arXiv:2611.30245v1 [cond-mat.soft] 23 Nov 2026

《将纽结嵌入逐步构造到球面图中》

Eren G¨ulmez[1, 2, *] 和 Joost de Graaf[2, †]

[1] *Department of Physics, Middle East Technical University, 06800 Ankara, Türkiye* [2] *Institute for Theoretical Physics, Utrecht University,Princetonplein 5, 3584 CC Utrecht, The Netherlands*（日期：2026年11月24日）

纽结结构广泛存在于软物质和生物学中，拓扑约束会影响弛豫和空间组织。在此，我们提出一种计算构造，通过生长和界面能弛豫，将特定的三维结嵌入映射为嵌入球面上的图。对于交叉数不超过七的素结的标准三维嵌入，我们得到一族基于生长的图，它们通常不同于相应的泰特图。我们进一步发现一条经验性的生长图重构规则，该规则基于结图中具有交替交叉结构的多边形区域。非最简图表明，这些图并非结不变量；而对若干连通和的研究则显示，与其素因子相关的图特征可能仍可辨认。确定这些图在同痕下如何变换，或许能揭示其不变特征；这将留待未来研究。

I. 引言

拓扑约束在软物质与生物物质中发挥着核心作用 [1, 2]。延展物体的嵌入、缠结和连通性会改变可达构型、弛豫路径和集体组织 [1]。纽结和链环结构存在于聚合物 [3], DNA [4], 丝状网络 [5], 涡线 [6],以及受限弹性 [7]或活性材料 [8]中。在这些情形下，拓扑可能影响输运、堆积、力学响应和缺陷组织 [9, 10]。因此，人们开始关注如何将嵌入物体的拓扑与通过局部相互作用和弛豫形成的空间结构联系起来。

从数学上讲，纽结是圆周在三维（3D）空间中的一种嵌入，并且是在环境同痕意义下考察的 S^1 。平面结图记录了一般位置投影，并标明每个交叉处的上下穿越信息。等价图示可通过平面同痕和Reidemeister 变换相互关联 [12]。纽结类型还可以通过代数不变量来研究，包括 Alexander、Jones 和 HOMFLY-PT 多项式 [13–16]。这类不变量功能强大，但并不完备；即，不同的纽结可能具有相同的某个多项式不变量值 [12]。

图论构造在结图与结不变量之间提供了一个中介 [17]。例如，给定带有棋盘格着色的结图，将顶点分配给一种颜色的区域、将边分配给交叉，即可得到平面泰特图；交叉信息可通过边符号加以保留 [18]。结不变量可通过对其关联图的多项式求值来恢复。例如，Thistlethwaite 定理将琼斯多项式在规范化意义下表示为普通图特Tait图的多项式 [19]。该结果后来被推广，以涵盖非交替纽结 [18] 以及嵌入图 [20–22]。此类构造通常与选定的图示相关联，而不是直接与结型相关联。改变投影或棋盘格约定可能会改变该图，而纽结不变性则通过规范化的多项式求值，或通过对应于 Reidemeister 变换的图运算下的等价性得以恢复 [23]。

在这里，我们转而探讨一个问题：图能否直接从三维结嵌入中涌现？为解决这一问题，我们从生物学中汲取灵感，提出一种将纽结映射为图的生长与弛豫过程。从概念上说，我们的方法与几何纽结理论的理念一致；在该理论中，通过最小化绳长等量，将空间实现赋予不同的结型 [24]。紧纽结或理想纽结提供了近似典范的三维代表。此外，它们的自接触集编码了纽结相距较远部分之间的非局部几何关系 [25, 26]。我们的构造有所不同：它并不直接收紧纽结，而是通过生长驱动周围细胞接触网络的形成。

简而言之，我们的生长方法如下：将给定的结嵌入表示为一个沿纵向分段的管状邻域。这些分段称为细胞，并继承纽结的循环次序。每个细胞的体积以恒定速率增长，同时界面能算法对整个细胞划分进行弛豫。我们的方法改编自 Mohammad等人 [27]提出的、用于组织中细胞重排的水平集与拍卖动力学框架。不断生长的并集最终变得紧致且近似球形。固定

初始管状邻域，并施加连通性约束，可在整个生长过程中保持分割后的打结支架，从而确保纽结空间组织的信息会影响外边界上的接触。也就是说，球面被细胞划分，而原始纽结上彼此不相邻的细胞之间的接触可用于定义

* egulmez26@ku.edu.tr
† j.degraaf@uu.nl

由胞元边界构成的曲面网络。

我们将该网络视为有效切线场的骨架。网络价数为 n 的奇点被赋予指标 $q_n = 1 - n/2$，而每个互补曲面区域则根据最小延拓约定赋予一个 $+1$ 指标。对于球面上的连通胞元网络，这种赋值符合欧拉关系 [28]。请注意，我们仅将此作为对提取网络的几何解释。切线场不应被理解为独立模拟的取向场的结果。也就是说，我们的算法并不求解微观向列自由能模型，例如，见参考文献 [29, 30]。该骨架也表示一个属于嵌入纽结的图，而这正是本文将重点讨论的对象。

为了检验我们的方法，我们考察了纽结的三维嵌入；这些嵌入的投影形成标准的最小交叉图示，涵盖交叉数不超过七的十四种非平凡素结以及平凡结。在这个有限目录中，我们得到了两两非同构的基于生长的图。这些结果通常不同于相应的泰特图。然而，对于双股环面结，基于生长的图与棋盘对偶泰特图对中的一个成员一致。我们还在该目录中识别出一种经验性的重建方法，可重建属于最少交叉结图的基于生长的图。该方法依赖于将顶点及其关联边放置在具有交替上下穿越结构的多边形图区域中。我们在正文中给出了这一重建方法的详细规则。

我们观察到，同一个纽结的不同非最简图示可能产生非同构图。因此，当前构造并不能确定一个结不变量。尽管如此，将我们的生长算法和经验性重建技术应用于若干选定的结和时，我们仍能保留其素因子中可辨认的部分。此外，我们还在非最简结和图示中恢复了同痕平凡结的某些元素。这些观察表明，系统地研究基于生长的图如何随同痕而变化是有益的。这可能有助于系统地理解基于生长的图的嵌入之间的关系，并可能揭示新的结不变量。我们将这一更复杂的任务留待未来研究。

本文其余部分安排如下。第II 节介绍分段管状表示和曲面网络构造。第III节说明我们的算法、提取图的方式以及数值选择。第IV 节展示素纽结目录、从平面图示进行的经验图重构、选取的连通和以及非最小图示。第V 节将我们的工作置于相关背景中，并讨论其局限性。最后，我们在第VI节总结全文并简要展望。

