

Univerzita Karlova v Praze
Pedagogická fakulta
Katedra matematiky a didaktiky matematiky

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Úvod do teorie uzlů, její problémy a aplikace

Maryia Kapytka

vedoucí práce: Mgr. Michal Zamboj, Ph.D.
studijní program: Specializace v pedagogice
studijní obor: Matematika se zaměřením na
vzdělávání

Praha 2022

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci na téma Úvod do teorie uzlů, její problémy a aplikace vypracovala pod vedením vedoucího bakalářské práce samostatně za použití v práci uvedených pramenů a literatury. Dále prohlašuji, že tato bakalářská práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

V Praze dne 10.7.2022

Chci poděkovat vedoucímu své bakalářské práce Mgr. Michalu Zambojovi, Ph.D. za čas, vstřícnost i cenné rady, a také své rodině a kamarádům za podporu.

Abstrakt

Práce se zabývá matematickou teorií uzlů, její historií, základními pojmy a aplikacemi v různých vědách.

První kapitola se věnuje vzniku teorie uzlů, fyzikální motivaci a modernímu stavu matematické teorie uzlů. Mluví i o vědcích, kteří se věnovali teorii uzlů.

Druhá kapitola se zabývá základními pojmy teorie uzlů: uzel, spojení uzlů, uzlový diagram a spojovací číslo. Obsahuje v sobě i mnoho příkladů uzlů a jejich spojení. Tato kapitola se věnuje i různým transformacím uzlů: elementárním a Reidemesterovým pohybům.

Třetí kapitola je o uzlových polynomech. Základními uzlovými polynomy jsou Alexandrovův, Alexandrovův-Conwayův a Jonesův, v kapitole jsou zmíněny i některé další. Uzlové polynomy se nemění transformacemi uzlů. Jsou důležité, protože dokážou rozlišovat mezi uzly.

Ve čtvrté kapitole probíhá diskuze o aplikacích teorie uzlů v různých vědách: v biologii, chemii a fyzice. V biologii připomíná DNA svým tvarem uzel, takže je užitečné tyto molekuly zkoumat pomocí teoretických nástrojů teorie uzlů. Molekuly ve tvaru uzlů mohou mít odlišné vlastnosti v porovnání s nezauzlenými molekulami, takže jsou pro chemiky důležité různé způsoby syntézy zauzlených molekul. Chiralita molekuly určuje její chemické vlastnosti, také může být určena pomocí nástrojů teorie uzlů. Co se týče fyziky, teorie uzlů našla svoje využití ve statistické mechanice, dokáže totiž popsat různé rovnice a vztahy z této oblasti fyziky.

Klíčová slova

teorie uzlů, uzlové polynomy, Reidemeisterovy pohyby

Abstract

The thesis deals with mathematical knot theory, its history, basic concepts and applications in various sciences.

The first chapter discusses the origin of knot theory, the physical motivation and the modern state of mathematical knot theory. It also talks about the scientists who have worked on knot theory.

The second chapter deals with the basic concepts of knot theory: knot, link, knot diagram and connection number. It also includes many examples of knots and their links. This chapter also discusses various transformations of knots: elementary and Reidemeister motions.

The third chapter is about knot polynomials. The basic knot polynomials are the Alexander, Alexander-Conway, and Jones polynomials, and some others are mentioned in the chapter. Knot polynomials do not change by transformations of nodes. They are important because they can distinguish between knots.

The fourth chapter discusses applications of knot theory in various sciences: biology, chemistry, and physics. In biology, DNA resembles a knot in shape, so it is useful to study these molecules using the theoretical tools of knot theory.

Knot-shaped molecules can have different properties compared to non-knotted molecules, so different ways of synthesising knotted molecules are important to chemists. The chirality of a molecule determines its chemical properties; it can also be determined using the tools of knot theory. As far as physics is concerned, knot theory has found its application in statistical mechanics, as it can describe various equations and relationships in this area of physics.

Keywords

knot theory, knot polynomials, Reidemeister moves

Obsah

Úvod	2
1 Historie teorie uzlů	3
1.1 Začátek teorie uzlů	3
1.2 Fyzikální motivace	5
1.3 Moderní matematická teorie uzlů	9
2 Základní pojmy teorie uzlů	11
2.1 Uzel	11
2.2 Uzlový diagram	11
2.3 Příklady uzlů	11
2.4 Elementární pohyby uzlu	14
2.5 Reidemeisterovy pohyby	14
2.6 Spojení uzlů	16
2.7 Spojovací číslo	17
3 Uzlové polynomy	20
3.1 Alexandrův polynom	20
3.1.1 Výpočet Alexandrova polynomu	21
3.2 Alexandrův-Conwayův polynom	25
3.2.1 Výpočet Alexandrova-Conwayova polynomu	26
3.3 Jonesův polynom	28
3.3.1 Výpočet Jonesova polynomu	30
3.4 Další uzlové polynomy	31
4 Aplikace	33
4.1 DNA	33
4.2 Syntéza zauzlených molekul	34
4.3 Chiralita	38
4.3.1 Zkoumání chiralit	39
4.4 Uzly a statistická mechanika	41
Závěr	44
Seznam použité literatury	45
Seznam obrázků	46

Úvod

Většina z vás si představí matematiku jako něco velmi obtížného, co vůbec není pochopitelné pro člověka, který se matematikou nezabývá. Je totiž obtížné všimnout si krásu matematických vzorečků a vět bez důsledného pochopení příslušné teorie.

Ale jsou matematické oblasti, které se dají vysvětlit tak, aby byly pochopitelné i pro neoborníky. Třeba teorie čísel, geometrie, teorie pravděpodobnosti patří k matematickým oddílům, o kterých se dá dočíst ve spoustě vědecko-populárních knih. Dalším příkladem náročné matematické teorie, kterou dokáže pochopit i laik, je matematická teorie uzlů.

Uzly jsou něco, s čím se setkáváme v každodenním životě. Ale málokdo si uvědomuje, že ve skutečnosti je to rozsáhlá matematická teorie s velkým množstvím aplikací v různých oblastech – od medicíny až k fyzice. Aplikace teorie uzlů se objevily poměrně nedávno, v průběhu posledních padesáti let, ale už teď mají obrovský vliv. Tato věda nestojí na místě, existuje spousta otevřených otázek, na které se v současné době pokouší odpovědět matematici z celého světa.

Tato oblast matematiky však není nová, matematická teorie uzlů vznikla už dávno, více než před sto lety. Je to rozsáhlá teorie na rozmezí dalších matematických oblastí: algebry, topologie, diferenciální geometrie a algebraické topologie.

Tato práce je určena především pro středoškoláky i jiné zájemce, kteří rozumí základům středoškolské matematiky a chtějí se dozvědět něco o matematické teorii uzlů. V práci si na začátku uvedeme základní pojmy z teorie uzlů. Potom se podíváme na různé uzlové polynomy. Na konci se zaměříme na aplikace teorie uzlů v různých vědách.

1. Historie teorie uzlů

1.1 Začátek teorie uzlů

Uzly byly středem zájmu lidí již od pravěku. Prvním historickým příkladem je pečeť z roku 1700 př. n. l. nalezená v Anatolii, na které jsou zobrazeny copánky a uzly. Nejčasnější objev uzlů je však připisován řeckému lékaři Heraklasovi, který žil v prvním století našeho letopočtu. Heraklas napsal esej, ve kterém vysvětluje osmnáct způsobů, jak vázat ramenní závěsy. I když to nebyla skutečná matematická teorie uzlů, měla by být brána jako první příklad aplikace teorie uzlů ve vědecké literatuře. Ačkoli bychom mohli považovat teorii uzlů za starověkou disciplínu, na matematické scéně je to docela novinka.

V dopise Christianu Huygensovi (1629-1695), napsaném v roce 1679, Gottfried Wilhelm Leibniz, německý filozof a matematik, napsal:

Nejsem spokojený s algebrou, protože nepřináší ani nejkratší důkazy, ani nejkrásnější konstrukci geometrie. V důsledku toho se domnívám, že potřebujeme ještě jiný druh analýzy, geometrické nebo lineární, který se přímo zabývá polohou, neboť se algebra zabývá velikostí. [8]

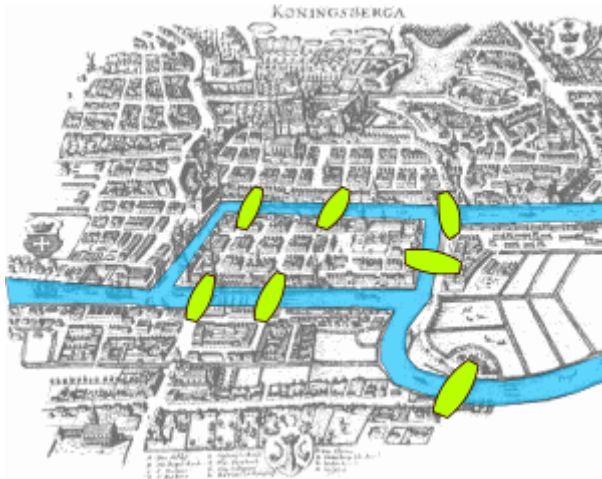
Tímto slovem Leibniz položil základ nové vědě, kterou nazval *geometria situs*, česky *geometrie polohy*, a která je nyní známá jako topologie.

První příklad Leibnizova nového pojetí geometrie uvedl Leonard Euler (1707-1783) při řešení problému Königsbergových mostů (viz obrázek 1.1). Pruské město Königsberg leží na řece Pregole, která vytváří dva ostrovy. Ostrovy byly s okolním městem spojeny sedmi mosty. A otázka zněla, zda je možné všechny mosty přejít tak, aby ten, kdo se o to pokouší, přešel přes každý most přesně jednou. Při řešení této úlohy si Euler nedělal starosti s přesnou polohou mostů, místo toho uznal, že klíčovou informaci lze pochopit ze vzájemné polohy mostů. Pomocí teorie grafu totiž ukázal, že mosty není možné tímto způsobem přejít.

