

**ОБЩИЕ
ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ**

УДК 519.63

**ФОРМУЛА ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ ЧЕРЕЗ
ИЗОМЕТРИЧЕСКИЕ ИНВАРИАНТЫ ПАРЫ ОТРЕЗКОВ¹⁾**

© 2022 г. О. Д. Аносова^{1,*}, М. Брайт^{1,**}, В. А. Курлин^{1,***}

¹⁾ *Департамент компьютерных наук и Фабрика инновационных материалов, Ливерпульский университет,
Ливерпуль L69 3BX, Великобритания*

**e-mail: oanosova@liv.ac.uk*

***e-mail: sgmbright@liverpool.ac.uk*

****e-mail: vitaliy.kurlin@gmail.com*

Поступила в редакцию 11.10.2021 г.

Переработанный вариант 03.03.2022 г.

Принята к публикации 11.04.2022 г.

Коэффициент зацепления обычно определяется как изотопический инвариант для двух непересекающихся замкнутых кривых в трехмерном пространстве. Однако изначальное определение через двойной интеграл, данное Гауссом в 1833 г., работает для любых непересекающихся кривых, рассматриваемых с точностью до движения трехмерного пространства. В частности, коэффициент зацепления является изометрическим инвариантом жестких структур, состоящих из отрезков прямых. В настоящей работе впервые дается полное доказательство точной аналитической формулы для коэффициента зацепления двух отрезков в терминах шести изометрических инвариантов, а именно, расстояния и угла между данными отрезками и четырех координат их концов в естественной системе координат, ассоциированной с этими отрезками. Практические приложения к сцепленным кристаллическим сетям побудили нас описать возможные расширения коэффициента зацепления на бесконечные периодические структуры и описать недавние результаты в изометрической классификации периодических множеств точек. Библ. 30. Фиг. 5.

Ключевые слова: интеграл Гаусса, коэффициент зацепления, изометрические инварианты.

DOI: 10.31857/S0044466922080026

**1. ИНТЕГРАЛ ГАУССА ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ
НЕПЕРЕСЕКАЮЩИХСЯ КРИВЫХ**

Эта расширенная версия статьи конференции [1] включает все ранее пропущенные доказательства. Для любых векторов $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$, смешанное произведение определяется по формуле $(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w}$.

Определение 1 (интеграл Гаусса для коэффициента зацепления). Для кусочно-гладких кривых $\gamma_1, \gamma_2 : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^3$, коэффициент зацепления может быть определен как интеграл Гаусса (см. [2])

$$\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2) = \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds,$$

где $\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s)$ – векторные производные функций $\gamma_1(t), \gamma_2(s)$ от одной переменной.

Формула в определении 1 дает целое число для любых замкнутых непересекающихся кривых γ_1, γ_2 , благодаря ее интерпретации как степени отображения Гаусса $\Gamma(t, s) = \frac{\gamma_1(t) - \gamma_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|} : S^1 \times S^1 \rightarrow S^2$, т.е. $\text{deg } \Gamma = \frac{\text{area}(\Gamma(S^1 \times S^1))}{\text{area}(S^2)}$, где площадь единичной сферы равна $\text{area}(S^2) = 4\pi$. Эта целая степень является коэффициентом зацепления 2-компонентного зацепле-

¹⁾Работа выполнена при поддержке Исследовательского совета по инженерным и физическим наукам Великобритании в рамках гранта “Топологический анализ данных в приложениях” (EP/R018472/1).

ния $\gamma_1 \sqcup \gamma_2 \subset \mathbb{R}^3$, образованного двумя замкнутыми кривыми. Инвариантность относительно непрерывной деформации \mathbb{R}^3 легко следует для замкнутых кривых: действительно, функция под интегралом Гаусса в (1), а значит и сам интеграл, непрерывно меняются при возмущении кривых γ_1, γ_2 . Это означает, что любое целое значение должно оставаться постоянным.

Для незамкнутых кривых γ_1, γ_2 интеграл Гаусса дает действительное, но не обязательно целое значение, которое остается инвариантным при жестких движениях или изометриях, сохраняющих ориентацию (см. теорему 1). В \mathbb{R}^3 с евклидовой метрикой изометрии состоят из композиций вращений, параллельных переносов и отражений. Изометрическая инвариантность вещественного коэффициента зацепления для незамкнутых кривых нашла применение в изучении молекул (см. [3]).

Любая гладкая кривая может быть хорошо аппроксимирована ломаной, поэтому вычисление коэффициента зацепления сводится к сумме по парам прямых отрезков L_1, L_2 . В 1976 г. Банчофф (см. [4]) выразил коэффициент зацепления $\text{lk}(L_1, L_2)$, используя концы каждого отрезка (см. подробности этой и других предыдущих работ в разд. 3).

В 2000 г. Кленин и Ланговски (см. [5]) предложили формулу для коэффициента зацепления $\text{lk}(L_1, L_2)$ для двух отрезков L_1, L_2 в терминах шести инвариантов, ссылаясь на предыдущую работу [6], в которой формула использовалась без детального доказательства. В [5] также пропущены все детали вывода формулы на основе инвариантов.

Полезность формулы на основе инварианта можно увидеть, рассмотрев аналогию с более простым понятием скалярного произведения векторов. Алгебраическая или *координатная* формула выражает скалярное произведение двух векторов $\mathbf{u} = (x_1, y_1, z_1)$ и $\mathbf{v} = (x_2, y_2, z_2)$ как $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$, которые, в свою очередь, зависят от координат концевых точек данных векторов. Однако скалярное произведение для многомерных векторов $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbb{R}^n$ также может быть выражено в терминах только трех параметров $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = |\mathbf{u}| \cdot |\mathbf{v}| \cos \angle(|\mathbf{u}|, |\mathbf{v}|)$. Две длины $|\mathbf{u}|, |\mathbf{v}|$ и угол $\angle(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ являются инвариантами изометрии векторов \mathbf{u}, \mathbf{v} . Эта вторая геометрическая или *инвариантная* формула позволяет понять, что $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ является инвариантом изометрии, в то время как намного труднее показать, что сумма $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$ инвариантна при вращении. Это также дает другие геометрические идеи, которые трудно извлечь из формулы, основанной на координатах: например, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ колеблется как синус, когда длины $|\mathbf{u}|, |\mathbf{v}|$ фиксированы, но угол $\angle(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ меняется.

В настоящей работе мы приводим подробное доказательство инвариантной формулы для коэффициента зацепления в теореме 2 и новые следствия в разд. 6, формально исследующие асимптотическое поведение коэффициента зацепления, которое ранее не изучалось.

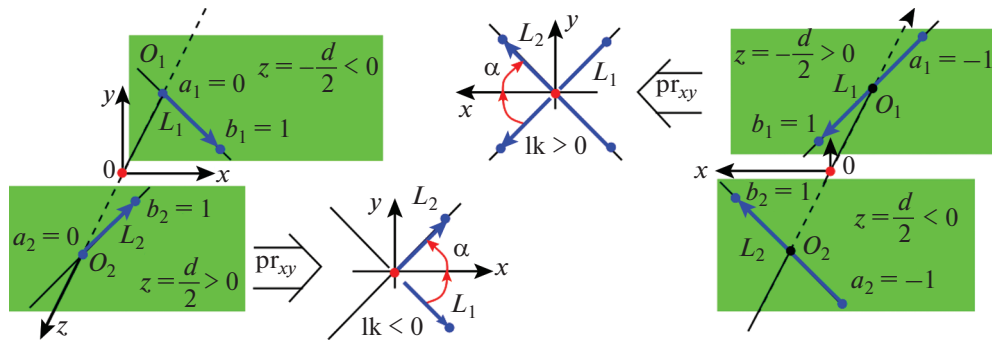
Наш собственный интерес к асимптотическому поведению мотивирован тем, что *периодический коэффициент зацепления* (см. [7]) является инвариантом кристаллических сетей (см. [8]), которые бесконечно периодичны в трех направлениях. Периодический коэффициент получается как бесконечная сумма коэффициентов зацепления между одним отрезком и всеми копиями другого отрезка, перенесенными по векторам решетки.

2. ОБЩАЯ СХЕМА ФОРМУЛЫ НА ОСНОВЕ ИНВАРИАНТОВ И ПОСЛЕДСТВИЯ

Общеизвестная теорема 1 перечисляет ключевые свойства $\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$, которые будут использованы позже.

Теорема 1 (свойства коэффициента зацепления). *Коэффициент зацепления, заданный интегралом Гаусса в определении 1 для гладких кривых γ_1, γ_2 , обладает следующими свойствами:*

- коэффициент зацепления симметричен: $\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2) = \text{lk}(\gamma_2, \gamma_1)$;*
- $\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2) = 0$ для любых кривых γ_1, γ_2 , принадлежащих одной плоскости;*
- $\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ не зависит от сохраняющих ориентацию параметризаций кривых γ_1, γ_2 с фиксированными конечными точками;*
- $\text{lk}(-\gamma_1, \gamma_2) = -\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$, где $-\gamma_1$ совпадает с γ_1 , но имеет обратную ориентацию;*
- коэффициент зацепления $\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ инвариантен при любом масштабировании $\mathbf{v} \rightarrow \lambda \mathbf{v}$ для $\lambda > 0$;*
- $\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ умножается на $\det M$ при любом ортогональном отображении $\mathbf{v} \mapsto M\mathbf{v}$.*



Фиг. 1. Каждый отрезок прямой L_i лежит в плоскости $\{z = (-1)^i d/2\}$, $i = 1, 2$. Слева: расстояние $d > 0$, координаты конечных точек $a_1 = 0, b_1 = 1$ и $a_2 = 0, b_2 = 1$, длины $l_1 = l_2 = 1$. Справа: ориентированное расстояние $d < 0$, координаты конечной точки $a_1 = -1, b_1 = 1$ и $a_2 = -1, b_2 = 1$, поэтому $l_1 = l_2 = 2$. На обоих средних рисунках $\alpha = \pi/2$ – это угол от $\text{pr}_{xy}(L_1)$ к $\text{pr}_{xy}(L_2)$ с x -осью в качестве биссектрисы.

Доказательство. а) Заметим, что евклидово расстояние симметрично, а поскольку тройное произведение антисимметрично и $\gamma_2(s) - \gamma_1(t) = -(\gamma_1(t) - \gamma_2(s))$, то симметрия следует из следующих равенств:

$$(\dot{\gamma}_2(s), \dot{\gamma}_1(t), \gamma_2(s) - \gamma_1(t)) = -(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_2(s) - \gamma_1(t)) = -(\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), -(\gamma_1(t) - \gamma_2(s))) = (\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s)).$$

б) Следует из того, что касательные вектора и вектор разности кривых лежат в одной плоскости и, следовательно, имеют нулевое смешанное произведение.

в) Является простым следствием независимости интегралов от параметризации.

г) Следует из $\dot{\gamma}_1(1-t) = -\dot{\gamma}(t)$, так как кривая с обратной ориентацией $\gamma_1(t)$ совпадает с $\gamma_1(1-t)$.