II. 构造概念

我们先介绍几何构造，再说明数值算法的具体细节。设 $K \subset \mathbb{R}^3$是某一结型的光滑嵌入代表。取 K 的足够薄的管状邻域，可得一个实心环面 [11]。我们沿纵向将此管划分为 N–1个带标签的区域， C_2、……、 C_N，其标签遵循纽结的循环次序。外部介质记作 C_1。图1 展示了三叶结的这种表示。



图 1. **三叶结的分段管状表示**。黑色曲线是结中心线，透明管体是用于初始化模拟的管状邻域。不同颜色表示按循环顺序排列的结单元。图示的初始化包含 20 个结单元。

在每个生长步中，每个结单元的体积都会增加一个全局固定的增量。随后，整个系统在加权界面能作用下弛豫。由于每个网格点恰好带有一个标签，因此细胞不会重叠。局部重分配规则可防止细胞在远离其现有区域的位置成核。我们确保细胞始终与不可变的管状区域相连，并与其邻居保持接触。随着纽结向外生长、单元聚集体变得更加紧凑，纽结相距较远的部分可能会彼此接触。图2 展示了具有代表性的生长轨迹。经过充分生长后，等体积生长、界面弛豫以及各向同性外部会促成紧凑形状。

在本文报告的有限计算中，外部聚集体边界已足够接近球面，因此可以将细胞嵌入 S^2，见图 3(a)。沿初始纽结连续排列的单元标签被视为属于同一局部链段。因此，我们合并这些表面斑块，仅标记非连续纽结单元之间的接触，见图3(b、c)。所得边界网络将球面划分为更大的细胞域。该网络可被解释为一个有效切线场的分界线骨架，见图 3(d)。价为n 的网络奇点具有指标 $q_n = 1 - n/2$。因此，端点的指标为 $q_1 = +1/2$，正则点的指标为 $q_2 = 0$，三岔结点的指标为 $q_3 = -1/2$，而高阶结点的指标则越来越负。每个互补细胞域在最小延拓中都被赋予一个 $+1$ 奇点。平凡结在其圆形初始化中构成一个退化情形，见第 IV节。除非另有说明，下面的线场解释均应用于

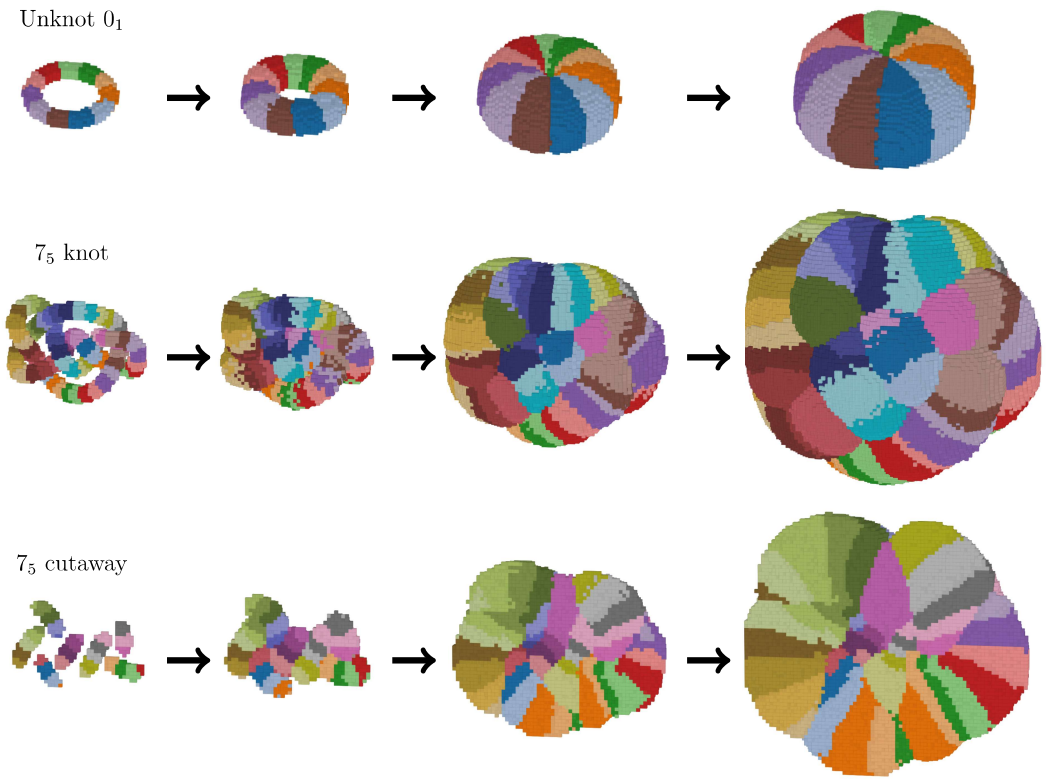


图2。**分段结嵌入的生长与弛豫**。颜色用于标识纽结单元。第一行和第二行分别展示平凡结和 7_5 结的选定阶段。第三行给出了 7_5 结轨迹的剖视图，说明细胞区域在向外部边界扩展的同时，仍与管状支架保持连接。

仅适用于连通胞元网络。最后，边界网络还定义了一个图，该图可以通过立体投影映射到平面上。这定义了我们研究所关注的对象（基于生长的图）。

III. 算法与分析

为获得基于生长的图，我们改进了 Moham- mad 等人 [27]提出的体积约束细胞重排算法。令计算域 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$在规则网格上离散化（通常为 70^3 个点），并令 $\{C_i^k\}_{i=1}^N$ 表示生长-弛豫步骤 k处的带标签划分；在我们的分析中使用 $20 \le N \le 120$和 $20 \le k_{\max} \le 35$。界面通过标签变化进行隐式表示。对于 $i \neq j$，记 $\Gamma_{ij} = \partial C_i \cap \partial C_j$，并赋予对称的界面系数 $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$，其中$\sigma_{ii} = 0$；具体数值将在本节末尾给出。尖锐界面能随后写为

$$E(\{C_i\}) = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \sigma_{ij}\,\mathrm{Area}(\Gamma_{ij}), \tag{1}$$

其中，因子 1/2 可避免重复计数。

在一次弛豫步骤中，每个标签的特征函数$\chi_{C_j^k}$都与高斯热核进行卷积 $G_{\Delta t}$，它取决于时间步长 Δt。标签 i的分配代价为

$$\phi_i^k(x) = \sum_{j=1}^{N} \sigma_{ij}\left(G_{\Delta t} * \chi_{C_j^k}\right)(x). \tag{2}$$