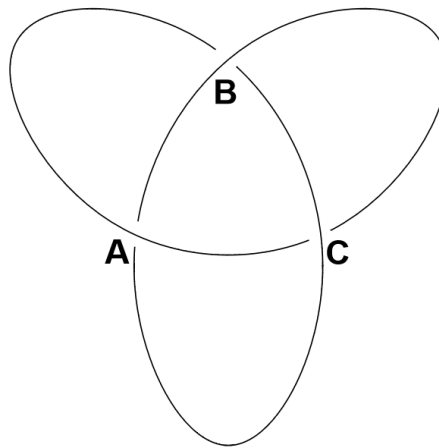
Ale teprve v roce 1771 se Alexander-Theophile Vandermonde (1735-1796) poprvé zmínil o teorii uzlů jako o oboru studií. Studoval copánky a uzly jako příklady této nové vědy o postavení, kterou si představil Leibniz. Napsal ve svém článku *Remarques sur les problmes de situation* (Poznámky k problémům polohy):

Bez ohledu na zákruty systému vláken v prostoru lze vždy získat výraz pro výpočet jeho rozměrů, ale tento výraz bude v praxi málo užitečný. Řemeslník, který vyrábí cop, síť nebo nějaké uzly, se nebude zabývat otázkami měření, ale otázkami polohy: to, co tam vidí, je způsob, jakým jsou vlákna propletena. [8]

Jednou z nejstarších Gaussových poznámek, které lze nalézt mezi jeho papíry, je list papíru s datem 1794. Nese nadpis „Sbírka uzlů“ a obsahuje třináct úhledně načrtnutých pohledů na uzly s anglickými názvy napsanými vedle nich. Součástí jsou dva další kusy papíru s náčrtky uzlů. Jeden je datován rokem 1819, druhý je mnohem pozdější.



Obrázek 1.1: Slavný problém Königsbergových mostů.



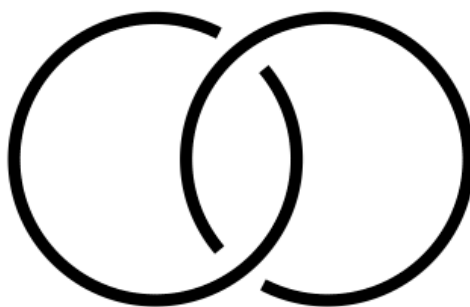
Obrázek 1.2: Trojlístkový uzel a jeho křížení.

Studie Carla Friedricha Gause byly zásadní pro vytvoření teorie uzlů. V letech 1825 až 1844 pracoval na klasifikaci uzavřených rovinných křivek s konečným počtem vlastních průniků, které nazval Tractfiguren. Jeho metoda spočívala v orientaci těchto křivek a následně v označení křížení písmeny.

Vytvořil proto sekvenci, počínaje zvoleným výchozím bodem po celém traktátu. Křivka s n kříženími by tedy měla posloupnost délky $2n$ (protože se v každém z n křížení protnou dvě křivky). Například trojlístkový uzel by byl zaznamenán jako $ABCABC$, viz obrázek 1.2.

Navíc Gauss při práci v elektrodynamice objevil první důležitý výsledek v teorii uzlů. Jeho cílem bylo najít metodu, která by dokázala odhadnout, kolik práce je vykonáno na magnetickém pólu pohybujícím se po uzavřené křivce za přítomnosti smyčkového proudu. Během svého vyšetřování objevil to, čemu se říká Gaussovo spojovací číslo. Gaussovo spojovací číslo je prvním objeveným invariantem, budeme o tom ještě mluvit v sekci 2.7.

Hlavní úkol (který leží) na hranici mezi geometrií situs a geometrií magnitudinis je počítat vinutí dvou uzavřených nebo nekonečných čar.



Obrázek 1.3: Hopfovo spojení.

. . m počet vinutí. Tato hodnota je sdílená, tedy zůstává stejná, pokud jsou řádky zaměněny.

Mnoho lidí se zabývalo zkoumáním Gaussova spojovacího čísla i později.

James Clerk Maxwell (1831-1879) projevil svůj zájem o toto téma a našel dvě smyčky, které nelze oddělit, i když se jejich Gaussovo spojovací číslo rovná 0. Je to Hopfovo spojení a je znázorněno na obrázku 1.3.

V roce 1876 O. Boeddicker poznamenal, že spojovací číslo není nic jiného než počet, kolikrát se jedna křivka vine kolem druhé. Později, v roce 1892, Hermann Karl Brunn poskytl snadnou metodu pro určení spojovacího čísla spojení ze dvou komponent. Pokud má spojení komponenty K_1 a K_2 , budeme přičítat jedničku pro každé křížení, ve kterém K_1 prochází nad K_2 , a naopak odečítat jedničku, pokud K_1 prochází pod K_2 . Součet těchto $+1$ nebo -1 je Gaussovo spojovací číslo.

Další významný příspěvek k rozvoji teorie uzlů poskytl Johann Benedict Listing (1808-1882), který byl Gaussovým studentem. V roce 1847 vydal svou monografii *Vorstudien zur Topologie*. Většina příspěvků je věnována studiu matematických uzlů a jejich klasifikaci. Jako první použil termín topologie.

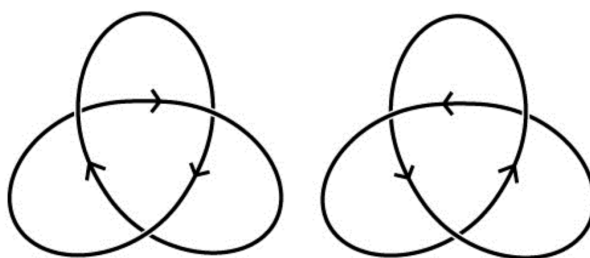
Listing se zabýval vývojem algebraického počtu diagramů uzlů, aby bylo možné snadno určit, zda dva diagramy reprezentují stejný uzel. Zejména projevil zájem o chiralitu uzlů, která udává vztah mezi uzlem a jeho zrcadlovým obrazem. Jako první uvedl, že trojlístkový uzel je chirální. Naopak osmičkový uzel (viz obrázek 2.5), známý také jako Listingův uzel, je achirální. Podrobněji si tento pojem vysvětlíme v sekci 4.3.

1.2 Fyzikální motivace

Většina matematických oblastí byla motivována fyzikálním výzkumem, a teorie uzlů není výjimkou. Objevila se z chybné myšlenky o stavbě atomů.

V šedesátých letech 19. století byla společnost fyziků rozdělena na dvě skupiny: první skupina podporovala tzv. *korpuskulární teorii*, která říkala, že se hmota skládá z atomů. Druhá skupina si myslela, že hmota je tvořena z vln.

William Thomson (1824-1907), později známý jako Lord Kelvin, se snažil vytvořit novou teorii, která by kombinovala obě tyto myšlenky. V roce 1867 pochopil, že konkrétní tvar víru (vortex) není tak důležitý jako základní topologická struktura, a tušil, že pochopení takových vírů by vedlo k úplnému pochopení hmoty.



Obrázek 1.4: Levotočivý a pravotočivý trojlístkové uzly. [8, s. 21]

Thomson se inspiroval myšlenkami jiného fyzika Helmholtze a sepsal všechny své nápady v eseji „O vírových atomech“, ve kterém předpokládá, že se hmota skládala z vírových atomů.

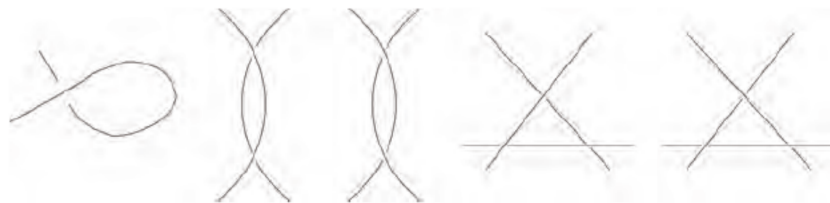
Fyzik Hermann von Helmholtz se ve svých pracích pokoušel ukázat, že existuje vše prostupující médium, které pojmenoval éter. Na základě této myšlenky Kelvin přišel k názoru, že hmota je tvořena trojrozměrnými svázanými trubičkami éteru, tzv. vírovými atomy. Předpokládal, že různá křížení a kroucení těchto trubiček odpovídají různým atomům. A souhrnně označoval tato křížení a kroucení za uzly. Takže každému prvku periodické tabulky příslušel uzel, který určoval chemické a fyzikální vlastnosti tohoto prvku. Molekuly jsou jednoduše spojení takových atomů.

Teď se taková představa o stavbě atomů a hmoty může zdát poněkud absurdní, ale měli bychom se zamyslet nad teorií strun, která předpokládá, že základními stavebními kameny přírody nejsou částice s nulovými rozměry, nýbrž jednorozměrné struny, které vibrují různými způsoby, odpovídajícími různým druhům částic. Teorie strun nevypadá mnohem rozumněji ani realističtěji než teorie vírů.

S touto novou teorií se ve vědecké společnosti zvýšil zájem o teorii uzlů. Pokud atomy byly modelovány pomocí uzlů, pak dalším problémem bylo pokusit se je klasifikovat. První pokus v tomto směru udělal fyzik Peter Guthrie Tait (1831-1901). Navzdory své důležité roli ve vývoji Thomsonovy myšlenky měl Tait zpočátku pocit, že se Thomson mýlil. Cítil, že hlavní aplikace vírových pohybů by byla v teorii elektromagnetismu, ne v teorii o stavbě atomů. Každopádně, navzdory Taitovým počátečním námitkám, Thomson pokračoval v uvažování o atomech jako o vírech, což podnítilo zájem Jamese Clerka Maxwella.

Maxwell se věnoval spíše elektromagnetismu. Byl však také otevřený myšlence, že svázané víry by mohly být základními stavebními kameny hmoty. Začal y diskuse, které pokračovaly v dopisech s Taitem a Thomsonem o některých Maxwellových nápadech a objevech, které je velmi zajímaly.

Maxwell znovu objevil integrální vzorec počítající spojovací číslo dvou uzavřených křivek, který Gauss sice objevil, ale nepublikoval, a také odvodil rovnice pro zauzlované křivky v trojrozměrném prostoru. Navíc ve svém dopise poznamenal, že trojlístkový uzel je nejjednodušším uzlem, který je skutečně zauzlený a skládá se z jednoho vlákna. Pokračoval v rozpoznání parametru ve svých rovnicích, který mohli určit, zda takto vyrobený trojlístek byl pravotočivý, nebo levotočivý (viz obrázek 1.4), a tvrdil (bez důkazu), že neexistuje způsob, jak změnit pravotočivý trojlístek na levotočivý nebo naopak.



Obrázek 1.5: Oblasti ohraničené méně než čtyřmi oblouky. [8, s. 21]

Maxwell tak během několika dní předpověděl mnohé z toho, co se v teorii uzlů stane v příštích 80 letech. Ve svém výzkumu se Maxwell snažil najít postup na určení toho, zda dvě projekce uzlu představují stejný uzel. Aby odpověděl na tuto otázku, vytvořil schéma označování křížení v projekci uzlu a poté ukázal, že každý diagram uzlu musí obsahovat oblast ohraničenou méně než čtyřmi oblouky, kde definoval oblouk jako segment projekce mezi dvěma kříženími. Začal tedy určovat všechny možnosti pro takové regiony pomocí schématu na obrázku.