е) Любое масштабирование $\mathbf{v} \mapsto \lambda \mathbf{v}$ приводит к изменению параметризации $\gamma_i(t) \mapsto \lambda \gamma_i(t)$.

Поскольку $\dot{\lambda} \gamma_i(t) = \lambda \dot{\gamma}_i(t)$, результат получается из следующих равенств:

$$\begin{aligned} \text{lk}(\lambda \gamma_1(t), \lambda \gamma_2(s)) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{(\lambda \dot{\gamma}_1(t), \lambda \dot{\gamma}_2(s), \lambda(\gamma_1(t) - \gamma_2(s)))}{|\lambda(\gamma_1(t) - \gamma_2(s))|^3} dt ds = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\lambda^3 (\dot{\gamma}_1(t), \dot{\gamma}_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{\lambda^3 |\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dt ds = \text{lk}(\gamma_1(t), \gamma_2(s)). \end{aligned}$$

ф) Для ортогонального преобразования M имеем $M\mathbf{u} \times M\mathbf{v} = (\det M)M(\mathbf{u} \times \mathbf{v})$ и $M\mathbf{u} \cdot M\mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$. Поэтому $|M\mathbf{v} - M\mathbf{u}| = |\mathbf{v} - \mathbf{u}|$, $(M\mathbf{u}, M\mathbf{v}, M\mathbf{w}) = \det M(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})$ и $\text{lk}(M\gamma_1, M\gamma_2) = (\det M)(\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2))$, как и ожидалось. Теорема 1 доказана.

Основная теорема 2 докажет аналитическую формулу для коэффициента зацепления любых отрезков L_1, L_2 в терминах шести изометрических инвариантов L_1, L_2 , которые введены в лемме 1. Более простое следствие 1 выражает $\text{lk}(L_1, L_2)$ для любых *простых* ортогональных отрезков L_1, L_2 , определенных их длинами $l_1, l_2 > 0$ и начальными конечными точками O_1, O_2 соответственно с евклидовым расстоянием $d(O_1, O_2) = d > 0$, так что векторы $L_1, L_2, \overline{O_1 O_2}$ образуют положительно-ориентированный ортогональный базис, объем которого равен $|(L_1, L_2, \overline{O_1 O_2})| = |l_1 l_2 d|$ (см. фиг. 1).

Следствие 1 (коэффициент зацепления для простых ортогональных отрезков). Для любых простых ортогональных отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ с длинами l_1, l_2 и расстоянием d , как определено выше, коэффициент зацепления равен $\text{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi} \arctg\left(\frac{l_1 l_2}{d\sqrt{l_1^2 + l_2^2 + d^2}}\right)$.

Приведенное выше выражение является частным случаем общей формулы (3) для $a_1 = a_2 = 0$ и $\alpha = \pi/2$. Обе формулы инвариантны при равномерном масштабировании \mathbb{R}^3 на λ , что согласуется с теоремой 1. Если $l_1 = l_2 = l$, то коэффициент зацепления в следствии 1 становится $\text{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi} \arctg \frac{l^2}{d\sqrt{2l^2 + d^2}}$. Если $l_1 = l_2 = d/2$, то $\text{lk}(L_1, L_2) = \frac{1}{2\pi} \left(\arcsin \frac{1}{\sqrt{2.5}} - \frac{\pi}{4} \right) \approx -0.016$. Если $l_1 = l_2 = d$, то $\text{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi} \arctg \frac{1}{\sqrt{3}} = -\frac{1}{24} \approx -0.0417$.

Следствие 1 подразумевает, что коэффициент зацепления находится в интервале $(-1/8, 0)$ для любых простых ортогональных отрезков с $d > 0$, что не было очевидно из определения 1. Если L_1, L_2 удаляются друг от друга, то $\lim_{d \rightarrow +\infty} \text{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi} \arctg 0 = 0$.

Если отрезки с $l_1 = l_2 = l$ становятся бесконечно короткими, то предел снова равен нулю: $\lim_{l \rightarrow 0} \text{lk}(L_1, L_2) = 0$ для любого фиксированного d . Из предела $\lim_{x \rightarrow +\infty} \arctg x = \pi/2$ следует, что если отрезки с $l_1 = l_2 = l$ становятся бесконечно длинными для фиксированного расстояния d , то $\lim_{l \rightarrow +\infty} \text{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi} \arctg \frac{l^2}{d\sqrt{2l^2 + d^2}} = -\frac{1}{8}$. Если мы приблизим друг к другу отрезки L_1, L_2 , которые имеют фиксированные (возможно, разные) длины l_1, l_2 , то возникает тот же предел: $\lim_{d \rightarrow 0} \text{lk}(L_1, L_2) = -1/8$ (более общие следствия см. в разд. 6).

3. ПОСЛЕДНИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБ ИНТЕГРАЛЕ ГАУССА ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ

В обзоре [9] рассматривается история интеграла Гаусса, его использование в описании электромагнитных полей Максвеллом (см. [10]), и его интерпретация как степени отображения из тора в сферу. В классической теории узлов $\text{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ — это топологический инвариант зацепления, состоящего из замкнутых кривых $\gamma_1 \sqcup \gamma_2$ рассматриваемых с точностью до изотопии. Это отношение слишком гибко для незамкнутых кривых, которые могут быть изотопически развязаны, что превращает интеграл Гаусса в 0 для незамкнутых кривых γ_1, γ_2 .

Вычислить значение интеграла Гаусса можно приближенно, но эта задача упрощается, когда мы рассматриваем прямые отрезки. Первая формула для коэффициента зацепления между двумя прямыми отрезками в терминах их геометрии была описана Банчоффом (см. [4]). Банчофф рассматривает проекцию отрезков на плоскость, ортогональную некоторому вектору $\xi \in S^2$. Интеграл Гаусса интерпретируется как доля единичной сферы, покрытая теми направлениями ξ , для которых проекции пересекаются.

Эта интерпретация легла в основу замкнутой формы, разработанной Араи (см. [11]), используя явную формулу ван Остерома и Страки для телесного угла. В [12] обсуждается другой подход к вычислению коэффициента зацепления с помощью телесного угла.

Альтернативный подсчет для этого телесного угла приведен в [13] в качестве отправной точки для вычисления дальнейших инвариантов открытых запутанных кривых. Эта формула не использует геометрические инварианты, но была использована в [5] для формулы (без доказательства), аналогичной теореме 2, которая доказывается в данной работе с дополнительными следствиями в разд. 6.

4. ШЕСТЬ ИЗОМЕТРИЧЕСКИХ ИНВАРИАНТОВ ПРЯМЫХ ОТРЕЗКОВ В ТРЕХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

В этом разделе вводятся шесть изометрических инвариантов, которые однозначно определяют положение любых отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ с точностью до изометрии \mathbb{R}^3 (см. лемму 1).

Достаточно рассмотреть только отрезки, которые не принадлежат одной двумерной плоскости. Если L_1, L_2 лежат в одной плоскости Π , например, параллельны, то $\dot{L}_1(t) \times \dot{L}_2(s)$ ортогонален любому вектору $L_1(t) - L_2(s)$ в плоскости Π , следовательно, $\text{lk}(L_1, L_2) = 0$. Обозначим через

$\bar{L}_1, \bar{L}_2 \subset \mathbb{R}^3$ бесконечные ориентированные прямые, проходящие через данные отрезки L_1, L_2 соответственно. В плоскости с фиксированными координатами x, y все углы измеряются против часовой стрелки от положительной оси x .

Определение 2 (инварианты отрезков). Пусть $\alpha \in [0, \pi]$ – угол между ориентированными отрезками $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$. Если предположить, что L_1, L_2 не параллельны, то существует единственная пара параллельных плоскостей $\Pi_i, i = 1, 2$, каждая из которых содержит бесконечную прямую \bar{L}_i , продолжающую отрезок L_i .

Выберем ортогональные координаты x, y, z в \mathbb{R}^3 так, что

- а) горизонтальная плоскость $\{z = 0\}$ находится посередине между Π_1, Π_2 (см. фиг. 1);
- б) $(0, 0, 0)$ – пересечение проекций $\text{pr}_{xy}(\bar{L}_1), \text{pr}_{xy}(\bar{L}_2)$ на плоскость $\{z = 0\}$;
- в) ось x разбивает пополам угол α между проекциями $\text{pr}_{xy}(\bar{L}_1)$ и $\text{pr}_{xy}(\bar{L}_2)$, ось y выбрана так, что угол α измеряется против часовой стрелки от оси x до оси y в плоскости $\{z = 0\}$;
- г) ось z выбрана так, что оси x, y, z имеют правостороннюю ориентацию, тогда d – это ориентированное расстояние от Π_1 до Π_2 ; расстояние d отрицательно, если вектор $\overline{O_1O_2}$ противоположен положительно-ориентированной оси z на фиг. 1.

Пусть a_i, b_i – координаты начальной и конечной точек отрезков L_i бесконечной прямой \bar{L}_i , начало которой – это точка $O_i = \Pi_i \cap (z\text{-ось}) = (0, 0, (-1)^i d/2), i = 1, 2$.

Случай, когда отрезки L_1, L_2 лежат в одной плоскости $\Pi \subset \mathbb{R}^3$ допускается определением 2, если мы решим, что расстояние d от Π_1 до Π_2 равно нулю.

Лемма 1 (параметризация). Любые ориентированные отрезки $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ однозначно определяются с точностью до жесткого движения изометрическими инвариантами $\alpha \in [0, \pi]$ и $d, a_1, b_1, a_2, b_2 \in \mathbb{R}$ из определения 2. Для $l_i = b_i - a_i, i = 1, 2$, каждый отрезок прямой L_i имеет вид

$$L_i(t) = \left((a_i + l_i t) \cos \frac{\alpha}{2}, (-1)^i (a_i + l_i t) \sin \frac{\alpha}{2}, (-1)^i \frac{d}{2} \right), \quad t \in [0, 1]. \tag{2}$$

Доказательство. Любые отрезки прямых $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$, не лежащие в одной плоскости, содержатся в разных параллельных плоскостях. Для $i = 1, 2$ плоскость Π_i определяется L_i и прямой, параллельной L_{3-i} и проходящей через конец отрезка L_i . Пусть L'_i – ортогональная проекция отрезка L_i на плоскость Π_{3-i} . Пусть O_i – точка пересечения непараллельных прямых, продолжающих отрезки L_i и L'_{3-i} в плоскости Π_i . Тогда отрезок O_1O_2 ортогонален обеим плоскостям Π_i , следовательно, обеим L_i для $i = 1, 2$.

По теореме 1, для вычисления $\text{lk}(L_1, L_2)$ можно применить жесткое движение, чтобы переместить среднюю точку отрезка O_1O_2 в начало координат $O = (0, 0, 0) \in \mathbb{R}^2$ и сделать отрезок O_1O_2 вертикальным, т.е. лежащим внутри оси z . Ориентированное расстояние d можно определить как разность между координатами $O_2 = \Pi_2 \cap (z\text{-axis})$ и $O_1 = \Pi_1 \cap (z\text{-axis})$ вдоль оси z . Тогда L_i лежит в горизонтальной плоскости $\Pi_i = \{z = (-1)^i d/2\}, i = 1, 2$.