对这些场进行阈值处理，可近似多相曲率驱动运动 [31, 32]。拍卖动力学 [33]施加（离散的）目标体积，而局部化出价则将网格点限制在其当前邻域所表示的标签范围内。通过对边界掩膜之外区域的代价 $\phi_i^k(x)$ 添加强惩罚项，实现定位；该边界掩膜通常具有厚度 $\delta_{\mathrm{mask}} = 2$，并针对细胞 i定义。此掩膜可抑制非局部成核和细胞分裂 [27]。

我们在此基础上补充：在每个生长步，目标体积按以下方式更新

$$V_i^{k+1} = V_i^k + g, \qquad i = 2, \ldots, N; \tag{3}$$

$$V_1^{k+1} = V_1^k - g(N-1), \tag{4}$$

其中，$i = 1$ 像之前一样将背景标记为背景，g 是网格点的整数个数。后者会随着纽结单元的总体增长而缩小相应的量，从而保持系统的总体积不变。更新目标后，我们使用新的目标体积应用局部化拍卖动力学。不过，我们还施加了三项

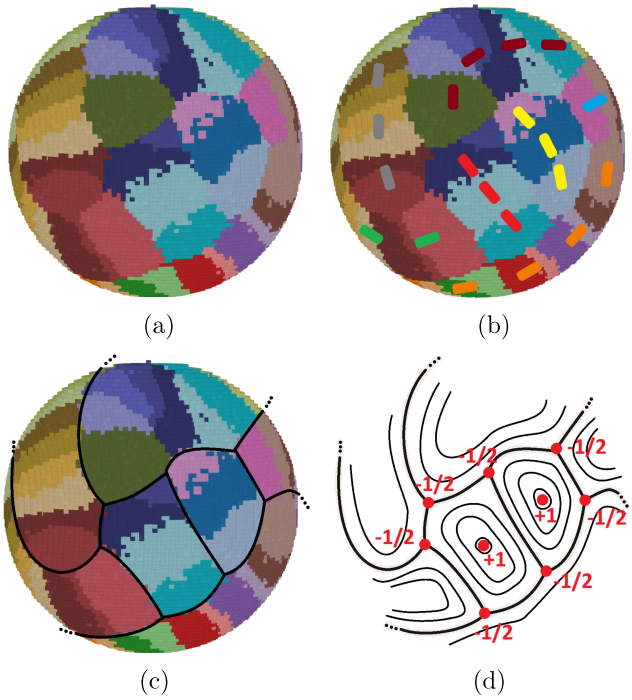


图3. **表面缺陷与球面图**。 (a) 由生长得到的表面胞元划分 7_5 结嵌入，见图 2。(b) 虚线连接表示在初始循环分割中彼此相邻的标签。(c) 根据这种邻接关系合并后，非相邻细胞域之间的边界形成黑色网络。(d) 该网络被解释为线场骨架。三岔结点的指标为 −1/2；根据最小延拓约定，为域内部赋予一个 +1 指标。相应的图嵌入在球面上，并可通过 *via* 立体投影显示在平面上。

额外约束：(i) 每个纽结单元都包含一个从原始管状邻域继承而来的不可变种子区域。(ii) 如果纽结单元标签与其种子断开连接，则拒绝该候选状态。(iii) 如果种子层级循环邻接丢失，也予以拒绝。这些检查确保从嵌入生长到新兴球形胞元聚集体的外表面这一过程中，种子区域中的邻接信息得以保留。

生长后，我们识别出将 C_1 与纽结单元并集分隔开的边界网格点。对于携带纽结标签 i的边界点 x_m ，设集合 I_i 为$I_i = \{i-1、\ i、\ i+1\}$，其中标签按顺序循环排列，取值为 2、……、 N。此外，设 N_m为移除背景标签后，x_m 的 $3\times3\times3$邻域内纽结标签的集合。若$N_m \setminus I_i \neq \varnothing$，则将 x_m 标记为非局部接触网络的一部分。将相连的标记点细化为单网格点骨架，并移除那些仅通过一个端点与网络其余部分相连且包含少于 8 个网格点的分量。剩余网络定义了嵌入在 S^2上的原始图。为明确这种嵌入，采用从聚集体中心指向曲面的径向方向进行投影。细胞域是通过沿纽结连续的标签相连的表面斑块所构成的最大连通并集。

具有各向同性张力的界面能模型通常倾向于形成满足力平衡的三岔结点，而高阶结点在结构上不稳定，且往往会分裂 [34, 35]。这种行为使上述图的构造存在歧义。例如，示意图中呈现一个理想化的价为n的结点 $n > 3$ 的区域，在弛豫后可能会变成由短边连接的三岔结点簇。即使大尺度接触模式保持不变，所得网络的拓扑也可能取决于微小扰动。为解决这一问题，我们在生长算法中执行结点合并正则化，以获得理想化图。

将 $a(N_m)$ 定义为 N_m 中相邻标签对的数量。如果 N_m 不包含所有纽结标签，则循环连接标签块的数量为 $r(N_m) = |N_m| - a(N_m)$。满足 $r(N_m) \geq 3$ 的点是用于正则化的候选交汇点。候选点的最大六连通集合定义为交汇簇 C_α，其质心为 L_α ，附属标签集为

$$\widetilde{N}_\alpha = \bigcup_{x_m \in \mathcal{C}_\alpha} N_m. \tag{5}$$

对于任意两个簇 α 和 β ，若它们之间的距离小于 $d_{\max}$，则在一个簇中存在而另一个簇中不存在的标签，会使赋值场在相对簇的质心处受到吸引性修正，

$$\phi_k^{\mathrm{att}}(x) = \phi_k(x) - A\exp\left[-\frac{|x-L_\beta|^2}{2w^2}\right], \tag{6}$$

~ ~，且 $k \in N_\alpha \setminus N_\beta$。现有的定位和 $d_{\max}$ 的选择确保吸引不会重组主体支架。振幅 A、宽度 w、掩膜厚度、吸引迭代次数以及 $d_{\max}$ 均为数值正则化参数。如果在两条分离曲线之间形成了新的桥，则拒绝该候选状态。由于交汇点吸引算法在边间距较小时会失效，我们通常将距离小于 3 的边折叠，从而得到理想化图。如果理想化图在连续 5 个生长-弛豫步骤中保持不变，则认为其拓扑稳定，并将其确定为结嵌入的图。

我们在所有计算中使用的无量纲界面权重为

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} 0, & i = j, \\ 1.6, & \min(i,j) = 1,\ i \neq j, \\ 0.8, & i,j \geq 2,\ i \neq j,\ i \sim j, \\ 2.7, & i,j \geq 2,\ i \neq j,\ i \not\sim j. \end{cases} \tag{7}$$

