码，图11展示了相应的图。

结果总结。 当奇点数不超过7时，共有20个键合结、6个粘结手铐链环和4个键合链环。在这三个类别中，我们确定了7个属于3阶连通和的键合结（以上标 $\#_3$ 标记）。其中有10个非手性键合结和20个手性键合结。山田多项式能够区分除两种情况之外的所有键合结（图7）；这两种情况都是由相同的两个键合结构成的3阶连通和。具体而言， $H(5,1)_1$ 和 $H(5,1)_2$ 这一对，都是 $B(3,1)_1$ 与 $H(2,1)_1$ 的3阶连通和； $L(4,1)_1$ 和 $H(4,1)_1$ 这一对，都是由两个 $H(2,1)_1$ 手铐链环构成的3阶连通和。

我们只得到一个非键合的素三价打结图，也就是说，无法对非环边进行着色，使任意两条键都不相交。这是图8中描绘的（平凡纽结）图。

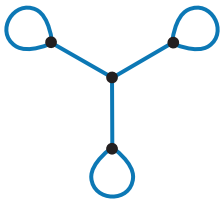


图8：从表格中排除的三价图。

Name	手性	山田
$B(0,\ 1)_1$	非手性	$-A^4-A^3-2A^2-A-1$
$B(0,\ 2)_1$	非手性	$-A^6-2A^4-2A^2-1$
$B(3,\ 1)_1$	手性	$-A^{12}-A^{11}-A^{10}-A^9-A^8-A^6-A^4+1$
$B(4,\ 1)_1$	手性	$A^{15}+A^{12}+A^9+A^7+A^5+A^4+A^2-1$
$B(4,\ 1)_2$	手性	$-A^{15}-A^{14}-A^{13}-A^{12}-A^{11}+A^7+A^5+A^3+A^2+1$
$B(2,\ 2)_1$	非手性	$A^{10}+A^9+A^8+2A^7+2A^5+2A^3+A^2+A+1$
$B(0,3)_1^{\#_3}$	非手性	$-A^8+A^7-3A^6+2A^5-4A^4+2A^3-3A^2+A-1$
$B(5,1)_1$	手性	$A^{17}-A^{16}-2A^{15}+A^{14}-A^{13}+2A^{11}+A^{10}+2A^9+A^7-A^5+A^4+A^3-A^2+A+1$
$B(5,1)_2$	手性	$-A^{18}-A^{17}-A^{16}-A^{15}-A^{14}-A^8-A^6-A^4+A^2+1$
$B(5,1)_3$	手性	$-A^{17}+A^{16}+A^{13}+A^{11}+A^9-A^7-A^6-A^5-2A^4-A^3-A^2-A-1$
$B(5,1)_4$	手性	$A^{18}+A^{15}-A^{13}-A^{11}-2A^{10}-A^8+A^7-A^6-2A^3-1$
$B(5,1)_5$	手性	$-A^{18}-A^{16}-2A^{15}-A^{13}-2A^{12}-A^{10}+A^9+A^7+A^6-A^5-A^2+1$
$B(5,1)_6$	手性	$2A^{17}+A^{16}+2A^{14}+A^{13}+2A^{11}+A^9-A^8-2A^5-A^2+1$
$B(5,1)_7$	手性	$A^{18}-A^{16}+A^{15}-A^{13}+A^{12}-A^{10}-A^8-A^6+2A^4-A^3+A^2+A-1$
$B(5,1)_8$	手性	$A^{16}+A^{15}-2A^{11}-2A^{10}-A^9-2A^8-A^6+A^5+A^2-A-1$
$B(3,2)_1$	手性	$A^{13}-A^9-3A^8-A^7-4A^6-2A^4+A^3+A^2+2$
$B(3,2)_2$	手性	$-A^{13}-A^{11}-A^{10}+A^9-A^8+2A^7-A^6+A^5-A^4-A^3-A^2-A-1$
$B(3,\ 2)_3$	手性	$-A^{13}+A^{12}+A^9-2A^8-3A^6-A^5-2A^4-2A^3-A^2-A-1$
$B(3,2)_4^{\#_3}$	手性	$-A^{14}-A^{12}-A^{11}-A^{10}-2A^8+A^7-2A^6+A^5-A^4+A^2-A+1$
$B(1,\ 3)_1$	非手性	$2A^7-A^6+4A^5-3A^4+3A^3-4A^2+A-2$