Дополнительное вращение вокруг оси z гарантирует, что ось x в горизонтальной плоскости $\Pi = \{z = 0\}$ является биссектрисой угла $\alpha \in [0, \pi]$ от $\text{pr}_{xy}(\bar{L}_1)$ к $\text{pr}_{xy}(\bar{L}_2)$, где $\text{pr}_{xy} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \Pi$ – ортогональная проекция. Тогда бесконечные прямые \bar{L}_i через L_i имеют параметрическую форму $(x, y, z) = (t \cos(\alpha/2), (-1)^i t \sin(\alpha/2), (-1)^i d/2)$ с $s \in \mathbb{R}$.

Точку O_i можно рассматривать как начало ориентированной бесконечной прямой \bar{L}_i . Пусть отрезок L_i имеет длину $l_i > 0$ и его начальная точка имеет координату $a_i \in \mathbb{R}$ на ориентированной прямой \bar{L}_i . Тогда второй конец вектора L_i имеет координату $b_i = a_i + l_i$. Чтобы запараметризовать только отрезок L_i , параметр t можно заменить на $a_i + l_i t, t \in [0, 1]$. Лемма 1 доказана.

Если $t \in \mathbb{R}$ в лемме 1, то соответствующая точка $L_i(t)$ движется вдоль всей прямой \bar{L}_i .

Лемма 2 (формулы для инвариантов). Пусть $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ – любые отрезки, не лежащие в одной плоскости и заданные начальной и конечной точками $A_i, B_i \in \mathbb{R}^3$ так, что $\mathbf{L}_i = \overline{A_i B_i}$, $i = 1, 2$. Тогда изометрические инварианты L_1, L_2 в лемме 1 вычисляются следующим образом:

$$\text{длины } l_i = |\overline{A_i B_i}|, \text{ расстояние } d = \frac{[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \overline{A_1 A_2}]}{|\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2|}, \text{ угол } \alpha = \arccos \frac{\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2}{l_1 l_2}, a_1 = \left(\frac{\mathbf{L}_2}{l_2} \cos \alpha - \frac{\mathbf{L}_1}{l_1} \right) \cdot \frac{\overline{A_1 A_2}}{\sin^2 \alpha},$$

$$a_2 = \left(\frac{\mathbf{L}_2}{l_2} - \frac{\mathbf{L}_1}{l_1} \cos \alpha \right) \cdot \frac{\overline{A_1 A_2}}{\sin^2 \alpha}, b_i = a_i + l_i, i = 1, 2.$$

Доказательство. Векторы \mathbf{L}_i вдоль данных отрезков имеют длины $l_i = |\mathbf{L}_i| = |\overline{A_i B_i}|$, $i = 1, 2$. Угол $\alpha \in [0, \pi]$ между $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2$ может быть найден из скалярного произведения $\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2 = |\mathbf{L}_1| \cdot |\mathbf{L}_2| \cos \alpha$ как $\alpha = \arccos \frac{\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2}{l_1 l_2}$, так как функция $\arccos x : [-1, 1] \rightarrow [0, \pi]$ является биективной. Поскольку векторы $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2$ непараллельны, то нормированное векторное произведение $\mathbf{e}_3 = \frac{\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2}{|\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2|}$ определено и ортогонально обоим векторам $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2$. Тогда $\mathbf{e}_1 = \frac{\mathbf{L}_1}{|\mathbf{L}_1|}$, $\mathbf{e}_2 = \frac{\mathbf{L}_2}{|\mathbf{L}_2|}$ и \mathbf{e}_3 имеют длины 1 и образуют линейный базис \mathbb{R}^3 , где последний вектор ортогонален первым двум.

Пусть O – любая неподвижная точка \mathbb{R}^3 , которую можно принять за начало координат $(0, 0, 0)$ в лемме 1, хотя ее положение относительно векторов $\overline{A_i B_i}$ еще не определено. Сначала выразим точки $O_i = (0, 0, (-1)^i d/2) \in \overline{L_i}$ с фиг. 1 в терминах данных векторов $\overline{A_i B_i}$. Если первый конец A_i имеет координату a_i на прямой $\overline{L_i}$, продолжающую отрезок L_i , то $\overline{O_i A_i} = a_i \mathbf{e}_i$ и

$$\overline{O_1 O_2} = \overline{O O_2} - \overline{O O_1} = (\overline{O A_2} - \overline{O_2 A_2}) - (\overline{O A_1} - \overline{O_1 A_1}) = \overline{A_1 A_2} + a_1 \mathbf{e}_1 - a_2 \mathbf{e}_2.$$

По определению 2 вектор $\overline{O_1 O_2}$ ортогонален прямой $\overline{L_i}$, проходящей через вектор $\mathbf{e}_i = \frac{\mathbf{L}_i}{|\mathbf{L}_i|}$ для $i = 1, 2$. Тогда произведение $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \overline{O_1 O_2}] = (\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) \cdot \overline{O_1 O_2}$ равно $|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2| d$, где $\overline{O_1 O_2}$ направлен по оси z , расстояние d – это z -координата O_2 минус z -координата O_1 . Смешанное произведение $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \overline{O_1 O_2}] = (\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) \cdot (\overline{A_1 A_2} + a_1 \mathbf{e}_1 - a_2 \mathbf{e}_2) = (\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) \cdot \overline{A_1 A_2}$ не зависит от параметров a_1, a_2 , потому что $\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2$ ортогональна к обоим $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$. Следовательно, расстояние равно $d = \frac{[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \overline{A_1 A_2}]}{|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2|} = \frac{[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \overline{A_1 A_2}]}{|\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2|}$, которое может быть положительным или отрицательным (см. фиг. 1).

Осталось найти координату a_i первого конца отрезка L_i относительно начала координат O_i в оси $\overline{L_i}$, $i = 1, 2$. Вектор $\overline{O_1 O_2} = \overline{A_1 A_2} + a_1 \mathbf{e}_1 - a_2 \mathbf{e}_2$ ортогонален к обоим \mathbf{e}_i тогда и только тогда, когда скалярные произведения равны нулю: $\overline{O_1 O_2} \cdot \mathbf{e}_i = 0$. Так как $|\mathbf{e}_1| = 1 = |\mathbf{e}_2|$ и $\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 = \cos \alpha$, получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 \cdot \overline{A_1 A_2} + a_1 - a_2 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) &= 0, \\ \mathbf{e}_2 \cdot \overline{A_1 A_2} + a_1 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) - a_2 &= 0, \\ \begin{pmatrix} 1 & -\cos \alpha \\ \cos \alpha & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} &= - \begin{pmatrix} \mathbf{e}_1 \cdot \overline{A_1 A_2} \\ \mathbf{e}_2 \cdot \overline{A_1 A_2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Определитель матрицы 2×2 равен $\cos^2 \alpha - 1 = -\sin^2 \alpha \neq 0$, так как L_1, L_2 не параллельны. Тогда

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sin^2 \alpha} \begin{pmatrix} -1 & \cos \alpha \\ -\cos \alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{e}_1 \cdot \overline{A_1 A_2} \\ \mathbf{e}_2 \cdot \overline{A_1 A_2} \end{pmatrix}.$$

Получаем формулы

$$a_1 = \frac{-\mathbf{e}_1 \cdot \overline{A_1 A_2} + \cos \alpha (\mathbf{e}_2 \cdot \overline{A_1 A_2})}{\sin^2 \alpha} = \frac{(\mathbf{e}_2 \cos \alpha - \mathbf{e}_1) \cdot \overline{A_1 A_2}}{\sin^2 \alpha} = \left(\frac{\mathbf{L}_2 \cos \alpha}{l_2} - \frac{\mathbf{L}_1}{l_1} \right) \cdot \frac{\overline{A_1 A_2}}{\sin^2 \alpha},$$

$$a_2 = \frac{\cos \alpha (\mathbf{e}_1 \cdot \overline{A_1 A_2}) - \mathbf{e}_1 \cdot \overline{A_1 A_2}}{\sin^2 \alpha} = \frac{(\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1 \cos \alpha) \cdot \overline{A_1 A_2}}{\sin^2 \alpha} = \left(\frac{\mathbf{L}_2}{l_2} - \frac{\mathbf{L}_1 \cos \alpha}{l_1} \right) \cdot \frac{\overline{A_1 A_2}}{\sin^2 \alpha}.$$

Координаты вторых концов получаются как $b_i = a_i + l_i$ для $i = 1, 2$. Лемма 2 доказана.

Следующая лемма гарантирует, что коэффициент зацепления ведет себя симметрично по d , значит, мы можем рассмотреть только один случай из двух $d > 0$ или $d < 0$.

Лемма 3 (симметрия). Пусть отрезки $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ параметризованы, как в лемме 1. При центральной симметрии $CS : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$ относительно начала координат $(0, 0, 0) \in \mathbb{R}^3$ отрезки сохраняют свои инварианты $\alpha, a_1, b_1, a_2, b_2$. Расстояние d и коэффициент зацепления меняют свои знаки: $\text{lk}(CS(L_1), CS(L_2)) = -\text{lk}(L_1, L_2)$.

Доказательство. При центральной симметрии CS в обозначениях леммы 2 векторы $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \overline{A_1 A_2}$ меняют свои знаки. Тогда формула для $\alpha, a_1, b_1, a_2, b_2$ дает то же выражение, но смешанное произведение $[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \overline{A_1 A_2}]$ и d меняют свои знаки.

Поскольку центральная симметрия CS является ортогональным отображением M с $\det M = -1$, новый коэффициент зацепления меняет свой знак следующим образом: $\text{lk}(CS(L_1), CS(L_2)) = \text{lk}(CS(L_2), CS(L_1)) = -\text{lk}(L_1, L_2)$, где мы также используем инвариантность коэффициента зацепления, когда отрезки меняются местами в теореме 1(f). Лемма доказана.

5. ИНВАРИАНТНАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ ОТРЕЗКОВ

В этом разделе доказывается основная теорема 2, которая выражает коэффициент зацепления двух отрезков в терминах их шести изометрических инвариантов из определения 2. В 2000 г. Клеин и Ланговски привели аналогичную, но чуть менее симметричную формулу (см. [5]), но не привели доказательства, что требует технических лемм ниже. Например, один из их шести инвариантов отличается от ориентированного расстояния d между ориентированными отрезками.

Теорема 2 (инвариантная формула). Для любых отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ с инвариантами $\alpha \in (0, \pi)$, $a_1, b_1, a_2, b_2, d \in \mathbb{R}$ из определения 2, имеем

$$\text{lk}(L_1, L_2) = \frac{\text{AT}(a_1, b_2; d, \alpha) + \text{AT}(b_1, a_2; d, \alpha) - \text{AT}(a_1, a_2; d, \alpha) - \text{AT}(b_1, b_2; d, \alpha)}{4\pi}, \tag{3}$$

где

$$\text{AT}(a, b; d, \alpha) = \arctg \left(\frac{ab \sin \alpha + d^2 \text{ctg} \alpha}{d \sqrt{a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha + d^2}} \right).$$

Для $\alpha = 0$ или $\alpha = \pi$, мы задаем $\text{AT}(a, b; d, \alpha) = \text{sign}(d)\pi/2$. Мы также считаем, что $\text{lk}(L_1, L_2) = 0$ в случае $d = 0$.