其中， $i \sim j$ 表示纽结单元 i 和 j 在循环分割中相邻，包括数对 (2， N)。

相邻纽结单元的较低代价有助于沿支架保持连续性，而非相邻单元的较高代价则可避免不必要的接触。背景纽结值控制外部界面的紧致化，其取值设为中间值。

我们使用灵活的生长参数和时间步长参数，使得初始化为（Δt_0，g_0）=（0.56，28）的数对在纽结胞超过体积阈值时加倍，阈值为 V_i = 170 和 V_i = 530。这些规则经经验确定，可在不损害生长过程平滑性的情况下加快收敛。我们通常在最终球面形成后启动交汇点吸引算法；然而，对于生长过程中可收缩结点变得相距很远的模拟，我们同时使用生长算法与交汇点吸引算法。我们将交汇点吸引参数 w = 5 中的 A 在 2.88×10^{-6} 至 3.2×10^{-6}的范围内变化。我们将 $d_{\max}$ 设为大于网格中的任何长度，但如果模拟产生的候选状态被拒绝，则我们以 $6 \le d_{\max} \le 10$重复该模拟。我们迭代重复拍卖算法，同时在每一步将初始化参数 ε除以5，从10到 10^{-6}。我们的参数选择、三维嵌入、原始图输出以及稳健性研究见本出版物所附的补充材料 [36]。

IV. 结果

我们首先介绍交叉数不超过七个的素结标准最小交叉嵌入图目录。随后，我们根据所考察最小图示中的交替多边形部分，提出一种经验重构方法。我们还考察了选定的连通和，并利用非最简图示探究理想化图的嵌入依赖性。

A. 交叉数不超过七个的素结

图 4 总结了交叉数为 $c \le 7$ 的十四种非平凡素结。在这个目录中，我们为这十四种非平凡素结选取的最小嵌入，产生了彼此不同构的理想化图和缺陷构型。图 4 中的大多数生长图在理想化后都是三顶点连通的，并且同构于由相应凸多面体的顶点和边构成的图 [37]。双股环面纽结 3_1，5_1，和 7_1 是这一规律的例外，因为它们构成的图有两个顶点，且两者之间以多重边相连。因此，除了环面纽结以外，所有生长图都是多面体的，但所有生长图仍然是三边连通的。按照图中采用的棋盘格约定，这些环面纽结的基于生长的图同构于白色泰特图。对于其余纽结，基于生长的图与任一泰特图都不同构。它们也不一定包含任一泰特图作为子图。例如，4_1 纽结的基于生长的图比任一泰特图的顶点都多，而且无法重现它们的平行边结构。

需要指出的是，对完整的三维初始化进行镜像反射，不会改变标量界面能和标签邻接规则。因此，在我们的分析中，一个纽结与其镜像会产生同构的基于生长的图。也就是说，我们的构造无法区分手性（素）结的左右手性。定向球面嵌入或可记录循环顺序的反转，但我们将此留待未来研究。

B. 根据约化交替图示进行经验重构

所有交叉数不超过七个的素结都有约化交替图示 [38]。因此，可以通过简单的图示规则重构基于生长的图。

重构过程如下。令 D 表示沿单位向量 $\hat{z}$对所选空间嵌入进行的有向投影。于是，D^{opp} 表示沿 $-\hat{z}$观察同一嵌入所得到的图示，示例见图5a，其中涉及 6_2 纽结 [39]。在此处采用的绘图约定中，这一操作将平面反射与每个交叉的反转结合起来。当 D 和 D^{opp} 由 $n \ge 3$ 图弧围成的多边形区域中，连续角点处遇到的上下穿越关系以图6所示的方式按循环次序交替时，我们将其称为 n-缠结。

接下来，在每个 n-缠结中放置一个价为n的顶点，并按照图6a 的规则将其与 n 边界弧连接。沿下穿股线，使每条半边穿过其相邻的交叉，如图5b 所示。最后，按照两条投影边界周围的循环次序，将进入 D 和 D^{opp} 外部区域的半边成对配对，如图5c 所示。

上述重建为图 4 目录中可见的两部分结构提供了几何解释。投影中的上跨弧段优先朝向沿该投影方向观察时所见的半球，而从相反方向观察时对应的上跨段则朝向对跖半球。切络图汇集了若干暴露程度相近、构成连接区域的弧。通过投影，将两个半球图示中的对应边识别出来，从而把子网络连接成完整的球面图。4。

从界面动力学定量推导这一重构仍有待解决。不过，很明显，当前的重构并不具有普遍性。最早出现的非交替素纽结有八个交叉，即 8_{19}, 8_{20}, and 8_{21} [38]。它们的最小图示包含一些无法用上述切络规则充分处理的区域。非最简图示和连通和也可能包含相邻的非交替区域。正如我们将要

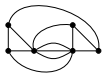
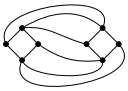
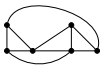
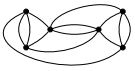
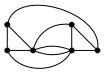
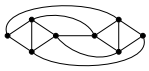
Prime knots	Growth-based graphs and defects: (**index**, multiplicity)	Black Tait graphs	White Tait graphs	Prime knots	Growth-based graphs and defects: (**index**, multiplicity)	Black Tait graphs	White Tait graphs
3_1 	$(+\mathbf{1},3)$, $(-\mathbf{1/2},2)$ 			7_1 	$(+\mathbf{1},7)$, $(-\mathbf{5/2},2)$ 		
4_1 	$(+\mathbf{1},5)$, $(-\mathbf{1/2},6)$ 			7_2 	$(+\mathbf{1},8)$, $(-\mathbf{2},2)$, $(-\mathbf{1/2},4)$ 		
5_1 	$(+\mathbf{1},5)$, $(-\mathbf{3/2},2)$ 			7_4 	$(+\mathbf{1},8)$, $(-\mathbf{1},4)$, $(-\mathbf{1/2},4)$ 		
5_2 	$(+\mathbf{1},6)$, $(-\mathbf{1},2)$, $(-\mathbf{1/2},4)$ 			7_3 	$(+\mathbf{1},9)$, $(-\mathbf{3/2},2)$, $(-\mathbf{1},4)$ 		
6_1 	$(+\mathbf{1},7)$, $(-\mathbf{3/2},2)$, $(-\mathbf{1/2},4)$ 			7_5 	$(+\mathbf{1},9)$, $(-\mathbf{1},6)$, $(-\mathbf{1/2},2)$ 		
6_2	$(+\mathbf{1},7)$, $(-\mathbf{1},2)$, $(-\mathbf{1/2},6)$			7_6	$(+\mathbf{1},9)$, $(-\mathbf{1},4)$, $(-\mathbf{1/2},6)$		
6_3	$(+\mathbf{1},8)$, $(-\mathbf{1},2)$, $(-\mathbf{1/2},8)$			7_7	$(+\mathbf{1},9)$, $(-\mathbf{1},2)$, $(-\mathbf{1/2},10)$		