表1：键合结及其山田多项式

Name	手性	山田
$H(0,\ 1)_1$	非手性	0
$H(2,\ 1)_1$	非手性	$-A^9-A^8-A^7-A^6+A^3+A^2+A+1$
$H(4,\ 1)_1^{\#_3}$	非手性	$-A^{14}-A^{13}-A^{11}+A^9+A^8+2A^7+A^6+A^5-A^3-A-1$
$H(2,\ 2)_1^{\#_3}$	非手性	$-A^{11}-A^9-A^8-A^6+A^5+A^3+A^2+1$
$H(5,\ 1)_1^{\#_3}$	手性	$A^{17}-A^{15}+A^{14}-A^{13}-A^{12}-A^{10}-A^8-A^5+A^4+A^3+A+1$
$H(5,\ 1)_2^{\#_3}$	手性	$A^{17}-A^{15}+A^{14}-A^{13}-A^{12}-A^{10}-A^8-A^5+A^4+A^3+A+1$

表2：手铐状键合结及其山田多项式

Name	手性	山田
$L(4,\ 1)_1^{\#_3}$	非手性	$-A^{14}-A^{13}-A^{11}+A^9+A^8+2A^7+A^6+A^5-A^3-A-1$
$L(4,\ 1)_2$	手性	$A^{14}+A^{13}+A^{12}+A^{11}+2A^{10}+A^9+2A^8+2A^7+A^6+A^5+A^3+A^2+A+2$
$L(5,\ 1)_1$	手性	$-A^{17}+2A^{15}+3A^{12}+A^{11}+2A^{10}+3A^9+2A^8+2A^7+A^6+2A^5+2A^4-A^3+2A^2-2$
$L(5,\ 1)_2$	手性	$A^{18}+2A^{15}+A^{14}+3A^{12}+2A^{11}+2A^{10}+3A^9+2A^8+2A^7+A^4-2A^3+A^2+A-1$

表3：相连的粘结纽结及其山田多项式

Name	PD 编码
$B(0,1)_1$	`V[0,1,2],V[0,2,1]`
$B(0,\ 2)_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,4,5],V[2,5,3]`
$B(3,1)_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,5,6,7],X[7,8,3,2],X[8,6,5,4]`
$B(4,\ 1)_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,4,5,6],X[7,8,3,2],X[8,9,10,5],X[6,10,9,7]`
$B(4,\ 1)_2$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,5,6,7],X[7,8,3,2],X[8,9,10,4],X[5,10,9,6]`
$B(2,2)_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,5,6],X[2,7,8,3],V[4,9,5],X[9,8,7,6]`
$B(0,\ 3)\ {}^{\#_3}_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,5,6],V[2,7,3],V[4,8,5],V[6,8,7]`
$B(5,\ 1)_1$	`V[0,1,2],X[0,3,4,5],X[1,6,7,8],X[9,10,3,2],X[10,11,12,4],V[5,12,6],X[11,9,8,7]`
$B(5,\ 1)_2$	`V[0,1,2], X[0,3,4,5], V[1,5,6], X[6,7,8,2], X[3,9,10,4], X[7,11,12,8], X[9,12,11,10]`
$B\ (5,\ 1)_3$	`V[0,1,2], X[0,3,4,5], V[1,6,7], X[8,9,3,2], X[10,6,5,4], X[7,10,11,12], X[12,11,9,8]`
$B\ (5,\ 1)_4$	`V[0,1,2], V[0,3,4], X[1,5,6,7], X[8,9,3,2], X[10,11,12,4], X[5,12,11,6], X[7,10,9,8]`
$B(5,\ 1)_5$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,4,5,6],X[7,8,3,2],X[9,10,6,5],X[10,11,12,7],X[8,12,11,9]`
$B(5,1)_6$	`V[0,1,2],X[0,3,4,5],V[1,6,7],X[8,9,3,2],X[10,6,5,4],X[7,11,12,8],X[9,12,11,10]`
$B(5,1)_7$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,5,6,7],X[8,9,3,2],X[9,10,5,4],X[10,11,12,6],X[7,12,11,8]`
$B(5,\ 1)_8$	`V[0,1,2],X[0,3,4,5],X[1,6,7,8],X[8,9,3,2],X[9,10,11,4],V[5,11,12],X[6,12,10,7]`
$B(3,\ 2)_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,5,6],V[2,7,8],X[3,8,9,10],X[10,11,5,4],X[11,9,7,6]`
$B(3,\ 2)_2$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,5,6],X[2,7,8,3],X[4,8,9,10],V[5,10,11],X[11,9,7,6]`
$B(3,\ 2)_3$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,5,6],X[2,7,8,3],V[4,9,5],X[10,11,7,6],X[11,10,9,8]`
$B(3,\ 2)\ {}^{\#_3}_4$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,5,6],V[2,7,3],X[4,8,9,5],X[6,10,11,7],X[8,11,10,9]`
$B(1,\ 3)_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,5,6],X[2,7,8,3],V[4,9,5],V[6,10,7],V[8,10,9]`