Выражение $a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha$ всегда неотрицательно как квадрат третьей стороны треугольника с первыми двумя сторонами a, b и углом α между ними. Также $a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha = 0$ только тогда, когда треугольник вырождается в случаях $a = \pm b$ и $\cos \alpha = \pm 1$. Для $\alpha = 0$ или $\alpha = \pi$, когда L_1, L_2 параллельны, $\text{lk}(L_1, L_2) = 0$ получается из $\text{AT}(a, b; d, \alpha) = \text{sign}(d)\pi/2 = 0$, когда $d = 0$ выполняется в дополнение к $\alpha = 0$ или $\alpha = \pi$.

Симметрия функции AT относительно a, b , т.е. $\text{AT}(a, b; d, \alpha) = \text{AT}(b, a; d, \alpha)$, подразумевает, что $\text{lk}(L_1, L_2) = \text{lk}(L_2, L_1)$ по теореме 2. Поскольку функция AT нечетна относительно d , т.е. $\text{AT}(a, b; -d, \alpha) = -\text{AT}(a, b; d, \alpha)$, лемма 3 также выполняется.

Доказательство следствия 1. По определению любые простые ортогональные отрезки L_1, L_2 имеют угол $\alpha = \pi/2$ и координаты первых концов $a_1 = 0 = a_2$, следовательно, $b_1 = l_1, b_2 = l_2$. Тогда

(3) дает $\text{AT}(0, l_2; d, \pi/2) = 0$, $\text{AT}(l_1, 0; d, \pi/2) = 0$, $\text{AT}(0, 0; d, \pi/2) = 0$. Окончательно, $\text{Ik}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi} \text{AT}(l_1, l_2; d, \alpha) = -\frac{1}{4\pi} \text{arctg} \left(\frac{l_1 l_2}{d\sqrt{l_1^2 + l_2^2 + d^2}} \right)$. Следствие 1 доказано.

На фиг. 2 показано, как функция $\text{AT}(a, b; d, \alpha)$ из теоремы 2 зависит от 2 из 4 инвариантов, когда остальные инварианты зафиксированы. Например, если угол $\alpha = \pi/2$ фиксирован, то $\text{AT}(a, b; d, \pi/2) = \text{arctg} \left(\frac{ab}{d\sqrt{a^2 + b^2 + d^2}} \right)$. Если также $a = b$, то поверхность $\text{AT}(a, a; d, \pi/2) = \text{arctg} \left(\frac{a^2}{d\sqrt{2a^2 + d^2}} \right)$ на фиг. 2а имеет горизонтальный хребет $\text{AT}(0, 0; d, \pi/2) = 0$ и $\lim_{d \rightarrow 0} \text{AT}(a, a; d, \pi/2) = \text{sign}(d)\pi/2$ для $a \neq 0$. Если d, α свободны, но $a = 0$, то $\text{AT}(0, 0; d, \alpha) = \text{arctg} \left(\frac{d^2 \text{ctg} \alpha}{d\sqrt{d^2}} \right) = \text{sign}(d) \text{arctg}(\text{ctg} \alpha) = \text{sign}(d)(\pi/2 - \alpha)$. Аналогично, $\lim_{d \rightarrow \infty} \text{AT}(0, 0; d, \alpha) = \text{sign}(d)(\pi/2 - \alpha)$ (см. линии $\text{AT} = \pi/2 - \alpha$ на границах поверхностей AT на фиг. 2в, г).

Лемма 4. $\text{Ik}(L_1, L_2)$ является интегралом по p, q . В обозначениях определения 2 имеем

$$\text{Ik}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi} \int_{a_1/d}^{b_1/d} \int_{a_2/d}^{b_2/d} \frac{\sin \alpha dp dq}{(1 + p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha)^{3/2}}$$

для $d > 0$.

Доказательство. Мы предполагаем, что $a_1, a_2, l_1, l_2, \alpha$ заданы и $t, s \in [0, 1]$;

$$L_1(t) = \left((a_1 + l_1 t) \cos \frac{\alpha}{2}, -(a_1 + l_1 t) \sin \alpha, -\frac{d}{2} \right),$$

$$L_2(s) = \left((a_2 + l_2 s) \cos \frac{\alpha}{2}, (a_2 + l_2 s) \sin \alpha, \frac{d}{2} \right),$$

$$\dot{L}_1(t) = \left(l_1 \cos \frac{\alpha}{2}, -l_1 \sin \frac{\alpha}{2}, 0 \right),$$

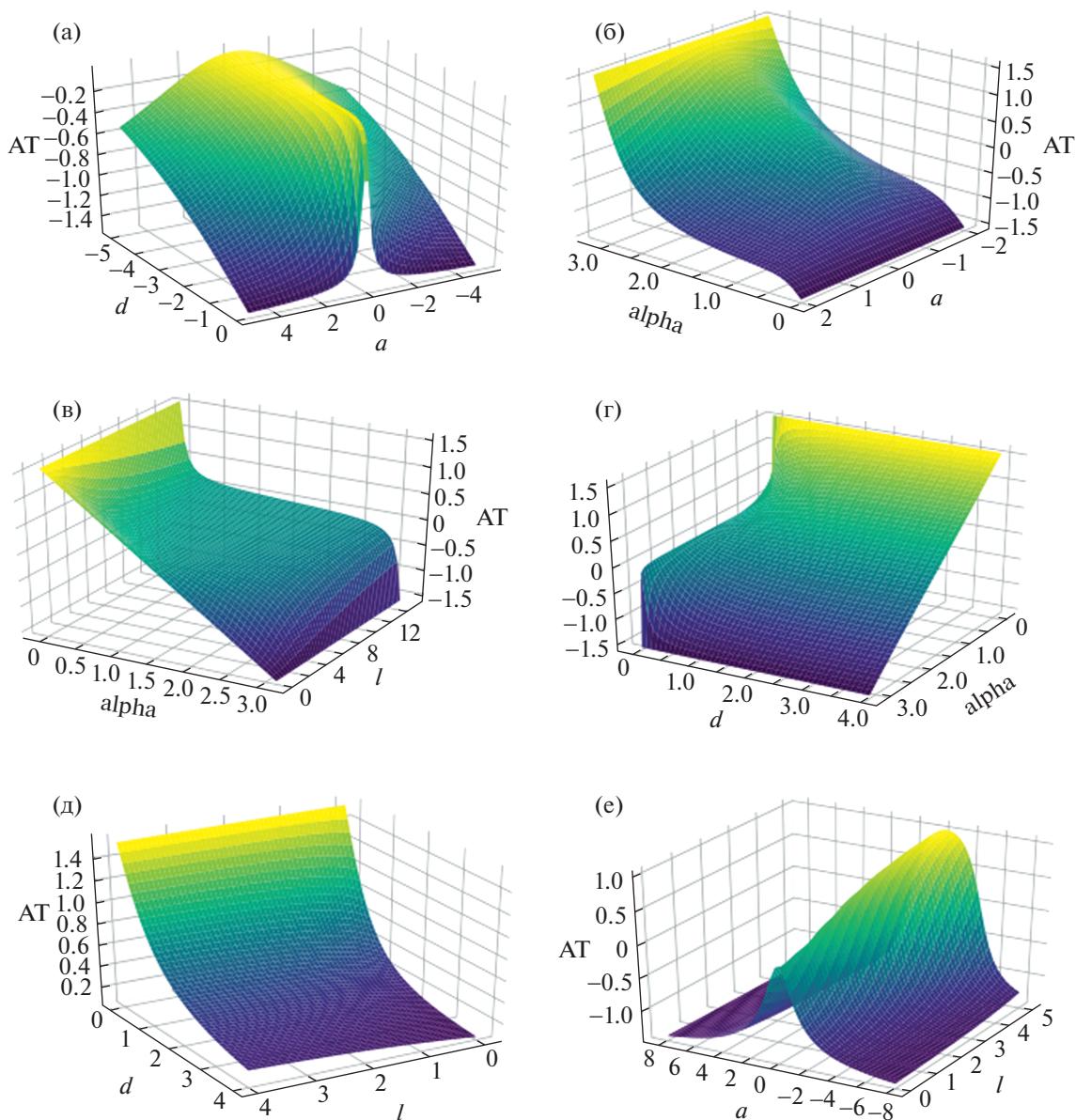
$$\dot{L}_2(s) = \left(l_2 \cos \frac{\alpha}{2}, l_2 \sin \frac{\alpha}{2}, 0 \right),$$

$$\dot{L}_1(t) \times \dot{L}_2(s) = \left(0, 0, 2l_1 l_2 \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \right) = (0, 0, l_1 l_2 \sin \alpha),$$

$$L_1(t) - L_2(s) = ((a_1 - a_2 + l_1 t - l_2 s) \cos \alpha, -(a_1 + a_2 + l_1 t + l_2 s) \sin \alpha, -d),$$

$$(\dot{L}_1(t), \dot{L}_2(s), L_1(t) - L_2(s)) = -dl_1 l_2 \sin \alpha,$$

$$\begin{aligned} \text{Ik}(L_1, L_2) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{(\dot{L}_1(t), \dot{L}_2(s), L_1(t) - L_2(s))}{|L_1(t) - L_2(s)|^3} dt ds = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{-dl_1 l_2 \sin \alpha dt ds}{\left(d^2 + (a_1 - a_2 + l_1 t - l_2 s)^2 \cos^2 \frac{\alpha}{2} + (a_1 + a_2 + l_1 t + l_2 s)^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right)^{3/2}} = \\ &= \frac{dl_1 l_2 \sin \alpha}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{dt ds}{\left(d^2 + (a_1 - a_2 + l_1 t - l_2 s)^2 \cos^2 \frac{\alpha}{2} + (a_1 + a_2 + l_1 t + l_2 s)^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right)^{3/2}}. \end{aligned}$$



Фиг. 2. Поверхность $AT(a, b, d, \alpha) = \text{arctg} \left(\frac{ab \sin \alpha + d^2 \text{ctg} \alpha}{d\sqrt{a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha + d^2}} \right)$, где 2 из 4 инвариантов фиксированы:
 (а) – $l = b - a = 0, \alpha = \pi/2$; (б) – $l = d = -1$; (в) – $a = 0, d = 1$; (г) – $a = 0, l = 1$; (д) – $a = 1, \alpha = \pi/2$; (е) – $d = -1, \alpha = \pi/2$.