V případě oblasti ohraničené jedním obloukem se jedná pouze o zkroucení, které je možné snadno vrátit zpět beze změny uzlu. Pro oblasti ohraničené dvěma oblouky Maxwell našel dvě možnosti. Konkrétně jde o oblast vytvořenou jako vlákno přecházející přes jiné vlákno ve dvou po sobě jdoucích bodech nebo region vytvořený jako vlákno přecházející nad a poté pod jiným.

V prvním případě lze horní vlákno, aniž by se změnil typ spojení, posunout tak, aby se již nekřížilo se spodním. V druhém případě to posunout nemůžeme, neboť se změní typ spojení. Situace se překvapivě nekomplikuje u oblastí ohraničenými třemi oblouky, kde také existují dva možné případy, jak ukazuje obrázek.

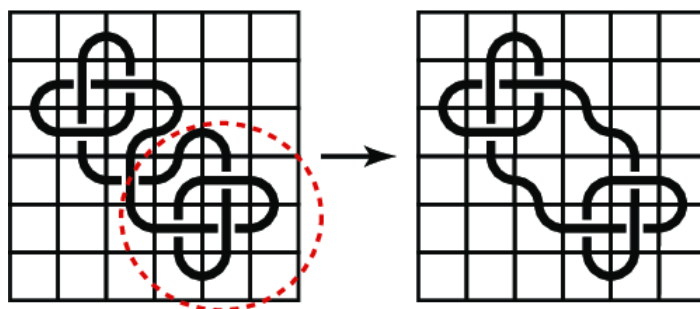
Ačkoli jeho přístup neobsahoval žádnou matematickou přísnost, je pozoruhodné, že Maxwell definoval Reidemeisterovy pohyby, které se ukázaly jako základní pohyby při transformacích uzlů až ve 20. letech 20. století. Reidemeisterovy pohyby budeme zkoumat podrobněji v sekci 2.5. Mezitím Tait postupně změnil názor a začal sepsovat uzly v naději, že vytvoří tabulku prvků, která bude odpovídat Thomsonově atomové teorii. V roce 1876 se rozhodl vytvořit kompletní tabulku uzlů, obsahujících až do sedmi křížení. Chápal však, že nedostatečná složitost uzlů, které produkoval, by jim zabránila být dostatečně stabilní jako víry, které by reprezentovaly atomy, což znamená, že by bylo zapotřebí vytvořit tabulku uzlů s vyššími čísly křížení. Taková tabulka by vyžadovala účinnější metody pro určení, zda jsou dva diagramy uzlů stejné, což je myšlenka, která byla realizována až za více než 100 let.

Tait, podobně jako Gauss a Maxwell, začal zkoumat teorie uzlů z toho, jak symbolicky zakódovat křížení projekce uzlu. Tím vyvinul své vlastní schéma kódování. Během svého výzkumu představil tři principy, známé jako Taitovy domněnky. Aby si usnadnil práci, rozhodl se pracovat pouze se střídavými uzly. Jsou to uzly, u kterých se jednotlivé typy křížení střídají: horní křížení následuje spodním křížením. Například trojlístkový uzel na obrázku 1.2 je střídavým uzlem.

Veden důkazy z těchto střídavých diagramů, vyslovil svou první domněnku:

Redukovaný střídavý uzel má minimální počet křížení.

Redukovaný znamená, že neobsahuje křížení, která lze „rozpoutat“. Na ob-



Obrázek 1.6: Redukce. [3, s. 3]

rázku 1.6 je znázorněné, jak získáme redukovaný uzel z neredukovaného.

Druhá domněnka byla původně vyslovena docela záhadně, ale v moderní formulaci zní následujícím způsobem:

Diagram střídavého uzlu bez křížení, která lze „rozpoutat“, nelze upravit tak, aby mělo méně křížení.

Například trojlístkový a osmičkový uzly nelze nakreslit s menším počtem křížení, protože oba mají diagramy střídavých uzlů bez „nesmyslných“ křížení. Tuto domněnku poprvé důsledně dokázal Murasugi, teprve po objevu Jonesova polynomu. Tait si nebyl tak jistý svou třetí domněnkou, dnes nejlépe známou jako Taitova létající domněnka, která se obvykle uvádí následujícím způsobem:

Jakékoli dva redukované střídavé diagramy daného uzlu jsou spojeny pomocí sekvence schematických pohybů, jako je ten znázorněný na obrázku

Taitova létající domněnka zůstala důležitým otevřeným problémem v teorii uzlů, dokud ji v roce 1993 nedokázali Menasco a Thistlethwaite.

V roce 1885 Thomas Kirkman publikoval tabulky projekcí uzlů (4-valentní grafy). Kirkman nebyl topologem, ale zabýval se kombinatorikou a grafy, a proto jeho tabulky neobsahovaly projeke uzlů, ale rovinné grafy. Tait nahradil vrcholy grafů v Kirkmanových projekcích kříženími, aby vytvořil diagramy uzlů. Křížení zvolil tak, aby ve výsledku dostal střídavý diagram. Před zveřejněním svých výsledků se Tait dozvěděl o dalším seznamu uzlů, obsahujících až do deseti křížení, vytvořeném Charlesem Littlem. Při porovnání těchto dvou seznamů našel Tait jednu duplikaci ve své vlastní tabulce a jednu duplikaci a vynechání v Littlem.

Tait pobídl Little k tomu, aby ten prozkoumal střídavé diagramy uzlů s větším počtem křížení než Kirkmanovy grafy. Little také začal uvažovat o možnosti studia nestřídavých diagramů. To dramaticky zvýšilo počet případů, které bylo potřeba prostudovat. Ve skutečnosti mu trvalo šest let, než vytvořil svůj seznam 43 nestřídavých diagramů, které obsahují až do deseti křížení. Je neuvěřitelné, že jeho seznam neobsahoval žádné opomenutí a pouze jednu duplikaci, která zůstala bez povšimnutí až do roku 1974. Takže dohromady do roku 1900 Tait, Kirkman a Little vytvořili seznamy uzlů s deseti kříženími a střídavých uzlů s jedenácti kříženími.

Je třeba mít na paměti, že tyto katalogy byly sestaveny ručně. Jsou dva problémy, které matematici měli vyřešit při sestavování těchto katalogů: měly být

úplné (bez vynechání) a nesměly obsahovat žádné duplikáty. První z nich je algoritmický problém a je z matematického hlediska triviální. Prokázat, že uzly jsou odlišné, je mnohem obtížnější a pozornost vědců se nyní zaměřila na vývoj uzlových invariantů.

Mnoho dalších vědců však pokračovalo ve výčtu uzlů po další roky. Seznamy byly částečně rozšířeny v doktorské disertační práci M.G. Hasemansova z roku 1916. Uzly do 11 křížení vyčíslil John Conway, svou práci dokončil v roce 1969. Uzly do 13 křížení vyčíslili C.H.Dowker a M. B. Thistlethwaite v roce 1983.

V dnešní době rozvoj výpočetní techniky značně zjednodušil tento problém, ale rychlý růst počtu uzlů je stále ohromující. Například v tabulce všech prvočísel z července 2003 bylo střídáním uzlů přes 22 křížení provedených S. Rankinem, J. Schermannem a O. Smithem nalezeno 6 217 553 258 uzlů.

Bohužel Kelvinova teorie vlnových atomů neexistovala dlouho a byla vyvrácena ruským chemikem Mendělejevem, který vytvořil skutečnou periodickou tabulku prvků.

1.3 Moderní matematická teorie uzlů

Bez ohledu na to, že atomy nevypadaly tak, jak předpokládal Kelvin, teorie uzlů pokračovala ve svém vývoji jako pouhá matematická oblast (i když potom se objevily i různé nečekané aplikace).

První důkaz existence netriviálních uzlů ukázal Heinrich Tietze v roce 1908. V roce 1914 Max Dehn ukázal, že levotočivý a pravotočivý trojlístkový uzel jsou odlišné. Práce Dehna a jeho kolegů se zastavila s vypuknutím první světové války a veškerá významná práce v teorii uzlů byla obnovena až po válce. Postupem času bylo vyvinuto mnoho technik, zejména algebraická topologie, a jak se stávaly silnějšími, bylo možné rozlišovat stále více uzlů. O průlom v teorii uzlů se zasloužili James W. Alexander z Princetonu a Kurt Reidemeister ve Vídni. Ve dvacátých letech nezávisle na sobě oba dospěli ke stejnému invariantu uzlu.

Alexander později pokračoval ve vývoji polynomiálního invariantu uzlů – Alexandrův polynom (viz sekce 3.1), zatímco Reidemeister ukázal, že všechny projekce uzlu jsou spojeny posloupností tří pohybů, které se teď nazývají Reidemeisterovy pohyby (viz sekce 2.5). V roce 1933 přišel Reidemeister o svou profesorskou pozici v Königsbergu, protože byl „politicky nespolehlivý“. Alexander a další vědci, kteří se sice nenacházeli v oblastech kontrolovaných Německem, také pozastavili svůj výzkum v teorii uzlů a začali pracovat na problémech souvisejících s válkou. Teorii uzlů opět přerušila válka. Po válce se Princeton opět stal centrem pro teoretický výzkum uzlů ve Spojených státech. Vůdcem poválečné teorie uzlů ve Spojených státech byl Ralph H. Fox.

Foxova práce vedla k řadě nových geometrických invariantů uzlů. V 70. letech 20. století J.H. Conway dělal víc než jen tabelování uzlů, jak bylo popsáno v předchozí části. Vymyslel nový způsob výpočtu Alexandrova polynomu pomocí algoritmu na uzlových diagramech. Ve skutečnosti jeho práce vedla k upřesnění Alexandrova polynomu, který se často nazývá Conwayův či Alexandrův-Conwayův polynom (viz sekce 3.2). Hlavní průlom v teorii uzlů nastal v roce 1984, kdy Vaughan Jones vyvinul nový polynomiální invariant uzlů – Jonesův polynom, když prováděl výzkum von Neumannových algeber. Jonesův polynom byl významným zlepšením oproti dřívějším polynomiálním invariantům, protože byl schopen roz-

lišit mnoho uzlů od jejich zrcadlových obrazů. O tomto polynomu ještě budeme mluvit v sekci 3.3.

Na konci 60. let John Conway začal vyvíjet nové způsoby rozšíření seznamu uzlů. Zavedl fragmenty uzlů nazývané tangles a vyvinul notaci pro popis uzlů v termínech tangles a způsobů, jak je lze sestavit. Jeho výkonná notace zjednodušila proces výčtu a umožnila Conwayovi ověřit i existující seznamy. Pokračoval ve výčtu uzlů až do 11 křížení a propojil se s řádem 10. Ale stále přehlížel v Littleové tabulce duplikát uzlu s deseti kříženími. Koncem sedmdesátých let Alain Caudron zopakoval výčet pro uzly s jedenácti kříženími a našel čtyři vynechání v Conwayově seznamu.