表4：键合结的PD编码

Name	PD 编码
$H(0,\ 1)_1$	`V[0,0,1], V[1,2,2]`
$H(2,\ 1)_1$	`V[0,1,2], V[0,3,4], X[1,4,5,6], X[6,5,3,2]`
$H(4,\ 1)\ {}^{\#_3}_1$	`V[0,1,2],X[0,3,4,5],X[1,6,7,8],X[9,4,3,2],V[5,10,6],X[10,9,8,7]`
$H(2,\ 2)\ {}^{\#_3}_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],V[1,5,6],V[2,7,3],X[4,8,9,5],X[6,9,8,7]`
$H(5,1)\ {}^{\#_3}_1$	`V[0,1,2],X[0,3,4,5],X[1,6,7,8],X[9,4,3,2],V[5,10,6],X[11,12,8,7],X[12,11,10,9]`
$H(5,\ 1)\ {}^{\#_3}_2$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,5,6,7],X[7,6,8,2],X[3,8,9,10],X[11,12,5,4],X[12,11,10,9]`

表5：手铐状键合结的 PD 编码

Name	PD 编码
$L(4,\ 1)\ {}^{\#_3}_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,5,6,7],X[7,6,8,2],X[3,8,9,10],X[10,9,5,4]`
$L(4,\ 1)_2$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,5,6,7],X[7,8,9,2],X[3,9,8,10],X[10,6,5,4]`
$L(5,1)_1$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,5,6,7],X[7,8,9,2],X[3,9,10,11],X[11,12,5,4],X[12,10,8,6]`
$L(5,1)_2$	`V[0,1,2],V[0,3,4],X[1,5,6,7],X[8,9,3,2],X[10,6,5,4],X[7,11,12,8],X[9,12,11,10]`