Для упрощения последнего интеграла введем переменные $p = (a_1 + l_1t)/d$ и $q = (a_2 + l_2s)/d$. При новых переменных p, q выражение под степенью $3/2$ в знаменателе приобретает вид

$$\begin{aligned}
 & d^2 + (pd - qd)^2 \cos^2 \frac{\alpha}{2} + (pd + qd)^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} = \\
 & = d^2 \left(1 + (p^2 - 2pq + q^2) \cos^2 \frac{\alpha}{2} + (p^2 + 2pq + q^2) \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right) = \\
 & = d^2 \left(1 + p^2 \left(\cos^2 \frac{\alpha}{2} + \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right) + q^2 - 2pq \left(\cos^2 \frac{\alpha}{2} - \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right) \right) = \\
 & = d^2 (1 + p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha).
 \end{aligned}$$

Старые переменные выражаются как $t = (pd - a_1)/l_1$, $s = (qd - a_2)/l_2$ и имеют дифференциалы $dt = \frac{d}{l_1} dp$, $ds = \frac{d}{l_2} dq$. Поскольку $t, s \in [0, 1]$, новые переменные p, q меняются в интервалах $[a_1/d, b_1/d]$ и $[a_2/d, b_2/d]$ соответственно. Тогда мы получаем требуемое выражение:

$$\begin{aligned} \text{lk}(L_1, L_2) &= -\frac{dl_1 l_2 \sin \alpha}{4\pi} \int_{a_1/d}^{b_1/d} \int_{a_2/d}^{b_2/d} \frac{d^2 dpdq}{l_1 l_2 d^3 (1 + p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha)^{3/2}} = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_{a_1/d}^{b_1/d} \int_{a_2/d}^{b_2/d} \frac{\sin \alpha dpdq}{(1 + p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha)^{3/2}}. \end{aligned}$$

В силу леммы 3 вышеприведенные вычисления предполагают, что ориентированное расстояние $d > 0$. Лемма доказана.

Лемма 5 (коэффициент зацепления как одномерный интеграл). *В обозначениях определения 2 имеем*

$$\text{lk}(L_1, L_2) = \frac{I(a_2/d) - I(b_2/d)}{4\pi},$$

где функция $I(r)$ определяется как одномерный интеграл

$$I(r) = \int_{a_1/d}^{b_1/d} \frac{\sin \alpha (r - p \cos \alpha) dp}{(1 + p^2 \sin^2 \alpha) \sqrt{1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha}}$$

для $d > 0$.

Доказательство. Преобразуем выражение под степенью $3/2$ в лемме 4:

$$1 + p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha = 1 + p^2 \sin^2 \alpha + (q - p \cos \alpha)^2.$$

Подстановка $(q - p \cos \alpha)^2 = (1 + p^2 \sin^2 \alpha) \text{tg}^2 \psi$ для новой переменной ψ упрощает сумму квадратов до $1 + \text{tg}^2 \psi = 1/\cos^2 \psi$. Поскольку q изменяется в интервале $[a_2/d, b_2/d]$, для любого фиксированного $p \in [a_1/d, b_1/d]$, концы интервала $[\psi_0, \psi_1]$ из ψ удовлетворяют $\text{tg} \psi_0 = \frac{a_2/d - p \cos \alpha}{\sqrt{1 + p^2 \sin^2 \alpha}}$ и $\text{tg} \psi_1 = \frac{b_2/d - p \cos \alpha}{\sqrt{1 + p^2 \sin^2 \alpha}}$. Поскольку мы рассматриваем p, ψ как независимые переменные, то якобиан подстановки $(p, q) \mapsto (p, \psi)$ равен

$$\frac{\partial q}{\partial \psi} = \frac{\partial}{\partial \psi} (p \cos \alpha + \text{tg} \psi \sqrt{1 + p^2 \sin^2 \alpha}) = \frac{\sqrt{1 + p^2 \sin^2 \alpha}}{\cos^2 \psi}.$$

Для переменных p, ψ выражение под двойным интегралом в лемме 4 становится равным

$$\begin{aligned} \frac{\sin \alpha dpdq}{(1 + p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha)^{3/2}} &= \frac{\sin \alpha dp}{((1 + p^2 \sin^2 \alpha) + (1 + p^2 \sin^2 \alpha) \text{tg}^2 \psi)^{3/2}} \frac{\partial q}{\partial \psi} d\psi = \\ &= \frac{\sin \alpha dp}{(1 + p^2 \sin^2 \alpha)^{3/2} (1 + \text{tg}^2 \psi)^{3/2}} \frac{d\psi \sqrt{1 + p^2 \sin^2 \alpha}}{\cos^2 \psi} = \frac{\sin \alpha dp \cos \psi d\psi}{1 + p^2 \sin^2 \alpha}, \\ \text{lk} &= -\frac{1}{4\pi} \int_{a_1/d}^{b_1/d} \frac{\sin \alpha dp}{1 + p^2 \sin^2 \alpha} \int_{\psi_0}^{\psi_1} \cos \psi d\psi = \frac{1}{4\pi} \int_{a_1/d}^{b_1/d} \frac{\sin \alpha dp}{1 + p^2 \sin^2 \alpha} (\sin \psi_0 - \sin \psi_1). \end{aligned}$$

Мы можем выразить синусы углов ψ_0, ψ_1 в терминах тангенса как $\sin \psi_0 = \text{tg } \psi_0 / \sqrt{1 + \text{tg}^2 \psi_0}$. Используя $\text{tg } \psi_0 = (a_2/d - p \cos \alpha) / \sqrt{1 + p^2 \sin^2 \alpha}$, получаем

$$\sqrt{1 + \text{tg}^2 \psi_0} = \sqrt{\frac{(1 + p^2 \sin^2 \alpha) + (a_2/d - p \cos \alpha)^2}{1 + p^2 \sin^2 \alpha}} = \sqrt{\frac{1 + p^2 + (a_2/d)^2 - 2(a_2/d)p \cos \alpha}{1 + p^2 \sin^2 \alpha}},$$

$$\sin \psi_0 = \frac{a_2/d - p \cos \alpha}{\sqrt{1 + p^2 \sin^2 \alpha}} \sqrt{\frac{1 + p^2 \sin^2 \alpha}{1 + p^2 + (a_2/d)^2 - 2(a_2/d)p \cos \alpha}} = \frac{a_2/d - p \cos \alpha}{\sqrt{1 + p^2 + (a_2/d)^2 - 2(a_2/d)p \cos \alpha}}.$$

Тогда $\sin \psi_1$ имеет такое же выражение с a_2 , замененным на b_2 . Подставив эти выражения в предыдущую формулу для коэффициента зацепления, получаем

$$\text{lk}(L_1, L_2) = \frac{1}{4\pi} \int_{a_1/d}^{b_1/d} \frac{\sin \alpha dp}{1 + p^2 \sin^2 \alpha} \left(\frac{a_2/d - p \cos \alpha}{\sqrt{1 + p^2 + (a_2/d)^2 - 2(a_2/d)p \cos \alpha}} - \frac{b_2/d - p \cos \alpha}{\sqrt{1 + p^2 + (b_2/d)^2 - 2(b_2/d)p \cos \alpha}} \right) = \frac{I(a_2/d) - I(b_2/d)}{4\pi}$$

для

$$I(r) = \int_{a_1/d}^{b_1/d} \frac{\sin \alpha (r - p \cos \alpha) dp}{(1 + p^2 \sin^2 \alpha) \sqrt{1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha}}$$

Лемма 6 ($I(r)$ через arctg). Интеграл $I(r)$ в лемме 5 можно найти как

$$\int \frac{\sin \alpha (r - p \cos \alpha) dp}{(1 + p^2 \sin^2 \alpha) \sqrt{1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha}} = \text{arctg} \frac{pr \sin \alpha + \text{ctg } \alpha}{\sqrt{1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha}} + C.$$

Доказательство. Самый простой способ – дифференцировать $\text{arctg } \omega$ с дополнительной функцией $\omega = (pr \sin^2 \alpha + \cos \alpha) / \sin \alpha \sqrt{1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha}$ относительно переменной p , помня, что r, α – фиксированные параметры. Для упрощения обозначений мы используем вспомогательный символ для выражения под квадратным корнем: $R = 1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha$. Тогда $\omega = (pr \sin^2 \alpha + \cos \alpha) / \sin \alpha \sqrt{R}$ и

$$\begin{aligned} \frac{d\omega}{dp} &= \frac{1}{R \sin \alpha} \left(r \sin^2 \alpha \sqrt{R} - (pr \sin^2 \alpha + \cos \alpha) \frac{2p - 2r \cos \alpha}{2\sqrt{R}} \right) = \\ &= \frac{1}{R \sqrt{R} \sin \alpha} \left(r \sin^2 \alpha (1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha) - (pr \sin^2 \alpha + \cos \alpha) (p - r \cos \alpha) \right) = \\ &= \frac{rp^2 \sin^2 \alpha + r^3 \sin^2 \alpha - 2pr^2 \cos \alpha \sin^2 \alpha - rp^2 \sin^2 \alpha + pr^2 \cos \alpha \sin^2 \alpha - p \cos \alpha + r}{R \sqrt{R} \sin \alpha} = \\ &= \frac{r^3 \sin^2 \alpha - pr^2 \cos \alpha \sin^2 \alpha - p \cos \alpha + r}{R \sqrt{R} \sin \alpha} = \frac{(r - p \cos \alpha)(1 + r^2 \sin^2 \alpha)}{R \sqrt{R} \sin \alpha}, \\ \frac{d}{dp} \text{arctg } \omega &= \frac{1}{1 + \omega^2} \frac{d\omega}{dp} = \frac{(\sin \alpha \sqrt{R})^2}{(\sin \alpha \sqrt{R})^2 + (pr \sin^2 \alpha + \cos \alpha)^2} \frac{d\omega}{dp} = \\ &= \frac{R \sin^2 \alpha}{R \sin^2 \alpha + (p^2 r^2 \sin^4 \alpha + 2pr \sin^2 \alpha \cos \alpha + \cos^2 \alpha)} \frac{(r - p \cos \alpha)(1 + r^2 \sin^2 \alpha)}{R \sqrt{R} \sin \alpha} = \\ &= \frac{\sin \alpha}{\sqrt{R}} \frac{(r - p \cos \alpha)(1 + r^2 \sin^2 \alpha)}{\sin^2 \alpha (1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha) + (p^2 r^2 \sin^4 \alpha + 2pr \sin^2 \alpha \cos \alpha + \cos^2 \alpha)} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\sin \alpha (r - p \cos \alpha) (1 + r^2 \sin^2 \alpha)}{(1 + p^2 \sin^2 \alpha + r^2 \sin^2 \alpha + p^2 r^2 \sin^4 \alpha) \sqrt{R}} = \frac{\sin \alpha (r - p \cos \alpha) (1 + r^2 \sin^2 \alpha)}{(1 + p^2 \sin^2 \alpha) (1 + r^2 \sin^2 \alpha) \sqrt{R}} = \\ &= \frac{\sin \alpha (r - p \cos \alpha)}{(1 + p^2 \sin^2 \alpha) \sqrt{R}} = \frac{\sin \alpha (r - p \cos \alpha)}{(1 + p^2 \sin^2 \alpha) \sqrt{1 + p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha}}. \end{aligned}$$

Поскольку мы получили требуемое выражение под интегралом $I(r)$, лемма 6 доказана.