图4。**交叉数不超过七的素结的基于生长的图**。第一列提供所研究嵌入的标准最小图以及该纽结的亚历山大–布里格斯名称。第二列展示理想化图、价数，以及相关线场中奇点对应的指标。第三列和第四列分别给出黑色和白色Tait图。

在第IVD节看到，对于几个非最简平凡结示例，我们的重构无法再现预期的基于增长的图。

C. 精选连通和

接下来，我们考察一个由 3_1 和 4_1 纽结构成的特定连通和，见图7a。我们的目标是确定，与素因子相关联的特征是否仍能在复合输出中被识别出来。我们首先进行了基于生长的分析，其中保留了用于标识初始支架的哪一部分源自各个素因子的单元标签，并将这些标签传播到提取网络中。利用图示化第IVB节的重建，可以恢复基于生长的图，见图7b。在此，我们使用颜色来区分完全位于与某个素因子相关区域内部的顶点。对于其局部延续沿着该因子的弧的边，我们也使用相应颜色。其余的顶点和边构成一个共享连接体。

为提取与素因子相关的部分，我们移除另一个着色分量，并将共享边并入保留的分量。如果共享顶点在保留网络中的价大于二，我们就保留该顶点；如果其价为二，则将其抑制。图 7b、c 展示了这一过程。请注意，此操作并非子图提取，因为素因子的图不一定会作为字面上的子图出现在和结的基于生长的图中。

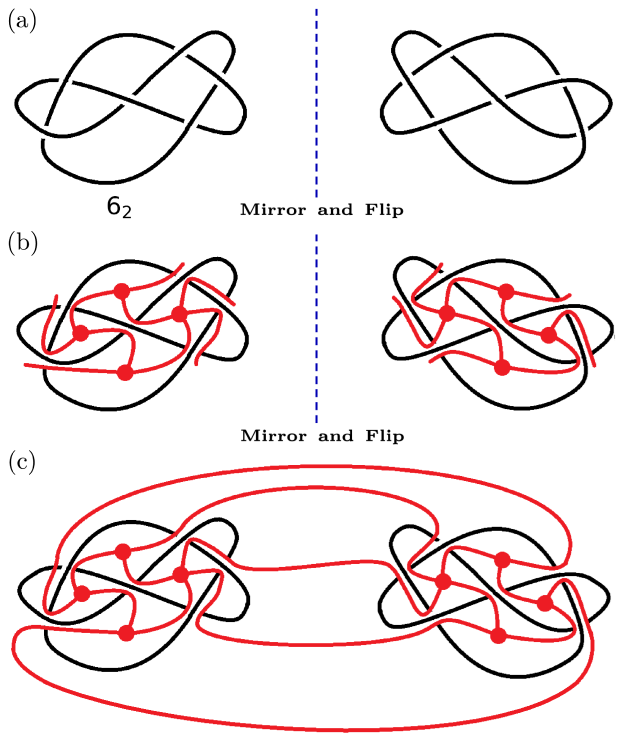


图 5. **基于生长的图的经验性重构。** (a) 构造对向视图图示，(b) 根据图 6a 在缠结中放置顶点，并沿下穿股线穿过交叉延伸半边，(c) 按循环次序将两个视图中的外部半边配对。两个图示内部表示最终球面网络的对向半球；外部配对表示赤道连接。

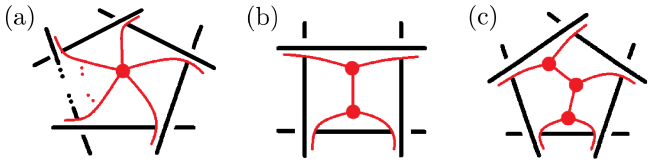


图 6. **用于图示重构的局部模板。** (a) 一个 n-缠结贡献一个价为 n 的顶点。(b,c) 所选连通和中遇到的非交替多边形区域的经验性模板。

方结和奶奶结为检验对相对手性的敏感性提供了一个有用的例子 [38]。方结是一个三叶结与其镜像的连通和，具有反手性；而奶奶结是两个左右手性相同的三叶结的连通和，具有手性。尽管这两个纽结拥有相同的素因子，却产生了不同的基于生长的图，这表明这种构造对和项的相对左右手性敏感。这与在素结中观察到的镜像盲性一致，即例如，整体反射会同时反转所有手性因子的左右手性，因此保留它们的相对

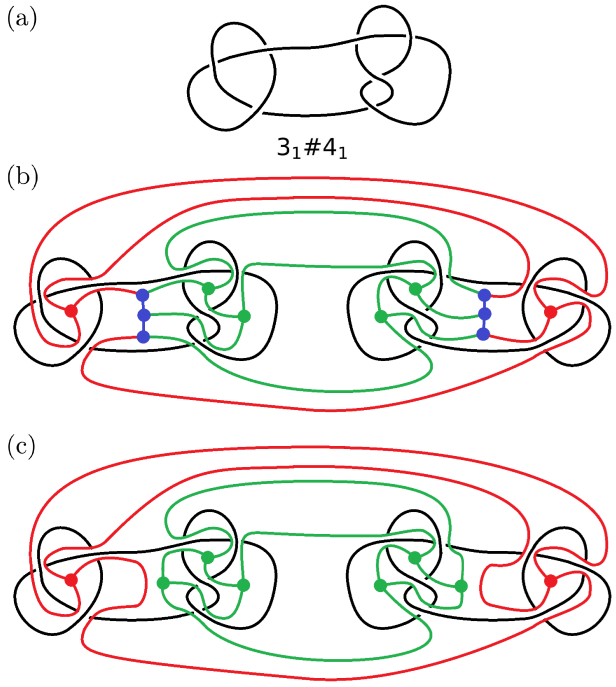


图 7. **追踪纽结和 $3_1\#4_1$ 中与素因子相关的子结构。** (a) 正在考察的纽结和。(b) 复合图绘制在两个投影视图上，并划分为与各因子相关的红色和绿色部分，以及表示共享部分的蓝色连接线段。(c) 若要恢复一个因子，移除另一个因子，对共享边重新着色，保留价大于二的共享顶点，并抑制价为二的共享顶点。恢复出的图与图 4 中对应于 3_1 和 4_1 纽结的项一致。