Tím končí éra ručního počítání uzlů. Na počátku 80. let 20. století Hugh Dowker a Morwen Thistlethwaite zautomatizovali procesy výčtu všech možných diagramů, jejich rozdělení do tříd ekvivalence a výpočtu invariantů k jejich rozlišení. Podařilo se jim rozšířit seznam všech uzlů až do jedenácti křížení. Koncem 90. let, ve spolupráci s Jimem Hostem a Jeffrey Weeksem, Thistlethwaite rozšířil seznam na uzly až do šestnácti křížení, seznam obsahoval přes 1,7 milionu uzlů. [8, s. 15–26]

2. Základní pojmy teorie uzlů

2.1 Uzel

V této kapitole přejdeme k samotné teorii uzlů. Začneme tím, co je uzel. Intuitivně si můžeme uzel představit jako zauzlený kus lana. A tato představa není daleko od matematické definice:

Definice 2.1.1. *Uzel je uzavřená křivka v prostoru, která se nikde neprotíná.* [7, p. 5]

Nebudeme definovat formálně, co je uzavřená křivka.

2.2 Uzlový diagram

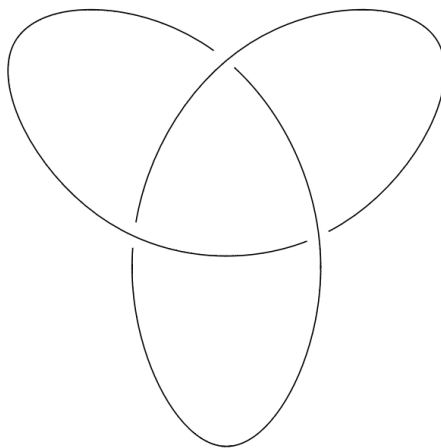
Užitečným způsobem vizualizace a manipulace s uzly je promítání uzlu na rovinu – představte si, že uzel vrhá stín na zeď. Při každém křížení je také důležité rozlišovat, zda jedno vlákno prochází pod či nad druhým. To se často provádí vytvořením přerušení ve spodním vláknu. Tímto obrázkům se říká *diagramy* anebo *projekce* uzlů.

2.3 Příklady uzlů

Jaký je nejjednodušší uzel, který si můžeme představit? Samozřejmě je to kružnice, budeme jí říkat *triviální uzel*. Tento uzel je znázorněn na obrázku 2.2.

Další nejjednodušší uzel se nazývá *trojlístkový uzel*, vypadá jako trojlístek a je znázorněn na obrázku 2.3. Pokud uděláme trojlístkový uzel z lana a budeme se ho snažit rozmotat do triviálního uzlu, brzy zjistíme, že to není možné. Ale samozřejmě to vyžaduje matematický důkaz, který vůbec není jednoduchý.

To vede k zásadnímu nevyřešenému problému v teorii uzlů: jak můžeme zjistit, že dva na první pohled úplně odlišné uzly jsou topologicky ekvivalentní, jinými



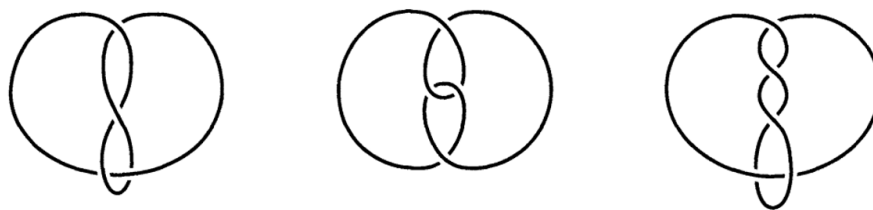
Obrázek 2.1: Uzlový diagram trojlístkového uzlu.



Obrázek 2.2: Triviální uzel.



Obrázek 2.3: Trojlístkový uzel.



Obrázek 2.4: Tři různé projekce osmičkového uzlu. [2, p. 3]



Obrázek 2.5: Osmičkový uzel.

slovy, jeden uzel z druhého lze získat nějakými jednoduchými spojitými deformacemi. Tedy když si představíme, že uzel je vyroben z lana, tak toto lano při spojitých deformacích můžeme natahovat, mačkat, pohybovat v prostoru, ale nemůžeme ho přestříhnout ani přelepit.

Samozřejmě ten samý uzel můžeme nakreslit na papír různými způsoby. Těmto nákresům pak říkáme *projekce uzlu*. Například když se podíváme na obrázek 2.4, vidíme tři různé projekce toho samého uzlu, ten se nazývá *osmičkový uzel* a jeho 3D model je znázorněn na obrázku 2.5.

Schválně zkuste udělat tento uzel z provázku, abyste zjistili, že je to skutečně ten samý uzel. Místo, kde se uzel na obrázku kříží, se nazývá *křížení*. Například, říkáme, že osmičkový uzel je čtyřkřížený uzel, protože existuje projekce se čtyřmi kříženími a žádné projekce tohoto uzlu s méně než čtyřmi kříženími nejsou.

Když jsme si řekli, že problém topologické ekvivalence uzlů není vyřešený, tak jsme trochu podváděli. Ve skutečnosti existuje způsob, jak rozhodnout, zda daná projekce uzlu je projekcí triviálního uzlu. V roce 1961 totiž německý matematik Wolfgang Haken přišel se spolehlivým postupem pro rozhodování, zda daný uzel je nebo není triviální.

Podle jeho teorie bychom měli být schopni poskytnout projekci uzlu počítači, počítač by se pak pomocí Hakenova algoritmu rozhodl, jestli ten uzel je nebo není triviální. Bohužel, i když Haken přišel s tímto postupem už před 60 lety, samotný algoritmus je natolik komplikovaný, že nikdo zatím nenapsal počítačový program k jeho implementaci. [2, s. 4]

2.4 Elementární pohyby uzlu

Na všech obrázcích, které jsme dosud měli, uzel vypadá spíše jako “hladká” kružnice než mnohoúhelník. Ale když ho chceme popsat matematicky, tak si ho můžeme představit jako mnohoúhelník. Když to uděláme, tak můžeme různými způsoby měnit tvar uzlu: například, přidat nový vrchol mnohoúhelníku. Zkusíme všechno, co můžeme udělat s uzlem, popsat v jedné definici.

Definice 2.4.1. Na daném uzlu můžeme provést následující čtyři operace.

(1) Hranu AB můžeme rozdělit na dvě hrany AC, CB, umístěním bodu C na hranu AB.

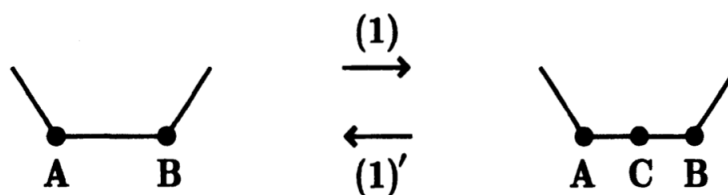
(1)' [Opak k (1)] Pokud jsou AC a CB dvě sousední hrany takové, že když odebereme C, tak se AB stane přímkou, pak můžeme odstranit bod C.

(2) Předpokládejme, že C je bod v prostoru, který neleží na uzlu. Jestliže trojúhelník ABC, tvořený AB a C, neprotíná uzel, s výjimkou hrany AB, pak můžeme odstranit AB a přidat dvě hrany AC a CB.

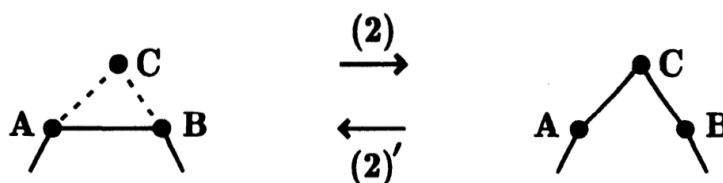
(2)' [Opak k (2)] Pokud v prostoru existuje trojúhelník ABC, který obsahuje dvě sousední hrany uzlu AC a CB, a tento trojúhelník neprotíná uzel až na hrany AC a CB, pak můžeme odstranit dvě hrany AC, CB a přidat hranu AB.

Tímto čtyřem krokům, které jsme popsali, budeme říkat *elementární pohyby uzlu*. [7, s. 7]

Tyto pohyby jsou znázorněny na obrázcích 2.6 a 2.7.



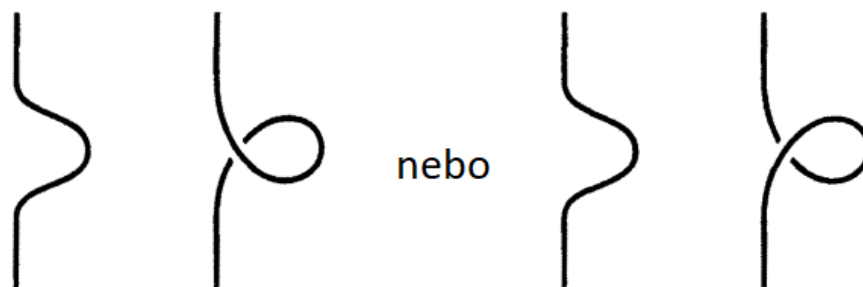
Obrázek 2.6: Elementární pohyby (1) a (1)'. [7, s. 7]



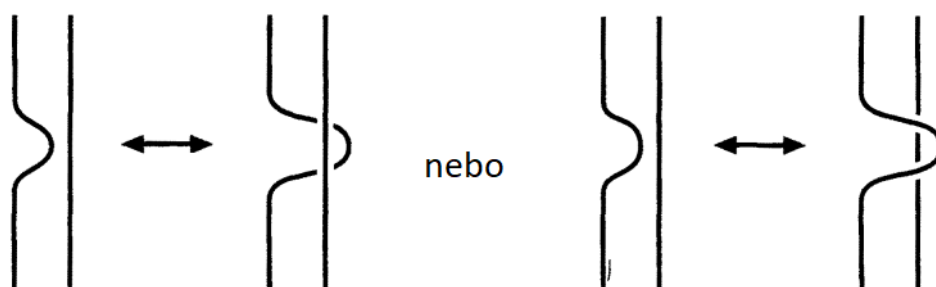
Obrázek 2.7: Elementární pohyby (2) a (2)'. [7, s. 7]

2.5 Reidemeisterovy pohyby

Když si představíme uzel v prostoru, tak si můžeme uvědomit, že projekce toho samého uzlu může mít různý počet křížení v závislosti na tom, z jaké strany tuto projekci vytvoříme. Pomocí elementárních pohybů, které jsme zavedli, nemůžeme ten počet křížení měnit. Takže potřebujeme nějaký jiný druh pohybů, který



Obrázek 2.8: Reidemeisterovy pohyby I. typu. [2, s. 13]



Obrázek 2.9: Reidemeisterovy pohyby II. typu. [2, s. 13]

zachycuje to, že když změním projekci uzlu “správným” způsobem, tak se ten uzel nezmění. Těmito pohybům se říká *Reidemeisterovy pohyby* a jsou podobné těm pohybům, které děláte při zavazování tkaniček.