Доказательство теоремы 2. Рассмотрим правую часть уравнения в лемме 6 как функцию трех переменных $F(p, r; \alpha) = \operatorname{arctg} \left(\frac{pr \sin \alpha + \operatorname{ctg} \alpha}{\sqrt{1 + p^2 + r^2 - 2pr \cos \alpha}} \right)$. Функция в лемме 5 имеет вид $I(r) = F(b_1/d, r; \alpha) - F(a_1/d, r; \alpha)$. По лемме 5

$$\begin{aligned} \operatorname{lk} &= \operatorname{integral}_p \operatorname{lk}(L_1, L_2) = \\ &= \frac{(F(b_1/d, a_2/d; \alpha) - F(a_1/d, a_2/d; \alpha)) - (F(b_1/d, b_2/d; \alpha) - F(a_1/d, b_2/d; \alpha))}{4\pi}. \end{aligned}$$

Перепишем функцию из числителя выше следующим образом:

$$F(a/d, b/d; \alpha) = \operatorname{arctg} \frac{(ab/d^2) \sin \alpha + \operatorname{ctg} \alpha}{\sqrt{1 + (a/d)^2 + (b/d)^2 - 2(ab/d^2) \cos \alpha}} = \operatorname{arctg} \frac{ab \sin \alpha + d^2 \operatorname{ctg} \alpha}{d \sqrt{a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha + d^2}}.$$

Если обозначить последнее выражение как $\operatorname{AT}(a, b; d, \alpha)$, то из формулы (3) следует требуемый результат.

В леммах 4 и 5 и выше мы использовали, что ориентированное расстояние d положительно. По лемме 3 ориентированное расстояние d и $\operatorname{lk}(L_1, L_2)$ одновременно меняют свои знаки при центральной симметрии, в то время как все остальные инварианты остаются неизменными. Поскольку $\operatorname{AT}(a, b; -d, \alpha) = -\operatorname{AT}(a, b; d, \alpha)$ из-за нечетности функции arctan , то формула (3) справедлива для $d < 0$. Формула остается верной даже для $d = 0$, когда L_1, L_2 лежат в одной плоскости. В этом случае $\operatorname{lk}(L_1, L_2) = 0$ требует дополнительного обсуждения из-за разрывности коэффициента зацепления около значения $d = 0$ (см. ниже в следствии 4).

6. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ ОТРЕЗКОВ

В этом разделе рассматривается поведение коэффициента зацепления $\operatorname{lk}(L_1, L_2)$ в теореме 2 относительно шести инвариантов отрезков L_1, L_2 . На фиг. 3 показано, как коэффициент зацепления между двумя равными отрезками прямых изменяется для различных пар инвариантов.

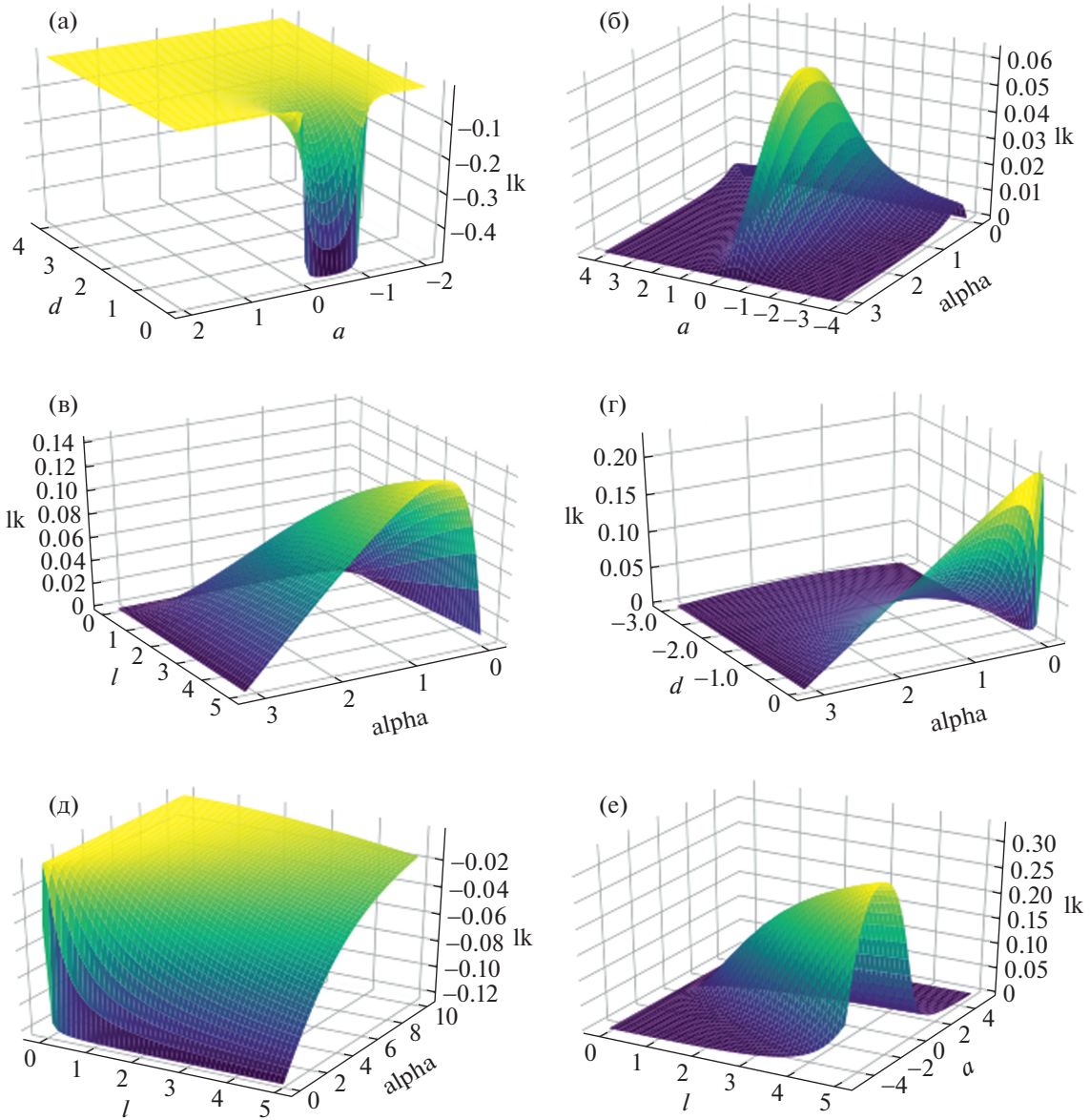
Следствие 2 (границы коэффициента зацепления). Для любых отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ коэффициент зацепления $\operatorname{lk}(L_1, L_2)$ находится между $\pm 1/2$.

Доказательство. По теореме 2 $\operatorname{lk}(L_1, L_2)$ — это сумма 4 функций AT , деленная на 4π . Так как каждая функция AT принимает значения строго между $\pm \pi/2$, то коэффициент зацепления находится между $\pm 1/2$. Следствие доказано.

Следствие 3 (знак коэффициента зацепления). В обозначениях определения 2 имеем $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \operatorname{lk}(L_1, L_2) = 0 = \lim_{\alpha \rightarrow \pi} \operatorname{lk}(L_1, L_2)$. Для любых непараллельных отрезков L_1, L_2 имеем $\operatorname{sign}(\operatorname{lk}(L_1, L_2)) = -\operatorname{sign}(d)$. Поэтому $\operatorname{lk}(L_1, L_2) = 0$ тогда и только тогда, когда $d = 0$ или $\alpha = 0$, или $\alpha = \pi$.

Доказательство. Если $\alpha = 0$ или $\alpha = \pi$, то $\operatorname{ctg} \alpha$ не определено, поэтому теорема 2 дополнительно задает $\operatorname{AT}(a, b; d, \alpha) = \operatorname{sign}(d)\pi/2$. Тогда $\operatorname{lk}(L_1, L_2) = \operatorname{sign}(d)(\pi/2)(1 + 1 - 1 - 1) = 0$.

Теорема 2 также требует $\operatorname{lk}(L_1, L_2) = 0$ для $d = 0$. Если $d \neq 0$ и $\alpha \rightarrow 0$ в интервале $[0, \pi]$, а все остальные параметры остаются фиксированными, то $d^2 \operatorname{ctg} \alpha \rightarrow +\infty$. Следовательно, каждая из 4 функций AT в теореме 2 приближается к $d\pi/2$, поэтому $\operatorname{lk}(L_1, L_2) \rightarrow 0$. Аналогичный вывод следует и в случае $\alpha \rightarrow \pi$, когда $d^2 \operatorname{ctg} \alpha \rightarrow -\infty$.



Фиг. 3. Коэффициент зацепления $lk(a, a + l; a, a + l; d, \alpha)$ из формулы (3), где 2 из 4 инвариантов фиксированы: (а) $-l = 1, \alpha = \pi/2$; (б) $-l = 1, d = -1$; (в) $-a = 0, d = 1$; (г) $-a = 0, l = 1$; (д) $-a = 0, \alpha = \pi/2$; (е) $-d = -1, \alpha = \pi/2$.

Если L_1, L_2 не параллельны, то угол α между ними принадлежит интервалу $(0, \pi)$. Если $d > 0$, лемма 4 утверждает, что

$$lk(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi} \int_{a_1/d}^{b_1/d} \int_{a_2/d}^{b_2/d} \frac{\sin \alpha dpdq}{(1 + p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha)^{3/2}}.$$

Так как функция под интегралом строго положительна, то $lk(L_1, L_2) < 0$. По лемме 3 оба $lk(L_1, L_2)$ одновременно меняют свои знаки под действием центральной симметрии. Следовательно, формула $\text{sign}(lk(L_1, L_2)) = -\text{sign}(d)$ имеет место для всех d , включая $d = 0$. Следствие доказано.

Следствие 4 (lk для $d \rightarrow 0$). Если расстояние $d \rightarrow 0$ и кривые L_1, L_2 остаются непересекающимися, то выражение в формуле (3) ведет себя непрерывно, поэтому $\lim_{d \rightarrow 0} lk(L_1, L_2) = 0$. Если

$d \rightarrow 0$ и внутренности отрезков L_1, L_2 пересекаются в предельном случае $d = 0$, то $\lim_{d \rightarrow 0} \text{lk}(L_1, L_2) = -\text{sign}(d)/2$, где $d \rightarrow 0$ сохраняет свой знак.