手性。我们还考察了一个互补示例，以更清楚地区分对相对手性的敏感性与对整体反射的不变性。八字结 4_1 是反手性的，因此纽结 $3_1^{\mathrm{L}}\#4_1$ 和 $3_1^{\mathrm{R}}\#4_1$ 互为镜像。由此，在当前的无向比较下，它们的基于生长的图同构。

D. 非最简图

为了检验图示和嵌入变化下的不变性，我们为平凡结及选定的素结构造环境同痕的三维嵌入，其所选投影包含额外的第一类或第二类 Reidemeister 特征。由此，我们探究额外的局部环和交叉对对基于生长的图的影响。

图 9展示了非最简平凡结和三叶结。等价的纽结可能产生非同构图，这直接排除了将原始图或理想化图视为结不变量的可能性。圆形平凡结产生一个具有两个 +1 指标的最简线场。另一种方法是通过局部延拓和扭转，生成一个由两条

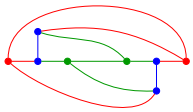
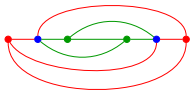
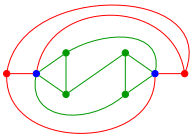
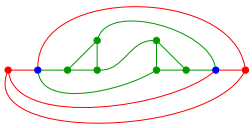
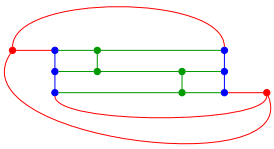
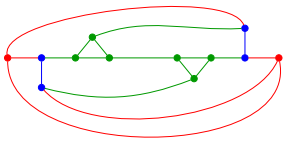
Composite knots	Graphs
$3_1\#3_1$(square)	
$3_1\#3_1$(granny)	
$3_1\#4_1$	
$3_1\#4_1$	
$3_1\#4_1$	
$3_1\#4_1$	

图 8。 **若干选定连通和的基于生长的图。** 左栏给出了图示、常用名称和亚历山大-布里格斯记号。右栏展示了基于生长的图。红色和绿色标示与两个素因子相关的部分，蓝色则标示共享连接体，配色方式与图 7中的类似。

不相连的边组成的图。在我们的线场解释中，每个端点（顶点）都带有 +1/2，但代价是无法为曲面指定 +1 电荷。想必这是因为平凡结属于退化情形，因此合理的做法是仅从基于生长的图的角度来解释它。通过对纽结进行同痕变形而出现的、连接顶点的边，有时可以通过应用收缩将其移除。

在某些非最小三叶结图中，也会出现与平凡结相同类型的图新增部分。也就是说，原有的素结贡献仍清晰可见，同时伴有一个类似平凡结的附加部分。在这些情况下，简化桥并抑制二度顶点，即可恢复最小理想化图。其他例子图 9 则无法通过这种简单的约化处理。迄今为止，我们的分析尚未发现与莱德迈斯特变换相对应的一般图变换。

最后，图 10 比较了 5_2 和 6_3 纽结的最小图与非最小图。这些图示表明，一些非最小图所生成的图，其顶点数或边数少于对应的最小图。由此可见，图的大小并不随图的交叉数单调变化。在所示的 5_2 示例中，顶点数（$V:6\mapsto 4$）和边数（$E:10\mapsto 7$）均减少。 6_3纽结示例表明，顶点数（$V=10$）保持不变，而边数（$E:16\mapsto 15$）减少。这些结果进一步说明，生长过程会受到空间排列的影响；它并非简单地与交叉数相关。

V. 讨论

我们的生长法计算表明，对于本文考察的嵌入，纽结与图之间存在可复现的关联。重要的是，这些图并非通过投影纽结并应用局部组合规则生成，也不是通过计算传统的结不变量得到的。因此，目前应将我们的生长法图视为嵌入的描述量，而非按规范方式赋予的对象。

尽管存在这一局限，我们的图目录所揭示的结构仍远比预期丰富，而对结型不敏感的几何分析可能无法发现这些结构。该流程会生成非同构的理想化图。虽然这并不意味着具有单射性，但它表明曲面网络保留了足够的信息，能够区分一组并非平凡的纽结。与此同时，输出并非对某种熟知的结相关图的简单改写。除经过测试的双股环面结外（其结果与基于棋盘着色的泰特图对中的一个成员一致），生长法图与相应图示的两个泰特图均不相同。不过，在将生长法图称为纽结及相关对象的一种新表示之前，还需要与其他基于图的表示进行系统比较。

我们的经验图重构有助于表明，我们得到的基于生长的图受到所选图示的强烈约束。在第IV节中，我们还证明了，对于某些非极小示例，我们的规则会失效；在这些示例中，局部环和额外交叉对会以我们的重构方法无法捕捉的方式改变图。综合考量这些证据，直接从图示到图的转换或许可行，但仍需进一步研究以确定其性质。这一方法适用于一类受限的嵌入，但目前还不能取代增长计算。我们的非极小示例还表明，同一纽结的环境同痕代表可能产生非同构图。通过对图

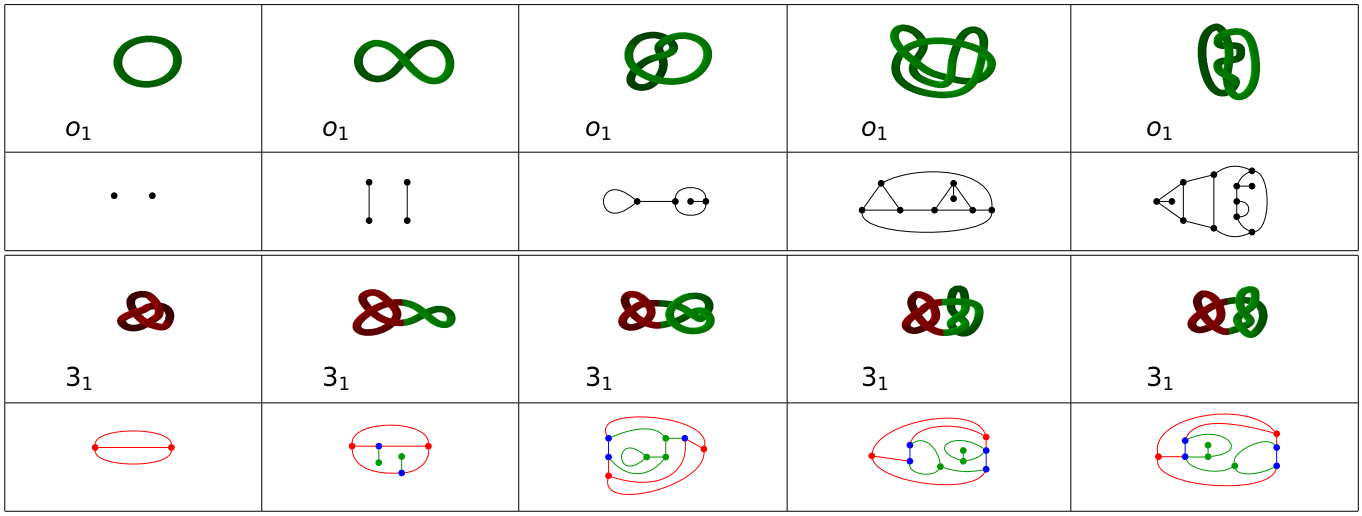


图 9. **同痕平凡结和三叶结的基于生长的图。** 上面两行分别展示平凡结图及其对应的基于生长的图。下面两行以同样的方式展示三叶结。所有示例都通过环境同痕与最小结类型（左列）相关联。对于三叶结示例，红色表示与最小三叶结相关的部分，绿色表示额外的类平凡结结构，蓝色表示连接器，如图 7所示。