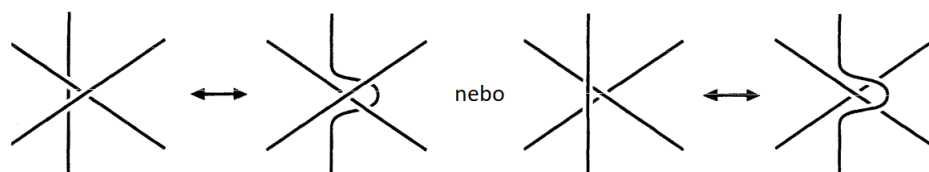
První Reidemeisterův pohyb neboli Reidemeisterův pohyb I. typu nám umožňuje přidat nebo odstranit záhyb v uzlu, viz obrázek 2.8.

Druhý Reidemeisterův pohyb nám umožňuje buď přidat dvě křížení, anebo odstranit dvě křížení (obrázek 2.9).

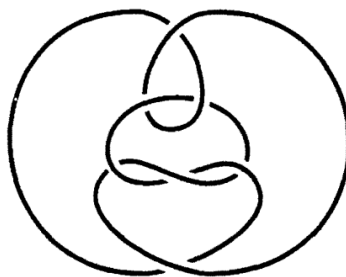
Třetí Reidemeisterův pohyb nám umožňuje přesunout vlákno z jedné strany křížení na druhou (obrázek 2.10).

Pokud jeden uzel můžeme získat z druhého pomocí konečného počtu Reidemeisterových a elementárních pohybů, pak říkáme, že tyto uzly jsou *ekvivalentní*.

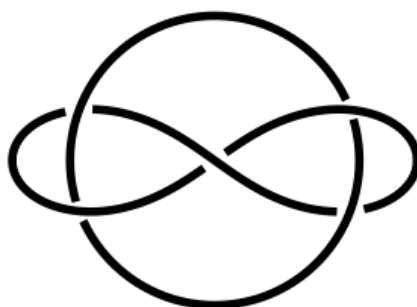
Tyto tři druhy pohybů vytvořil německý matematik Kurt Reidemeister. Ukázal, že jsou to nutné a postačující pohyby k tomu, abychom ukázaly, že dvě projekce udávají ten samý uzel. To vypadá jako řešení problému ekvivalentních uzlů, ale ve skutečnosti tomu tak není: uzel může být velmi zamotaný, a můžeme ho



Obrázek 2.10: Reidemeisterovy pohyby III. typu. [2, s. 13]



Obrázek 2.11: Jedna z projekcí triviálního uzlu. [2, s. 16]



Obrázek 2.12: Projekce Whiteheadova spojení.

rozmotávat několik měsíců, dokonce i pomocí počítače. Takže potřebujeme nějaký efektivní algoritmus, který dokáže tento uzel rozmotat. Bohužel tento algoritmus zatím neexistuje. [2, s. 13]

A tady je ještě jeden příklad na závěr této sekce. Není to vidět na první pohled, ale ve skutečnosti uzel na obrázku 2.11 je topologicky ekvivalentní triviálnímu uzlu, tedy existuje řada Reidemeisterových pohybů, které ho rozmotají do triviálního uzlu. [2, s. 16]

2.6 Spojení uzlů

Zatím jsme mluvili o uzlech, které jsou tvořeny pouze jednou kružnicí. Ale není žádný důvod k tomu, abychom se omezovali pouze na jednu kružnici.

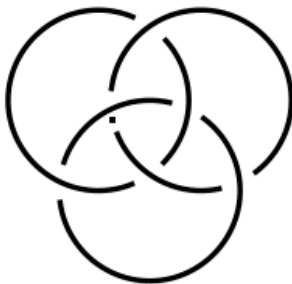
Definice 2.6.1. *Spojení uzlů* je konečná uspořádaná množina uzlů, které se navzájem neprotínají. [7, s. 15]

Podobně jako v případě obyčejných uzlů, projekcí spojení uzlů na rovinu budeme říkat *diagram* či *projekce* spojení uzlů.

Na obrázku 2.12 je projekce jednoho z nejjednodušších spojení, říká se mu *Whiteheadovo spojení*.

Whiteheadovo spojení je tvořeno dvěma uzly, které jsou zapleteny dohromady, tedy se sestává ze dvou komponent. Samozřejmě komponent může být i více: na obrázku 2.13 jsou tzv. *Boromejské prstěny* – jsou tvořeny třemi komponentami.

Všechny pohyby, které jsme zavedli pro uzly, platí i pro spojení uzlů. Například, dvě spojení uzlů jsou ekvivalentní právě když jedno dostaneme z druhého



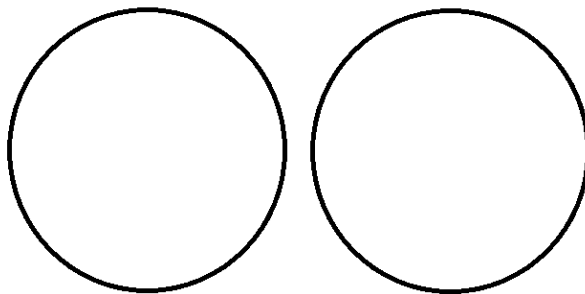
Obrázek 2.13: Boromejské prsteny.

pomocí Reidemeisterových pohybů. Také nás může zajímat otázka, zda můžeme nějaké spojení „rozpoutat“ na několik komponent. Říkáme, že spojení uzlů je *rozdělitelné*, jestli ho můžeme deformovat tak, aby jednotlivé komponenty ležely na různých stranách roviny v trojrozměrném prostoru. Například, když se podíváme na obrázky, které jsme dosud měli, tak si můžeme všimnout, že ani Whiteheadovo spojení, ani Boromejské prsteny rozdělitelné nejsou.

Často nás také zajímá otázka, zda jsou dvě spojení ekvivalentní. Definice ekvivalence v případě spojení uzlů je stejná jako pro jeden uzel: dvě spojení uzlů jsou ekvivalentní právě když jedno můžeme získat z druhého pomocí konečného počtu Reidemeistových a elementárních pohybů. Samozřejmě, když spojení mají různý počet komponent, tak jednoduše můžeme říct, že ekvivalentní nejsou. Ale jak je to v případě, když počet komponent je stejný?

Uvedeme ještě jeden příklad. Na obrázcích 2.14 a 2.15 jsou zobrazena dvě spojení uzlů, každé spojení je tvořeno dvěma komponentami.

První spojení na obrázku 2.14 se sestává ze dvou triviálních uzlů, občas se tomu říká *triviální spojení dvou komponent*. Druhé spojení na obrázku 2.15 se nazývá *Hopfovo spojení*. Je jasné, že nejsou topologicky ekvivalentní: druhé spojení totiž nemůžeme „rozpoutat“. Ale můžeme to nějak popsat matematicky? Ukazuje se, že můžeme, to si ukážeme v následujících sekcích.



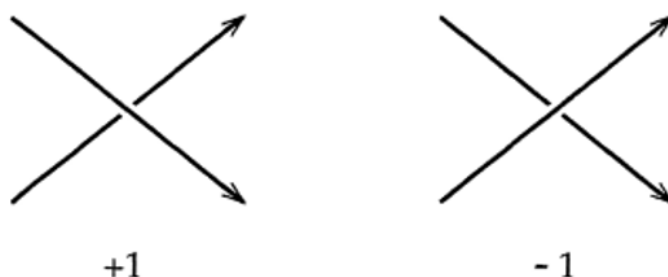
Obrázek 2.14: Triviální spojení.

2.7 Spojovací číslo

V této části popíšeme uzly numericky, to jest pomocí čísel.



Obrázek 2.15: Hopfovo spojení.



Obrázek 2.16: Výpočet spojovacího čísla. [2, s. 19]

Pro každé spojení dvou uzlů budeme počítat spojovací číslo následujícím způsobem: na začátku zvolíme orientaci každého uzlu, tím dostaneme křížení dvou druhů, která jsou znázorněna na obrázku 2.16.

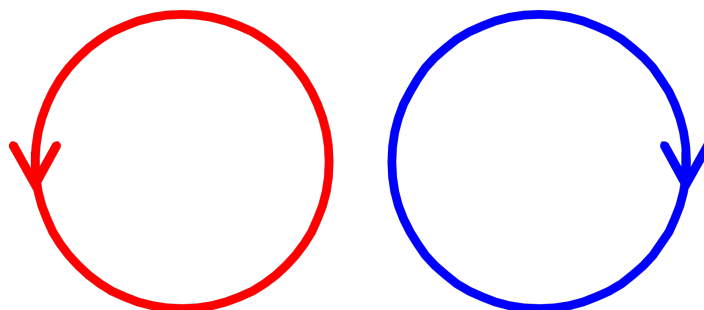
Pro každé křížení prvního druhu započítáme $+1$, pro každé křížení druhého druhu -1 . Číslo, které dostaneme, když obějdeme všechna křížení, pak vydělíme dvěma. Konečnému výsledku budeme říkat *spojovací číslo*.

Když změňme orientaci jedné z komponent, pak se změň znak spojovacího čísla. Absolutní hodnota spojovacího čísla se ale nezměň – je to *invariant*, tj. různé projekce spojení mají stejná spojovací čísla až na znaménka.

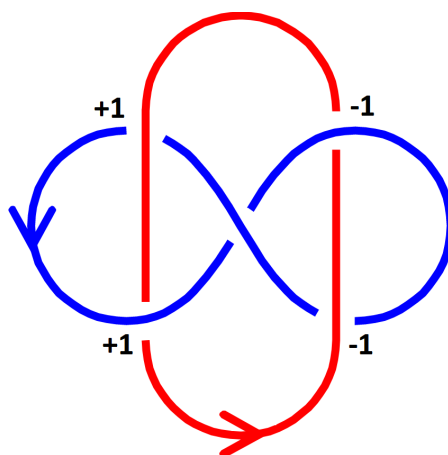
Intuitivně spojovací číslo udává, kolikrát se jedna křivka obtáčí kolem druhé. Když budeme počítat spojovací číslo jakéhokoliv spojení dvou uzlů, tak vždy dostaneme celé číslo.

Ale jak můžeme toto spojovací číslo použít k rozlišení uzlů? Pokud dvě spojení dvou uzlů mají různá spojovací čísla, tak pak nutně jsou různá. Bohužel, obrácená implikace neplatí: různá spojení mohou mít stejná spojovací čísla.