表6：相连的粘结纽结的 PD 编码

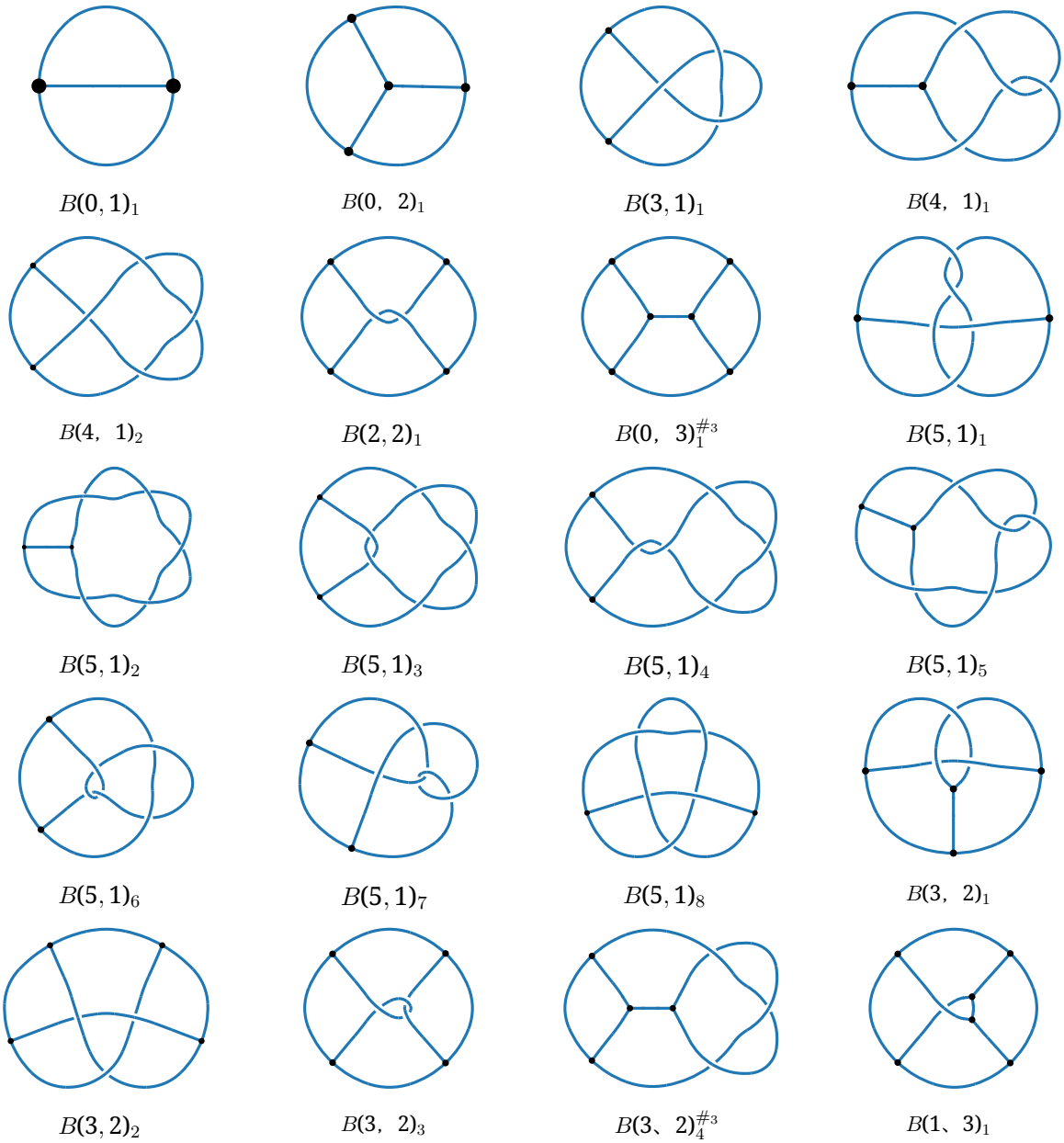
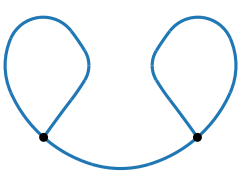
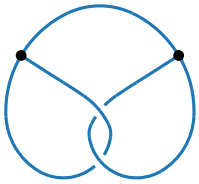