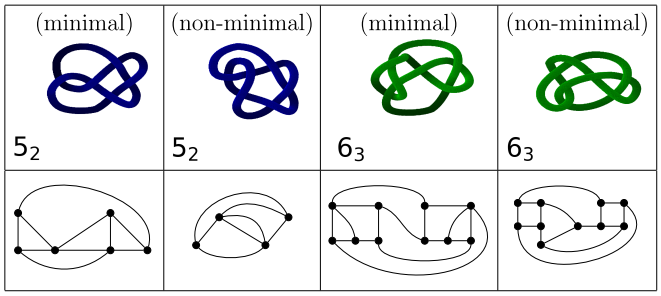


图 10. **和 纽结的最小与非最小图示。** 上排展示图示，下排展示对应的基于生长的图。

进行环境同痕所诱导的变换取商后，仍可能得到一个拓扑对象。为此，需要推导与莱德迈斯特变换相关的球面网络变化，并证明由此产生的图关系不依赖于所选的变换序列。

我们对球面上基于生长的图所作的缺陷解释，旨在将其与液晶的物理联系起来 [29, 30]。不过，必须强调的是，我们的数值方案演化的是标量标签场和加权界面。也就是说，它并不演化向列指向矢或任何其他微观取向自由度。线场则是根据提取网络构造出的补全结构。要实现直接的物理实现，需要独立定义一个切向序参量，其取向与网络对齐，且其奇点实现指定的指标。

这一差异使我们的方法与关于活性与生物物质中几何、生长和拓扑之间耦合的研究相呼应 [2, 9, 10]。例如，在再生中的水螅，拓扑缺陷会聚集在形态特征处，并能组织机械应力和身体轴的形成 [40, 41]。与缺陷相关的机制也被认为参与了上皮重塑和细胞集体动力学 [42–45]。另一个相似的生物学现象是植物枝条融合：生长中的枝条彼此协调，并形成持久的接触，同时避免相互穿透 [46, 47]。我们的构造同样将生长与几何排斥耦合起来，但施加的是由纽结支架形成的全局约束，而非点状缺陷。通过丝状物组织、生长和界面力学的耦合，能否实现这种从纽结到网络的转化，仍是一个悬而未决的物理问题。

VI. 总结与展望

总而言之，我们提出了一种计算方法，可将三维结嵌入映射为球面上的图。为此，我们基于 Mohammad 等人 [27]提出的细胞动力学算法开展工作。我们的方法首先将纽结周围的管状邻域分割为彼此独立的细胞。随后，这些细胞以恒定速率向外生长，同时通过加权界面能最小化进行松弛。在长时间极限下，这一过程会形成近似球形的外边界；通过研究非邻近细胞接触，我们可以从中提取出一个图。关键在于，种子区域——即初始分割后的结周围不可变的管状区域——始终与生长中的细胞保持连接，因此初始嵌入的几何形状能够影响最终形成的曲面接触网络。由此得到的表面图可以用线场来解释，并具有相应的

拓扑缺陷。然而，其高阶结点结构可能对扰动较为敏感，因此我们引入了结点正则化方法，将选定的邻近三岔结点簇收缩为理想化的高价顶点，例如，在极小环面纽结中。

我们将该方法应用于最多具有七个交叉的十四个非平凡素结的标准最少交叉嵌入。这得到了非同构图，它们通常不同于此类嵌入对应的两个泰特图。此外，所引入的生长过程中的某些部分可以理解为一种经验图重构。研究表明，选取的连通和保留了可识别为源自其素结因子的结构。不过，需要注意的是，在我们的方法中，同一纽结的非最简图可能会产生不同的图。因此，基于生长的图不是结不变量。

不过，我们的观察结果提供了充分线索，促使我们沿此方向开展进一步研究。一个尚待解决的数学难题是，找出与莱德迈斯特变换相对应的图变换，并确定这类变换是否存在于我们的图示上。基于增长的构造提供了一个具体框架，可在其中研究此类图变换。

致谢

我们感谢 Nikki Fredriksz 对 Moham- mad等人算法的分析 [27] ，该分析有助于激发本研究。我们也感谢 Boris van Boxtel 和 Alvaro del Pino Gomez 提供有益的讨论。

数据可用性

代码、用于复现图示的脚本、初始和最终嵌入以及补充视频均可在开放存储库中获取。永久标识符为 https://doi.org/10.5281/zenodo.24399377。

作者贡献

概念构思：JdG；方法：EG 和 JdG；数值计算：EG；验证：EG 和 JdG；研究：EG；初稿撰写：EG 和 JdG；审阅与编辑：JdG；资源：JdG；指导：JdG。