Například, když spočítáme spojovací číslo Whiteheadova spojení (obrázek 2.18), tak zjistíme, že je rovno 0, stejně jako u triviálního spojení (obrázek 2.17), i když nejsou ekvivalentní. Takže potřebujeme nějaký jiný způsob rozlišování uzlů a jejich spojení. K tomu nám budou sloužit uzlové polynomy, které budeme zkoumat v následující sekci. [2, p. 19]



Obrázek 2.17: Spojovací číslo triviálního spojení je 0: kružnice se ani neprotínají, takže výsledný součet bude 0.



Obrázek 2.18: Spojovací číslo Whiteheadova spojení je 0, protože toto spojení má dvě křížení prvního druhu a dvě křížení druhého druhu.

3. Uzlové polynomy

3.1 Alexandrův polynom

Už jsme zmínili pojem uzlový *invariant*. Invarianty v matematice jsou vlastnosti, které se transformacemi nemění. Například, když přičteme ke dvěma číslům stejnou hodnotu, tak se vzdálenost mezi nimi na číselné ose nezmění. Jinak řečeno, vzdálenost mezi dvěma čísly na číselné ose je invariantní vůči přičtení stejné hodnoty k oběma číslům. Další příklad invariantů najdeme v komplexních číslech: reálná část komplexního čísla se komplexním sdružením nemění, takže můžeme říct, že reálná část je invariantní vůči komplexnímu sdružení.

Pokud se vrátíme k uzlům, tak transformace, jejichž invarianty budeme zkoumat, jsou elementární a Reidemeisterovy pohyby. Například, jsme zjistili, že počet křížení na obrázku není invariantem, neboť ten samý uzel může v různých projekcích mít odlišný počet křížení (viz obrázek 2.11). Takže si můžeme položit otázku: jsou vůbec nějaké vlastnosti, které se transformacemi nemění? K tomu budeme potřebovat pojmy Seifertova matice a Alexandrův polynom – jeden ze základních pilířů teorie uzlů. Ale začneme postupně.

V roce 1928 americký matematik James Alexander navrhl svůj způsob, jak rozlišovat různé uzly a jejich spojení – pomocí polynomů. Každému uzlu a spojení je přiřazen polynom a různé uzly a spojení mají různé polynomy. Alexandrův polynom pak matematici používali následujících 58 let. [2, s. 148]

Původně Alexander popsal polynom pomocí docela obtížných a abstraktních matematických pojmů, ale pak v roce 1969 jiný matematik John Conway ukázal, že Alexandrův polynom může být vypočítán pomocí dvou jednoduchých pravidel, které si teď ukážeme. Alexandrův polynom budeme značit pomocí symbolu Δ .

Definice 3.1.1. *Alexandrův polynom* je polynom proměnné t , který splňuje následující dvě vlastnosti:

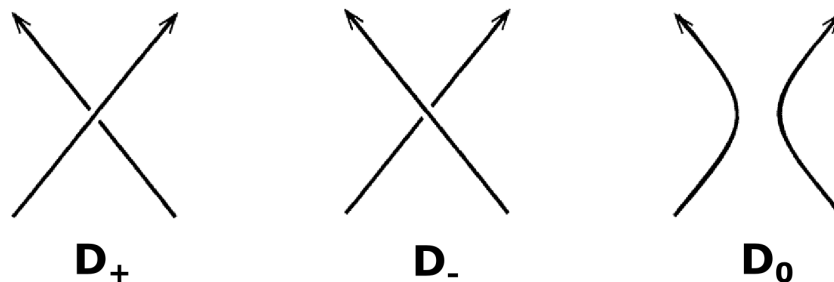
1. $\Delta_{\circ}(t) = 1$, kde \circ je triviální uzel nebo jeho projekce.
2. Předpokládejme, že máme tři diagramy D_+ , D_- , D_0 , které jsou úplně stejné až na jedno křížení, a rozdíl v tomto křížení je zobrazen na obrázku 3.1. Necht $\Delta_{D_+}(t)$, $\Delta_{D_-}(t)$ a $\Delta_{D_0}(t)$ jsou příslušné Alexandrovy polynomy. Potom platí následující vztah:

$$\Delta_{D_+}(t) - \Delta_{D_-}(t) + \left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}} \right) \Delta_{D_0}(t) = 0$$

[2, s. 165]

Druhá vlastnost se někdy nazývá anglickým pojmem *skein relation* (z angl. *skein* - přádeno).

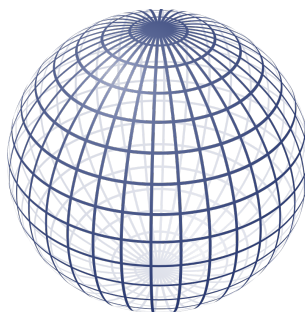
Ukazuje se, že tato dvě pravidla stačí na to, aby tento polynom byl invariantní vůči různým projekcím stejných uzlů a spojení.



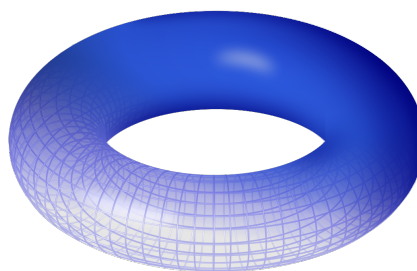
Obrázek 3.1: Diagramy uzlu z definice Alexandrova polynomu.[2, s. 165]

3.1.1 Výpočet Alexandrova polynomu

Zatím jsme nepropojovali uzly s žádnými dalšími geometrickými objekty. Ale také můžeme pohlížet na uzel jako na hranici geometrické *plochy*. Nebudeme si říkat formální definici plochy, jenom si uvedeme příklady: kulová plocha (povrch koule), viz obrázek 3.2, torus (můžeme si ho jednoduše představit jako donut, viz obrázek 3.3), povrch krychle. Jsou i exotičtější příklady: určitě jste někdy slyšeli o Möbiové pásce (viz obrázek 3.4) či o Kleinové láhvi (viz obrázek 3.5).

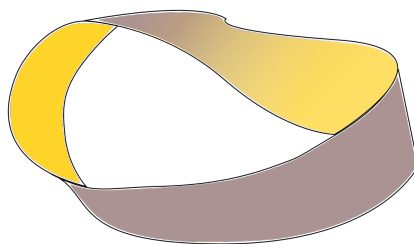


Obrázek 3.2: Kulová plocha.

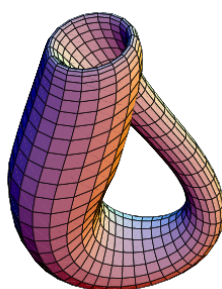


Obrázek 3.3: Torus.

Plochy v geometrii mohou být různé: orientovatelné a neorientovatelné, mohou mít anebo nemít hranici. Přestože plocha nemá žádnou tloušťku, je intuitivně užitečné si představovat orientovatelné povrchy jako ty, které mají dvě strany (které bychom mohli natřít dvěma různými barvami). Uvedeme si příklady různých druhů ploch: kulová plocha je orientovatelná plocha bez hranice (můžeme



Obrázek 3.4: Möbiová páska.

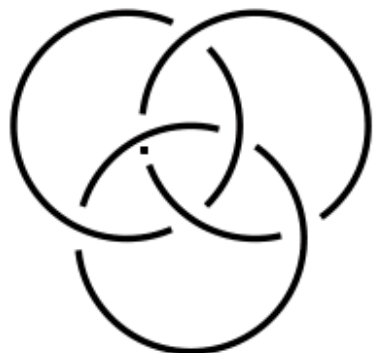


Obrázek 3.5: Kleinova láhev.

vnitřek a vnějšek obarvit dvěma různými barvami). Plášť válce je také orientovatelnou plochou, ale na rozdíl od kulové plochy má hranici, je totiž tvořena dvěma kružnicemi.

Když máme nějaký uzel, tak můžeme pro tento uzel pomocí speciálního algoritmu vytvořit plochu. Tato plocha má název *Seifertova plocha*. Tato plocha je nutně orientovatelná, tedy například Möbiova páska není Seifertovou plochou. Navíc Seifertova plocha ve své hranici obsahuje uzel, pro který tuto plochu počítáme.

Seifertova plocha pro Boromejské prstény je znázorněna na obrázku 3.7.

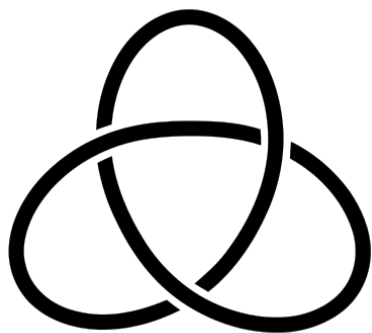


Obrázek 3.6: Boromejské prstény.

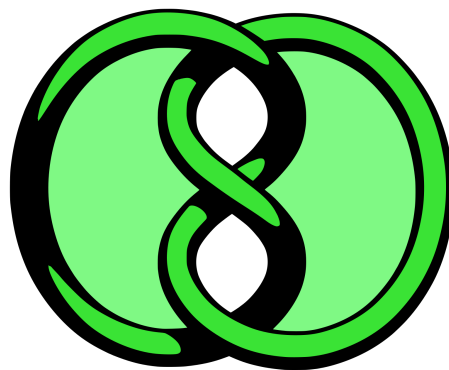


Obrázek 3.7: Seifertova plocha pro Boromejské prstény.[1]

Na obrázku 3.9 je Seifertova plocha pro pravostranný trojlístkový uzel 3.8.



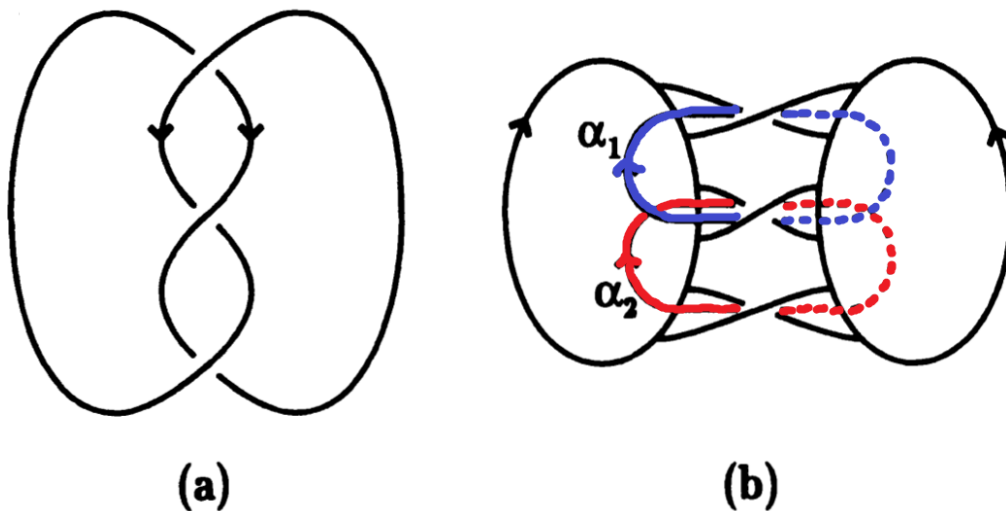
Obrázek 3.8: Pravostranný trojlístkový uzel.