Доказательство. Напомним, что $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \text{arctg } x = \pm\pi/2$. По следствию 3 предположим, что $\alpha \neq 0$, $\alpha \neq \pi$, так что $\alpha \in (0, \pi)$. Тогда $\sin \alpha > 0$, $a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha > (a - b)^2 \geq 0$ и

$$\lim_{d \rightarrow 0} \text{AT}(a, b; d, \alpha) = \lim_{d \rightarrow 0} \text{arctg} \left(\frac{ab \sin \alpha + d^2 \text{ctg } \alpha}{d\sqrt{a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha + d^2}} \right) = \text{sign}(a)\text{sign}(b)\text{sign}(d) \frac{\pi}{2},$$

и теорема 2 дает

$$\lim_{d \rightarrow 0} \text{lk}(L_1, L_2) = \frac{\text{sign}(d)}{8} (\text{sign}(a_1) - \text{sign}(b_1))(\text{sign}(b_2) - \text{sign}(a_2)).$$

В предельном случае $d = 0$ отрезки прямых $L_1, L_2 \subset \{z = 0\}$ остаются непересекающимися в одной плоскости тогда и только тогда, когда обе координаты конечных точек a_i, b_i имеют одинаковый знак хотя бы для одного из $i = 1, 2$, что эквивалентно $\text{sign}(a_i) - \text{sign}(b_i) = 0$, т.е. $\lim_{d \rightarrow 0} \text{lk}(L_1, L_2) = 0$ из произведения выше. Следовательно, формула (3) непрерывна при $d \rightarrow 0$ для любых непересекающихся отрезков. Любые отрезки, пересекающиеся в плоскости $\{z = 0\}$ при $d = 0$, имеют координаты конечных точек $a_i < 0 < b_i$ для обоих $i = 1, 2$ и имеют предел

$$\lim_{d \rightarrow 0} \text{lk}(L_1, L_2) = \frac{\text{sign}(d)}{8} (-1 - 1)(1 - (-1)) = -\frac{\text{sign}(d)}{2} \text{ в соответствии с требованиями.}$$

Следствие 5 (lk для $d \rightarrow \pm\infty$). Если расстояние $d \rightarrow \pm\infty$, то $\text{lk}(L_1, L_2) \rightarrow 0$.

Доказательство. Если $d \rightarrow \pm\infty$, а остальные инварианты отрезков L_1, L_2 остаются фиксированными, то функция

$$\text{AT}(a, b; d, \alpha) = \text{arctg} \left(\frac{ab \sin \alpha + d^2 \text{ctg } \alpha}{d\sqrt{a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha + d^2}} \right)$$

из теоремы 2 имеет предел $\text{arctg}(\text{sign}(d) \text{ctg } \alpha) = \text{sign}(d)(\pi/2 - \alpha)$. Поскольку четыре функции AT в теореме 2 включают одни и те же значения d, α , их пределы аннулируют друг друга, поэтому $\text{lk}(L_1, L_2) \rightarrow 0$. Следствие доказано.

Следствие 6 (lk для $a_i, b_i \rightarrow \infty$). Если инварианты d, α отрезков прямых $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ остаются фиксированными, но $a_i \rightarrow +\infty$ или $b_i \rightarrow -\infty$ для каждого $i = 1, 2$, то $\text{lk}(L_1, L_2) \rightarrow 0$.

Доказательство. Если $a_i \rightarrow +\infty$, то $a_i \leq b_i \rightarrow +\infty$, $i = 1, 2$. Если $b_i \rightarrow -\infty$, то $b_i \geq a_i \rightarrow -\infty$, $i = 1, 2$. Рассмотрим первый случай $a_i \rightarrow +\infty$, второй аналогичен. Так как d, α фиксированы, то $a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha + d^2 \leq (a + b)^2 + d^2 \leq 5b^2$ для достаточно больших b . Поскольку $\text{arctg}(x)$ увеличивается,

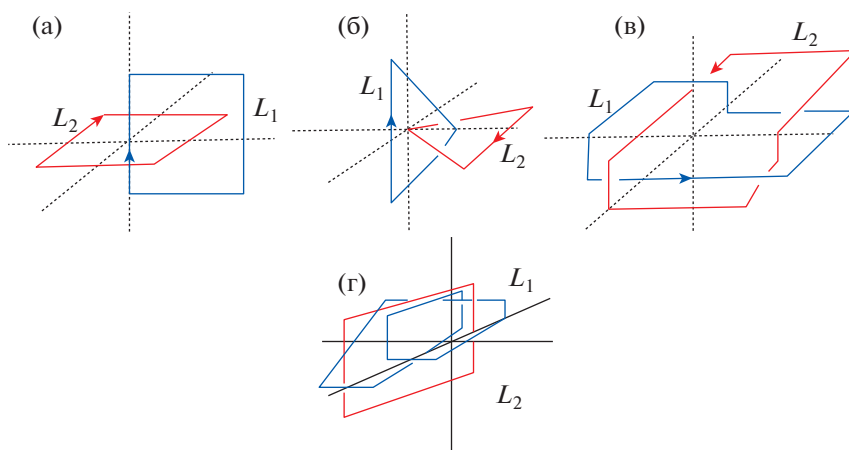
$$\text{AT}(a, b; d, \alpha) \geq \text{arctg} \left(\frac{ab \sin \alpha + d^2 \text{ctg } \alpha}{db\sqrt{5}} \right) \rightarrow \text{sign}(d) \frac{\pi}{2},$$

как $b \geq a \rightarrow +\infty$. Поскольку четыре функции AT в теореме 2 имеют один и тот же предел, когда их первые два аргумента стремятся к $+\infty$, эти 4 предела аннулируют друг друга, поэтому $\text{lk}(L_1, L_2) \rightarrow 0$.

Следствие 7 (lk для $a_i \rightarrow b_i$). Если один из отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ становится бесконечно коротким так, что его второй конец стремится к фиксированному первому концу (или наоборот), а все остальные инварианты L_1, L_2 из определения 2 остаются фиксированными, то $\text{lk}(L_1, L_2) \rightarrow 0$.

Доказательство. Покажем, что $\text{lk}(L_1, L_2) = 0$ для $d = 0$. Достаточно рассмотреть случай $d \neq 0$. Тогда функция

$$\text{AT}(a, b; d, \alpha) = \text{arctg} \left(\frac{ab \sin \alpha + d^2 \text{ctg } \alpha}{d\sqrt{a^2 + b^2 - 2ab \cos \alpha + d^2}} \right)$$



Фиг. 4. (а) – Зацепление Хопфа в виде двух квадратных циклов имеет $lk = -1$ и вершины с координатами $L_1 = (-2, 0, -2), (2, 0, -2), (2, 0, 2), (-2, 0, 2), L_2 = (-1, -2, 0), (-1, 2, 0), (1, 2, 0), (1, -2, 0)$. (б) – Зацепление Хопфа из треугольных циклов $L_1 = (-1, 0, -1), (-1, 0, 1), (1, 0, 0)$ и $L_2 = (0, 0, 0), (2, 1, 0), (2, -1, 0)$ имеет $lk = +1$. (в) – Зацепление Соломона из ломаных $L_1 = (-1, 1, 1), (-1, -1, 1), (3, -1, 1), (3, 1, -1), (1, 1, -1), (1, 1, 1)$ и $L_2 = (0, -2, -2), (0, -2, 0), (2, 2, 0), (2, 0, 0), (0, 2, 0), (2, 0, 0), (2, 0, -2), (2, -2, -2), (0, -2, -2)$ имеет $lk = +2$. (г) – Зацепление Уайтхеда с вершинами $L_1 = (-1, 0, 1), (1, 0, 1), (0, 0, -2), (0, 1, -2), (-1, 1, -2), (-2, -1, 3), (1, -1, 3), (-1, 0, -3), (-1, 2, -3), (-1, 2, 1)$ и $L_2 = (0, -2, -1), (0, 2, -1), (0, 2, 2), (0, -2, 2)$ имеет $lk = 0$.

является непрерывной. Допустим, что (например, для $i = 1$) $a_1 \rightarrow b_1$, случай $b_1 \rightarrow a_1$ аналогичен. Из непрерывности АТ следует, что $AT(a_1, b_2; d, \alpha) \rightarrow AT(b_1, b_2; d, \alpha)$ и $AT(a_1, a_2; d, \alpha) \rightarrow AT(b_1, a_2; d, \alpha)$. В пределе все члены в теореме 2 исчезают, следовательно, $lk(L_1, L_2) \rightarrow 0$.

7. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ ДЛЯ ЛОМАНЫХ

Если кривые $\gamma_1, \gamma_2 \subset \mathbb{R}^3$ состоят из прямых отрезков, то $lk(\gamma_1, \gamma_2)$ можно вычислить как сумму $lk(L_1, L_2)$ по всем парам отрезков $L_1 \subset \gamma_1$ и $L_2 \subset \gamma_2$. В [7] приведено сложное доказательство того, что эта сумма сходится для кубической решетки. Вопрос о сходимости периодических коэффициентов зацепления для произвольных решеток остается открытым.

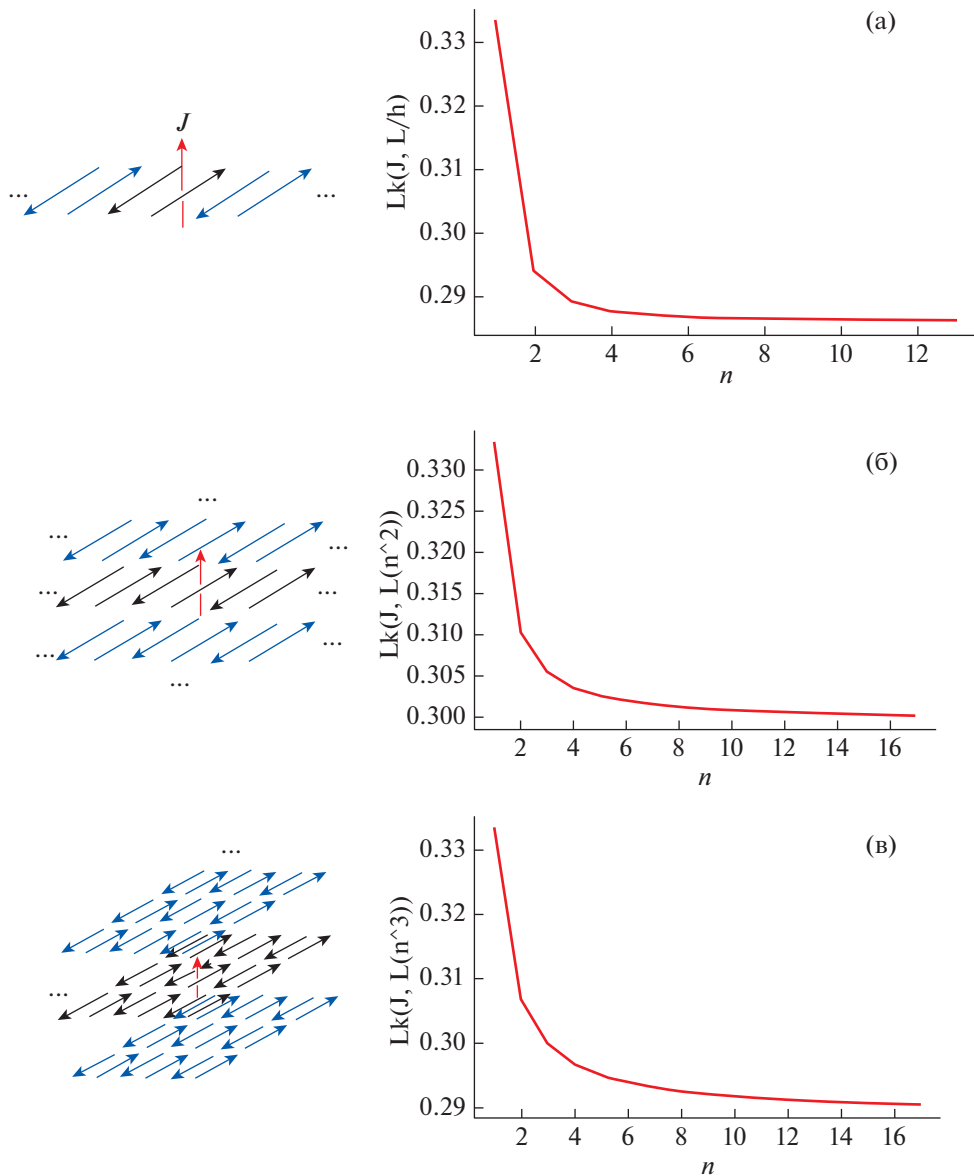
На фиг. 4 показаны ломаные, коэффициенты зацеплений которых были вычислены нашим кодом в Питоне по формуле (3) (см. сайт https://github.com/MattB-242/Closed_Lk_Form).