[1] L. Tubiana、G. P. Alexander、A. Barbensi、D. Buck、J. H. E. Cartwright、 *et al.*，《软物质与生物物质中的拓扑》，《物理学报告》1075，1（2024）。[2] S. Shankar、A. Souslov、M. J. Bowick、M. C. Marchetti 和 V. Vitelli，《拓扑活性物质》，《自然评论物理》4，380（2022）。[3] C. Micheletti、D. Marenduzzo 和 E. Orlandini，《具有空间或拓扑约束的聚合物：理论与计算结果》，《物理学报告》504，1（2011）。[4]S. A. Wasserman 和 N. R. Cozzarelli，《生化拓扑：在 DNA 重组与复制中的应用》，《科学》232，951（1986）。[5] E. Terriac、S. Sch¨utz 和 F. Lautenschlaeger，《波形蛋白中间丝环在黏附初期使细胞核发生变形》，《细胞与发育生物学前沿》7，106（2019）。[6] D. Kleckner 和 W. T. M. Irvine，《纽结涡旋的产生与动力学》，《自然·物理》9，253（2013）。[7] D. M. Raymer 和 D. E. Smith，《搅动弦的自发打结》，《美国国家科学院院刊》104，16432（2007）。[8] V. P. Patil、H. Tuazon、E. Kaufman、T. Chakrabortty、D. Qin、J. Dunkel 和 M. S. Bhamla，《活体纠缠物质的超快速可逆自组装》，《科学》380，392（2023）。[9] M. J. Bowick、N. Fakhri、M. C. Marchetti 和 S. Ra- maswamy，《活性物质中的对称性、热力学与拓扑》，《物理评论 X》12，010501（2022）。[10] L. Giomi，《活性向列相中湍流的几何与拓扑》，《物理评论 X》5，031003（2015）。[11] D. Rolfsen， *Knots and Links*（AMS Chelsea 出版社，普罗维登斯，罗德岛州，2003 年）。[12]W. B. R. Lickorish，《纽结》，《数学研究生教材》第175卷（施普林格出版社，1997年）。[13]J. W. Alexander，纽结和链环的拓扑不变量，《美国数学会汇刊》30，275（1928年）。[14] V. F. R. Jones，通过冯·诺依曼代数得到的纽结多项式不变量，《美国数学会通报》12，103（1985年）。[15] P. Freyd、D. Yetter、J. Hoste、W. B. R. Lickorish、K. Millett 和 A. Ocneanu，纽结和链环的新多项式不变量，《美国数学会通报》12，239（1985年）。[16] J. H. Przytycki 和 P. Traczyk，Conway 型链环不变量，《神户数学杂志》4，115（1987年）。[17] B. Bollob´as，《现代图论》（施普林格出版社，纽约，1998年），第10章。[18] L. H. Kauffman，符号图的 Tutte 多项式，《离散应用数学》25，105（1989年）。[19] M. B. Thistlethwaite，琼斯多项式的生成树展开，《拓扑学》26，297（1987年）。[20] B. Bollob´as 和 O. Riordan，可定向曲面上图的多项式不变量，《伦敦数学会会刊》83，513（2001年）。[21] B. Bollob´as 和 O. Riordan，曲面上图的一个多项式，《数学年刊》323，81（2002年）。[22] I. Moffatt，嵌入图的纽结不变量与 Bollob´as–Riordan 多项式，《欧洲组合学杂志》29，95（2008年）。[23] S. D. Noble 和 D. J. A. Welsh，纽结图，《图论杂志》34，100（2000年）。[24] J. Cantarella、R. B. Kusner 和 J. M. Sullivan，论纽结和链环的最小绳长，《Inventiones Mathematicae》

150，257（2002年）。[25] T. Ashton、J. Cantarella、M. Piatek 和 E. J. Rawdon，50个紧密打结和链接的管的自接触集（2005年），arXiv:math/0508248 [math.DG]。[26] T. Ashton、J. Cantarella、M. Piatek 和 E. J. Rawdon，通过约束梯度下降进行纽结收紧，《实验数学》20，57（2011年）。[27] R. Z. Mohammad、H. Murakawa、K. Svadlenka 和 H. Togashi，用于组织形态发生中细胞重排建模的数值算法，《Communications Biology》5，239（2022年）。[28] D. Crowley 和 M. Grant，线场的 Poincaré–Hopf 定理再探，《几何与物理学杂志》117，187（2017年）。´H. Shin、M. J. Bowick 和 X. Xing，球面向列相中的拓扑缺陷，《物理评论快报》101，037802 2008( )。[29] M. J. Bowick 和 L. Giomi，二维物质：有序性、曲率与缺陷，《物理学进展》58，449 2009( )。[30] B. Merriman、J. K. Bence 和 S. Osher，多重交汇点的运动：一种水平集方法，《计算物理学杂志》112，334（1994年）。[31] S. Esedo[32] glu 和 F. Otto，具有任意表面张力的网络阈值动力学，《纯粹与应用数学通讯》68，808（2015年）。˘M. Jacobs、E. Merkurjev 和 S. Esedo[33] glu，拍卖动力学：一种体积约束MBO格式，《计算物理学杂志》354，288（2018年）。˘J. Plateau，[34] *Statique expérimentale et théorique des liq-*（Gauthier-Villars，巴黎，1873年）。*uides soumis aux seules forces moléculaires* J. E. Taylor，类肥皂泡和类皂膜极小曲面中的奇点结构，《数学年刊》103，489（1976年）。[35] E. G[36] ulmez 和 J. de Graaf，《〈将纽结嵌入逐步构造到球面图中〉的补充信息》（2026年），可作为 arXiv 上的附属文件获取。

[37] G. M. Ziegler，三维多面体的施泰尼茨定理，载于 *Lectures on Polytopes: Updated Seventh Printing of the First Edition* 1995（施普林格纽约，纽约州纽约，）第103–126页。[38] J. Hoste、M. Thistlethwaite和J. R. Weeks，《首批1,701,936个纽结》，《数学智者》20，33（1998年）。[39] 我们避免将 D^{opp} 称为“对偶图”，因为该术语已经用于泰特图的平面对偶性。[40] Y. Maroudas-Sacks、L. Garion、L. Shani-Zerbib、A. Livshits、E. Braun和K. Keren，肌动蛋白纤维向列有序中的拓扑缺陷作为水螅形态发生的组织中心，《自然·物理》17，251（2021年）。[41] A. Hernandez、C. Zhu和L. Giomi，*hydra* 中的轴形成力学（2026年），arXiv:2601.05220 [cond- mat.soft]。[42] T. B. Saw、A. Doostmohammadi、V. Nier、L. Kocgozlu、S. P. Thampi、Y. Toyama、P. Marcq、C. T. Lim、J. M. Yeomans和B. Ladoux，上皮组织中的拓扑缺陷支配细胞死亡和细胞挤出，《自然》544，212（2017年）。[43] F. Vafa和L. Mahadevan，活性向列相缺陷与上皮形态发生，《物理评论快报》129，098102（2022年）。[44] K. Kawaguchi、R. Kageyama和M. Sano，拓扑缺陷控制神经祖细胞培养物中的集体动力学，《自然》545，327（2017年）。[45] L. A. Hoffmann、L. N. Carenza、J. Eckert和L. Giomi，缺陷介导的形态发生理论，《科学进展》8，eabk2712（2022年）。[46] C. E. Jeffree和M. M. Yeoman，嫁接愈合部中相对细胞之间细胞间连接的发育，《新植物学家》93，491（1983年）。[47] H. Yin、B. Yan、J. Sun、P. Jia、Z. Zhang、X. Yan、J. Chai、Z. Ren、G. Zheng和H. Liu，嫁接愈合部发育：接穗与砧木之间通过细胞间通信实现局部生长素积累的精细过程，《实验植物学杂志》63，4219（2012年）。