Obrázek 3.9: Seifertova plocha pro pravostranný trojlístkový uzel.[6]

Když máme Seifertovu plochu uzlu, tak pomocí tyto plochy můžeme vypočítat *Seifertovu matici*. Zase k tomu budeme potřebovat speciální algoritmus, který tady uvádět nebudeme, ale uvedeme příklady Seifertových matic.

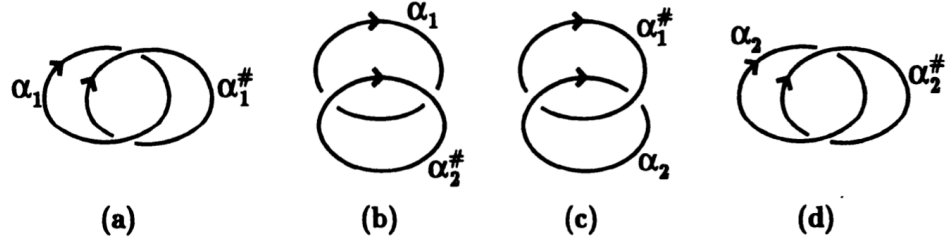
Pravostranný trojlístkový uzel. Vypočítáme Seifertovu matici pro pravostranný trojlístkový uzel. Na začátku potřebujeme diagram na obrázku 3.9 trochu zdeformovat, výsledek je znázorněn na obrázku 3.10 (a). Potom na vzniklém diagramu (a přesněji na Seifertově ploše) zvolíme dvě kružnice α_1 a α_2 . Jako $\alpha_1\#$ a $\alpha_2\#$ označíme kružnice, které vzniknou, když speciálním způsobem posuneme α_1 , respektive α_2 , ze Seifertovy plochy.



Obrázek 3.10: Zdeformovaný diagram trojlístkového uzlu (a) a kružnice α_1 a α_2 (b). [7, s. 86]

Vzniklé kružnice se budou protínat, jejich vzájemná poloha a průsečíky jsou znázorněny na obrázku 3.11.

Pro každou dvojici kružnic na obrázku 3.11 (a) až (d) vypočítáme spojovací číslo. V případě (a) je to -1 , v případě (b) -0 , v případě (c) -1 , v případě (d) $- -1$. Vypočítaná spojovací čísla pak dáme do matice, ve které řádky odpovídají kružnicím α_1 a α_2 , sloupce $-\alpha_1\#$ a $\alpha_2\#$. Obdržíme matici:



Obrázek 3.11: Průsečky kružnic na Seifertové ploše. [7, s. 86]

$$V = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

A je to Seifertova matice pro pravostranný trojlístkový uzel. [7, s. 86]
Pro jiné uzly výpočet je obdobný, a proto uvedeme pouze výsledky.

Levostranný trojlístkový uzel. Seifertova matice má následující tvar:

$$V = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

[7]

Osmičkový uzel. Pro osmičkový uzel Seifertova matice je následující:

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}$$

[4]

Nakonec když máme Seifertovou matici, tak můžeme definovat Alexandrův polynom.

Věta 3.1.1. *Nechť V je Seifertova matice nějakého uzlu, potom Alexandrův polynom tohoto uzlu splňuje:*

$$\Delta(t) = t^{-\frac{k}{2}} \det(V - tV^T), \text{ kde } k \text{ je řád matice } V$$

[7, s. 107]

Například, když se vrátíme k předchozím Seifertovým maticím a dosadíme je do vzorce 3.1.1, tak dostaneme následující vyjádření Alexandrova polynomu pro oba trojlístkové uzly:

$$\Delta(t) = t - 1 + \frac{1}{t}.$$

Dosazením Seifertovy matice osmičkového uzlu obdržíme následující Alexandrův polynom:

$$\Delta(t) = -t + 3 - \frac{1}{t}.$$

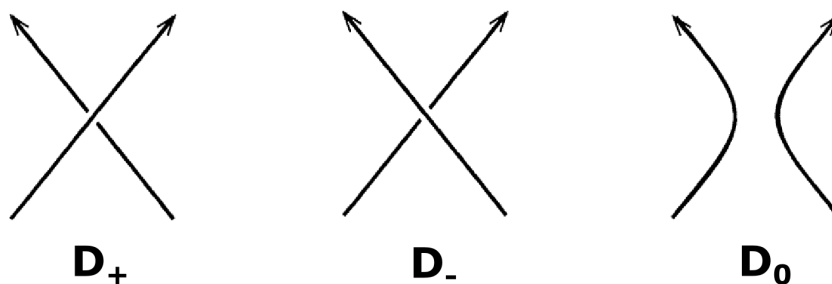
3.2 Alexandrův-Conwayův polynom

Jak jsme už zjistili, počítání Alexandrova polynomu vyžaduje výpočet determinantu matice, což občas může být únavná dřina. Toho si všiml i John Conway, a vymyslel svůj polynom, který je jednodušší pro počítání na počítači. Tento polynom se nazývá Alexandrův-Conwayův polynom, protože je založen na Alexandrově polynomu, John Conway ho pouze modifikoval.

Definice 3.2.1. *Alexandrův-Conwayův polynom*, značený ∇ , je polynom, který splňuje následující dvě vlastnosti:

1. $\nabla_{\circ}(t) = 1$, kde \circ je triviální uzel nebo jeho projekce.
2. Předpokládejme, že máme tři diagramy D_+ , D_- , D_0 , které jsou úplně stejné až na jedno křížení, a rozdíl v tomto křížení je zobrazen na obrázku 3.12. Necht $\nabla_{D_+}(t)$, $\nabla_{D_-}(t)$ a $\nabla_{D_0}(t)$ jsou příslušné Alexandrovy-Conwayovy polynomy. Potom platí následující vztah:

$$\nabla_{D_+}(t) - \nabla_{D_-}(t) = t\nabla_{D_0}(t)$$



Obrázek 3.12: Diagramy uzlu z definice Alexandrova-Conwayova polynomu.[2, s. 165]

Můžeme si všimnout, že první pravidlo je se shoduje s prvním pravidlem pro Alexandrův polynom, ale druhé pravidlo vypadá jednodušeji.

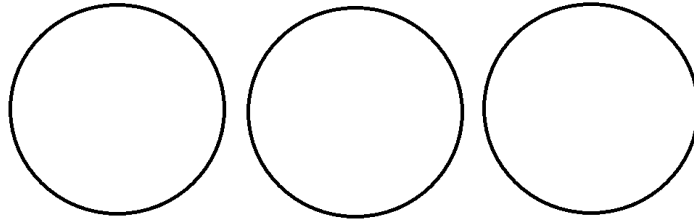
Můžeme se ptát, jaký je vztah mezi Alexandrovým a Alexandrovým-Conwayovým polynomem. Ukazuje se, že ten vztah je následující:

$$\Delta_D(t^2) = \nabla_D(t - t^{-1})$$

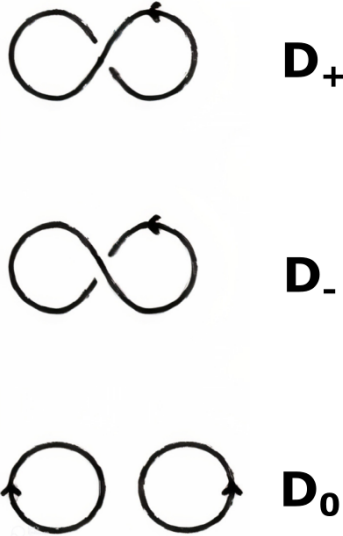
Anebo se při výpočtech taky hodí vztah, který dostaneme substitucí s za t^2 :

$$\Delta_D(s) = \nabla_D\left(\sqrt{s} - \frac{1}{\sqrt{s}}\right) \quad (3.1)$$

To nám říká, že pokud v Alexandrově-Conwayově polynomu substituujeme proměnnou s za $\sqrt{s} - \frac{1}{\sqrt{s}}$, obdržíme Alexandrův polynom. Důkaz tohoto tvrzení není obtížný, ale vyžaduje rozbor jednotlivých případů, proto ho tady uvádět nebudeme.



Obrázek 3.13: Triviální spojení třech uzlů.



Obrázek 3.14: Skein relace pro diagram triviálního uzlu. [8, s. 48]

3.2.1 Výpočet Alexandrova-Conwayova polynomu

Triviální spojení uzlů. Příklad triviálního uzlu je už popsán v prvním bodě definice, platí totiž:

$$\nabla_{\circ}(t) = 1$$

Ale co když máme triviální spojení uzlů (viz obrázek 3.13), tedy několik disjunktních triviálních uzlů?

Pro jednoduchost provedeme výpočet pro triviální spojení dvou uzlů, výsledek výpočtu vyjde stejný pro všechna triviální spojení.

Rozepíšeme si druhou podmínku z definice 3.2.1 pro diagram triviálního uzlu, viz obrázek 3.14.

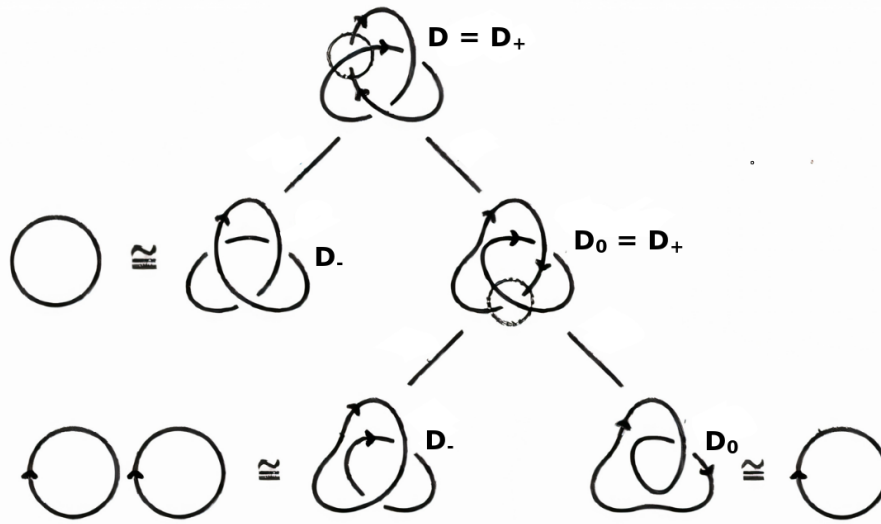
Diagramy D_+ a D_- jsou zřejmě projekce triviálního uzlu, a proto z první podmínky v definici 3.2.1 dostaneme:

$$\nabla_{D_+}(t) = \nabla_{D_-}(t) = 1$$

Dosazením do druhé podmínky v 3.2.1 získáme:

$$1 - 1 = t\nabla_{D_0}(t)$$

$$\nabla_{D_0}(t) = 0$$



Obrázek 3.15: Skein diagram pro diagram trojlístkového uzlu. [8, s. 48]

Můžeme si všimnout, že $\nabla_{D_0}(t)$ je přesně to, co hledáme – Alexandrův-Conwayův polynom triviálního spojení dvou uzlů, budeme ho značit $\circ\circ$. Takže jsme zjistili, že platí:

$$\nabla_{\circ\circ}(t) = 0.$$

Ve skutečnosti tento vzorec můžeme zobecnit i na libovolně velké spojení triviálních uzlů. Pokud označíme spojení tvořené n triviálními uzly jako \circ^n , potom platí

$$\nabla_{\circ^n}(t) = 0.$$

Trojlístkový uzel. Ale co když máme obtížnější uzel, například trojlístek?