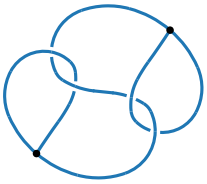
图 9：键合结。每个条目由两行表示：图示和标签。



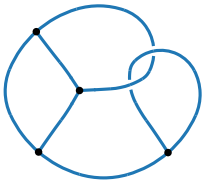
$H(0、1)_1$



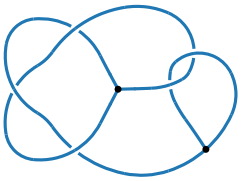
$H(2、1)_1$



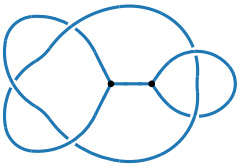
$H(4、1)_1^{\#_3}$



$H(2、2)_1^{\#_3}$

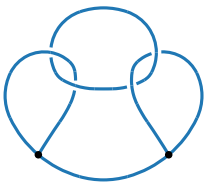


$H(5、1)_1^{\#_3}$

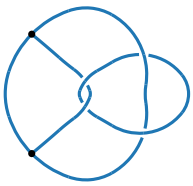


$H(5、1)_2^{\#_3}$

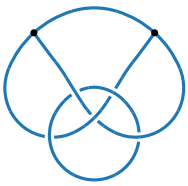
图10：手铐状键合结。每个条目由两行表示：图示及其标签。



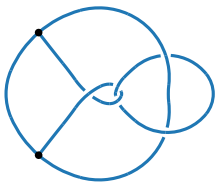
$L(4，1)_1^{\#_3}$



$L(4，1)_2$



$L(5，1)_1$



$L(5，1)_2$

图11：相连的粘结纽结。每个条目由两行表示：图示及其标签。

致谢

B. Gabrovˇsek 获得了斯洛文尼亚研究与创新署资助项目 J1-4031、N1-0278 以及计划 P1-0292 的经费支持。M. Simoniˇc 获得了斯洛文尼亚研究与创新署资助项目 J1-4031 以及计划 P1-0292 的经费支持。作者声明不存在利益冲突。

参考文献

[1] C. Adams、J. Devadoss、M. Elhamdadi 和 A. Mashaghi。蛋白质纽结理论：高斯编码、拟群与 bondle。数学化学杂志，58：1711–1736，2020年。[2] G. Brinkmann、B. McKay 等。《平面图的快速生成》。克拉古耶瓦茨大学，2007年。[3] P. Cavicchioli、B. Gabrovˇsek 和 M. Simoniˇc。带键辫与马尔可夫定理。*arXiv* 预印本 *arXiv:2507.04565*，2025年。[4] P. Dabrowski-Tumanski、P. Rubach、D. Goundaroulis、J. Dorier、P. Sulkowski、K. C. Mil- lett、E. J. Rawdon、A. Stasiak 和 J. I. Sulkowska。KnotProt 2.0：一个收录具有纽结及其他缠结结构的蛋白质的数据库。《核酸研究》，47(D1)：D367–D375，2019年。[5] I. Diamantis、L. H. Kauffman 和 S. Lambropoulou。键合结与带键辫的拓扑学和代数。《数学》，13(20)：3260，2025年。[6] B. Gabrovˇsek。着色带键纽结的不变量。《应用数学研究》，146(3)：586–604，2021年。[7] B. Gabrovˇsek。Knotpy：用于研究纽结、链环和纽结类的 Python 软件包。https: //github.com/bgabrovsek/knotpy，2024年。GitHub 仓库，访问于 2026-03-05。[8] B. Gabrovˇsek 和 M. Simoniˇc。键合结的括号多项式及其在缠结蛋白质中的应用，2025年。[9] D. Goundaroulis、N. G¨ug¨umc¨u、S. Lambropoulou、J. Dorier、A. Stasiak 和 L. Kauffman。利用纽结类和带键纽结类概念建立开纽结蛋白质链的拓扑模型。《聚合物》，9(9)：444，2017年。[10] N. G¨ug¨umc¨u、B. Gabrovsek 和 L. H. Kauffman。带键纽结类的不变量及其在蛋白质折叠中的应用。《对称性》，14(8)：1724，2022年。[11] Hiromasa Moriuchi。对最多含七个交叉的 θ 曲线的枚举。《纽结理论及其应用杂志》，18(02)：167–197，2009年2月。[12] L. H. Kauffman。三维空间中图的不变量。*Transactions of the American Math-ematical Society*，311(2)：697–697，1989年。[13] A. Mashaghi、R. J. van Wijk 和 S. J. Tans。蛋白质和核酸的回路拓扑。《结构》，22(9)：1227–1237，2014年。[14] A. P. Perlinska、M. Sikora 和 J. I. Sulkowska。AlphaFold 告诉我们的有关蛋白质纽结的一切。《分子生物学杂志》，436(19)：168715，2024年。[15] G. Rajpal 和 P. Arvan。第236章——二硫键形成。载于 A. J. Kastin（编），《生物活性肽手册（第二版）》，第1721–1729页。学术出版社，波士顿，第二版，2013年。

[16] M. Simoni˘c 和 B. Gabrov˘sek。有纽结分类，2025年。软件仓库。[17] J. I. Su-lkowska、P. Su-lkowski、P. Szymczak 和 M. Cieplak。纽结对蛋白质的稳定作用。美国国家科学院院刊，105(50)：19714–19719，2008年。[18] S. Yamada。空间图的一个不变量。图论期刊，13(5)：537–551，1989年。