Для всех зацеплений на фиг. 4 формула (3) вычисляет коэффициент зацепления между двумя компонентами как равный -1 и $+1$ соответственно в ориентациях, указанных на фиг. 4, с ошибкой вычисления менее 10^{-12} .

Асимптотический коэффициент зацепления, введенный Арнольдом, сходится для бесконечно длинных кривых (см. [14]), в то время как нашей мотивацией было вычисление геометрических и топологических инвариантов для классификации периодических структур, таких как текстильные (см. [15]) и кристаллические структуры (см. [8]).

Теорема 2 позволяет нам вычислить *периодический* коэффициент зацепления между отрезком J и растущей конечной решеткой L_n , элементарная ячейка которой состоит из n копий двух противоположно ориентированных отрезков, ортогональных J . Этот периодический коэффициент зацепления вычисляется для возрастающего параметра n в решетке, периодически расширяющейся в одном, двух и трех направлениях (см. фиг. 5). С увеличением n функция lk асимптотически приближается к приближенному значению 0.30 для 1- и 3-периодической решетки и 0.29 для 2-периодической решетки.

Формула, основанная на шести инвариантах, позволила нам доказать новые асимптотические результаты для коэффициента зацепления, приведенные в следствиях 2–7 разд. 6. Поскольку периодический коэффициент зацепления является вещественным инвариантом изометрии, его можно использовать для непрерывной количественной оценки сходства между периодиче-



Фиг. 5. Слева: отрезок прямой $J = (0, 0, -1) + t(0, 0, 2)$ красного цвета и периодическая решетка $L(n^k)$, полученная из n копий “элементарной ячейки” $L = \{(-1, -1, 0) + t(0, 2, 0), (-1, 1, 0) + s(0, -2, 0)\}$, $t, s \in [0, 1]$, перенесенных в k линейно независимых направлениях для $n \in \mathbb{Z}$. Справа: периодический коэффициент зацепления $Lk(J, L(n^k))$ быстро сходится для $n \rightarrow +\infty$ при $k = 1$ (а), $k = 2$ (б), $k = 3$ (в).

скими кристаллическими сетями (см. [8]). Следующий возможный шаг – использовать формулу (3) для доказательства асимптотической сходимости периодического коэффициента зацепления для произвольных решеток, чтобы показать, что предел бесконечной суммы является изометрическим инвариантом, который может быть использован для сравнения кристаллических структур.

Инварианты Милнора обобщают коэффициент зацепления на инварианты связей с более чем двумя компонентами. Интеграл для трехкомпонентного инварианта Милнора (см. [16]) может быть вычислен в замкнутой форме аналогично теореме 2. Интересной открытой проблемой является распространение подхода, основанного на изометрии, на более тонкие инварианты узлов.

Однако есть и приложения в самой теории узлов. Интеграл Гаусса в (1) был расширен до бесконечного интеграла Концевича, содержащего все конечные инварианты Васильева узлов

(см. [17]). Коэффициенты этого бесконечного ряда были явно описаны (см. [18]) как решения экспоненциальных уравнений с некоммутативными переменными x, y в сжатой форме с точностью до коммутаторов от коммутаторов в x, y . Главная метабелева формула для $\ln(e^x e^y)$ нашла более простое доказательство (см. [19]) в виде порождающего ряда по переменным x, y .

8. ВЫВОДЫ И ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ОБОБЩЕНИЯ НА ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

В данной работе было представлено подробное доказательство аналитической формулы для коэффициента зацепления, основанной на шести инвариантах изометрии, которые однозначно определяют относительное положение двух отрезков в \mathbb{R}^3 . Хотя подобная формула была заявлена в [5], доказательство не было приведено. Поэтому данная статья заполняет важный пробел в литературе, дополняя ранее отсутствующее доказательство с помощью сложных лемм 4–6 в разд. 5.

Мотивацией для нас послужило обнаружение взаимопроникающих кристаллических сетей (см. [8]). Твердые кристаллические материалы (кристаллы) – это периодические структуры, которые определяются в жесткой форме и могут быть естественно классифицированы с точностью до изометрии, сохраняющей все межатомные расстояния. Изометрические инварианты из Топологического Анализа Данных оказались значительно слабее, чем предполагалось ранее (см. [20]). Первый полный инвариант изометрии кристаллов был найден в [21]. Более сложной проблемой является разработка непрерывной метрики между кристаллами. Приближенные метрики между решетками любой размерности были определены в [22], которая инициировала новую область периодической геометрии (см. [23]). И классификационные, и метрические проблемы могут быть объединены в более важную с практической точки зрения задачу непрерывной параметризации всех кристаллов. Такие параметризации были недавно описаны для решеток размерности два (см. [24], [25]) и три (см. [26], [27]). Для кристаллов общего вида наиболее простыми полными инвариантами являются точечные распределения расстояний (см. [28]), чьи более простые средние значения (см. [29]) достаточны для предсказания энергии кристаллов в пределах 5 кДж/моль (см. [30]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bright M., Anosova O., Kurlin V.* A proof of the invariant-based formula for the linking number and its asymptotic behaviour. In *Proceed. of Numerical Geometry, Grid Generation and Scientific Computing, 2020*. URL: <https://arxiv.org/abs/2011.04631>.
2. *Gauss C.F.* Integral formula for linking number. *Zur mathematischen theorie der electrodynamische wirkungen, Collected Works, 1833*. P. 605.
3. *Ahmad R., Paul S., Basu S.* Characterization of entanglements in glassy polymeric ensembles using the gaussian linking number // *Phys. Rev. E. 2020. V. 101. № 2. P. 022503*.
4. *Banchoff T.* Self-linking numbers of space polygons // *Indiana U. Math. J. 1976. V. 25. P. 1171–1188*.
5. *Klenin K., Langowski J.* Computation of writhe in modeling of supercoiled dna // *Biopolymers: Original Res. on Biomolecules. 2000. V. 54. № 5. P. 307–317*.
6. *Vologodskii A.V., Anshelevich V.V., Lukashin A.V., Frank-Kamenetskii M.D.* Statistical mechanics of supercoils and the torsional stiffness of the dna double helix // *Nature. 1974. V. 280. № 5720. P. 294–298*.
7. *Panagiotou E.* The linking number in systems with periodic boundary conditions // *J. Comput. Phys. 2015. V. 300. P. 533–573*.
8. *Cui P., McMahon D., Spackman P., Alston B., Little M., Day G., Cooper A.* Mining predicted crystal structure landscapes with high throughput crystallisation: old molecules, new insights // *Chemic. Sci. 2019. V. 10. P. 9988–9997*.
9. *Ricca R.L., Nipoti B.* Gauss' linking number revisited // *J. of Knot Theory and Its Ramifications. 2011. V. 20. № 10. P. 1325–1343*.
10. *Maxwell J.C.* A treatise on electricity and magnetism // *Nature. 1873. V. 7. № 182. P. 478–480*.
11. *Arai Z.* A rigorous numerical algorithm for computing the linking number of links // *Nonlin. Theory and Its Appl. 2013. V. 4. № 1. P. 104–110*.
12. *Bertolazzi E., Ghiloni R., Specogna R.* Efficient computation of linking number with certification, 2019. URL: <https://arxiv.org/abs/1912.13121>.
13. *Panagiotou E., Kauffman L.H.* Knot polynomials of open and closed curves // *Proc. A. 2020. V. 476. № 2240. P. 20200124*. URL: <https://arxiv.org/abs/2001.01303>.
14. *Vogel T.* On the asymptotic linking number // *Proc. Am. Math. Soc. 2003. V. 131. P. 2289–2297*.

15. *Bright M., Kurlin V.* Encoding and topological computation on textile structures // *Comput. and Graphic.* 2020. V. 90. P. 51–61.
16. *DeTurck D., Gluck H., Komendarczyk R., Melvin P., Shonkwiler C., Vela-Vick D.* Pontryagin invariants and integral formulas for milnor’s triple linking number. URL: <https://arxiv.org/abs/1101.3374>.
17. *Kontsevich M.* Vassiliev’s knot invariants // *Adv. Sov. Math.* 1993. V. 16. P. 137–150.
18. *Kurlin V.* Compressed Drinfeld associators // *J. of Algebra.* 2005. V. 292. P. 184–242.
19. *Kurlin V.* The Baker-Campbell-Hausdorff formula in the free metabelian lie algebra // *J. of Lie Theory.* 2007. V. 17. № 3. P. 525–538.
20. *Smith P., Kurlin V.* Families of point sets with identical 1D persistence. 2022. URL: <https://arxiv.org/abs/2202.00577>.
21. *Anosova O., Kurlin V.* An isometry classification of periodic point sets. In *Proceed. of Discrete Geometry and Mathematical Morphology*, 2021.
22. *Mosca M., Kurlin V.* Voronoi-based similarity distances between arbitrary crystal lattices // *Crystal Res. and Tech.* 2020. V. 55. № 5. P. 1900197.
23. *Anosova O., Kurlin V.* Introduction to periodic geometry and topology, 2021. URL: <https://arxiv.org/abs/2103.02749>.
24. *Kurlin V.* Mathematics of 2-dimensional lattices. 2022. URL: <https://arxiv.org/abs/2201.05150>.
25. *Bright M., Cooper A.I., Kurlin V.* Easily computable continuous metrics on the space of isometry classes of 2-dimensional lattices, 2021. URL: <https://arxiv.org/abs/2109.10885>.
26. *Kurlin V.* A complete isometry classification of 3-dimensional lattices. 2022. URL: <https://arxiv.org/abs/2201.10543>.
27. *Bright M., Cooper A., Kurlin V.* A complete and continuous map of the lattice isometry space for all 3-dimensional lattices, 2021. URL: <https://arxiv.org/abs/2109.11538>.
28. *Widdowson D., Kurlin V.* Pointwise distance distributions of periodic sets, 2021. URL: <https://arxiv.org/abs/2108.04798>.
29. *Widdowson D., Mosca M., Pulido A., Kurlin V., Cooper A.* Average minimum distances of periodic point sets // *MATCH Communicat. in Math. and in Comput. Chem.* 2022. V. 87. P. 529–559. URL: <https://arxiv.org/abs/2009.02488>.
30. *Ropers J., Mosca M.M., Anosova O., Kurlin V., Cooper A.* Fast predictions of lattice energies by continuous isometry invariants of crystal structures. In *Proceed. of DACOMSIN*, 2021. URL: <https://arxiv.org/abs/2108.07233>.