Myšlenka v tomto případě je stejná jako pro triviální spojení uzlů: pomocí skein relace z definice 3.2.1 budeme „rozkládat“ diagram trojlístkového uzlu, dokud nám nezbudou pouze triviální uzly. V tomto případě nám už nebude stačit pouze jedna skein relace, budeme ji muset napsat několikrát. Z těchto skein relací nám vznikne *skein diagram* (či *skein strom*).

Skein diagram pro trojlístkový uzel je znázorněn na obrázku 3.15.

Trojlístek má tři křížení, takže jsme si zvolili jedno z nich a provedli jsme na něm skein operaci, jak jen znázorněno na obrázku. Tohle zvolené křížení je pozitivní, takže jsme ho přejmenovali na D_+ . Po použití skein operace jsme obdrželi dvě projekce: negativní D_- a nulové D_0 . Je vidět, že D_- je topologicky ekvivalentní triviálnímu uzlu, a tedy $\nabla_{D_-}(z) = 1$. Proto D_- nebude vytvářet žádné další větve. Teď napíšeme skein relaci pro první dvojici uzlů, bude to vypadat následujícím způsobem:

$$\nabla_{D_+}(z) = 1\nabla_{D_-}(z) + z\nabla_{D_0}(z).$$

Když dosadíme $\nabla_{D_-}(z) = 1$, obdržíme

$$\nabla_{D_+}(z) = z\nabla_{D_0}(z).$$

Podíváme se na D_0 , zase můžeme použít skein operaci. Použijeme ji na pozitivní křížení a zase ho přejmenujeme na D_+ . Jako předtím, obdržíme dvě projekce D_- a D_0 . Všimněme si, že D_- je ekvivalentní spojení dvou uzlů, tedy z předchozího příkladu dostáváme $\nabla_{D_-} = 0$. D_0 je ekvivalentní triviálnímu uzlu, takže $\nabla_{D_0}(z) = 1$. Dohromady dosazením do skein relace obdržíme vztah:

$$\nabla_{D_0}(z) = 0 + z \cdot 1 = z.$$

Dosazením do původní rovnosti pak získáme:

$$\nabla_D(z) = \nabla_{D_+}(z) = 1 + z^2.$$

Ted' když máme Alexandrův-Conwayův polynom, můžeme jednoduše pomocí vztahu 3.1 spočítat i Alexandrův polynom, dostaneme totiž:

$$\Delta_D(s) = \nabla_D \left(\sqrt{s} - \frac{1}{\sqrt{s}} \right) = 1 + \left(\sqrt{s} - \frac{1}{\sqrt{s}} \right)^2 = s + \frac{1}{s} - 2$$

Připomněte si, že Alexandrův polynom jsme počítali pomocí Seifertovy plochy a Seifertovy matice, zatímco pro Alexandrův-Conwayův polynom stačil pouze rozklad uzlu pomocí skein diagramu. Výpočet Alexandrova-Conwayova polynomu je proto výrazně jednodušší než výpočet Alexandrova. Takže často je výhodnější na začátku spočítat Conwayův polynom, a pak pomocí vztahu 3.1 dostat Alexandrův.

3.3 Jonesův polynom

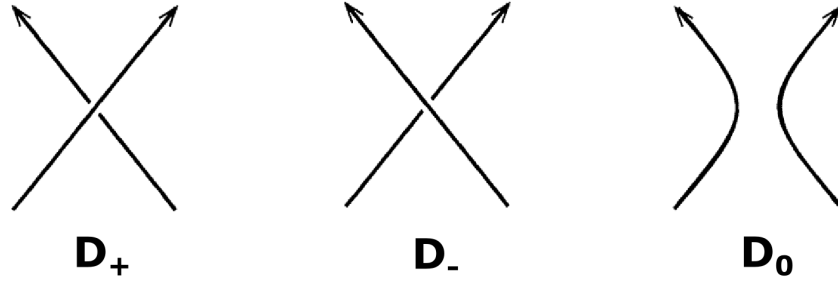
Už jsme měli dva uzlové polynomy: Alexandrův a Alexandrův-Conwayův, tak proč bychom potřebovali nějaký další? Vzpomeňme si na to, k čemu ty polynomy jsou. Za prvé, jsou to uzlové invarianty: pokud uzel totiž rozuzlíme, ten polynom musí zůstat stejný. Za druhé, koeficienty v polynomu "kódují" určité vlastnosti uzlu. Bohužel ne všechny vlastnosti se dají poznat pomocí Alexandrova nebo Conwayova polynomu. Například, chiralita molekul – vlastnost, která je velmi důležitá pro chemiky, – není „zakódována“ v koeficientech těchto polynomů. A proto bychom potřebovali nějaký silnější polynom, který by dokázal tuto vlastnost rozlišit.

Definice 3.3.1. *Jonesův polynom*, značený V , je polynom, který splňuje následující dvě vlastnosti:

1. $V_{\circ}(t) = 1$, kde \circ je triviální uzel nebo jeho projekce.
2. Předpokládejme, že máme tři diagramy uzlu D_+ , D_- , D_0 , které jsou úplně stejné až na jedno křížení, a rozdíl v tomto křížení je zobrazen na obrázku 3.16. Nechť $V_{D_+}(t)$, $V_{D_-}(t)$ a $V_{D_0}(t)$ jsou příslušné Jonesovy polynomy.

Potom platí následující vztah:

$$\frac{1}{t}V_{D_+}(t) - tV_{D_-}(t) = \left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}} \right) V_{D_0}(t)$$



Obrázek 3.16: Diagramy uzlu z definice Jonesova polynomu.[2, s. 165]

Můžeme si všimnout, že tato definice velmi připomíná dvě předchozí. První vlastnost je stejná, druhá vlastnost má obdobný tvar. Ve skutečnosti Jonesův polynom původně byl definován jinak s využitím mnohem abstraktnějších a obtížnějších matematických oblastí. A souvislost s Alexandrovým polynomem byla překvapením i pro matematiky.

Jonesův polynom je polynom v neznámé \sqrt{t} , tedy místo x všude obsahuje \sqrt{t} . Navíc je to *Laurentův polynom*, což znamená, že tento polynom může mít i záporné mocniny. Například, polynom

$$p(x) = 3x^{10} - x^4 + 3 - x^{-1} + x^{-3}$$

je Laurentův, neboť obsahuje x^{-1} a x^{-3} .

Jonesův polynom pro jednu z projekcí Hopfova spojení uzlů je následující:

$$V_{H_-}(t) = -t^{-\frac{1}{2}} - t^{-\frac{5}{2}}$$

Výpočet Jonesova polynomu je analogický s výpočtem Alexandrova-Conwayova, to znamená, že je potřeba vytvořit skein diagram. Protože se však koeficienty skein diagramů liší, výpočet v Jonesově případě je poněkud obtížnější. Obtížnost lze okamžitě vidět, pokud vypíšeme Jonesův polynom jako součet Jonesových polynomů triviálních spojení uzlů jako výsledek použití skein diagramu (viz odvození na s. 27):

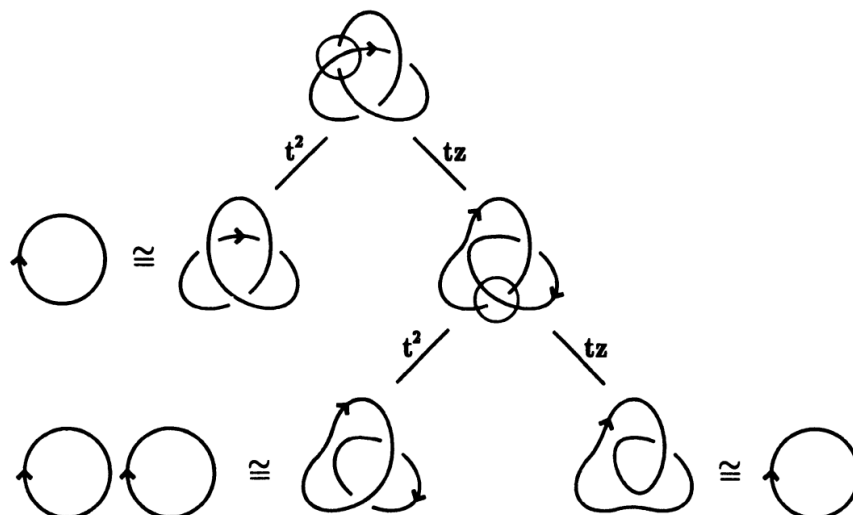
$$V_D(t) = f_1(t)V_{\circ}(t) + f_2(t)V_{\circ\circ}(t) + \dots + f_n(t)V_{\circ_n}(t)$$

Pro Alexandrův polynom s využitím již dokázaného výsledku můžeme tento výraz zjednodušit: všechny sčítance na pravé straně kromě prvního jsou rovny nule. Bohužel toto neplatí pro Jonesův polynom. Takže na začátku potřebujeme vypočítat Jonesův polynom pro triviální spojení uzlů.

Tady uvedeme pouze výsledek:

Věta 3.3.1. *Jonesův polynom triviálního spojení uzlů, které je tvořeno n komponentami, splňuje následující vztah:*

$$V_{\circ_n}(t) = (-1)^{n-1} \left(\sqrt{t} + \frac{1}{\sqrt{t}} \right)^{n-1}$$



Obrázek 3.17: Skein diagram pro diagram trojlístkového uzlu. [7, s. 221]

Důkaz matematickou indukcí, že tento vzorec skutečně platí, je poměrně technický, proto ho tady uvádět nebudeme. Ale z tohoto jednoduchého příkladu už je vidět, že výpočet a tvar Jonesova polynomu je mnohem obtížnější než u dvou předchozích polynomů, ale na druhou stranu tento polynom je mnohem silnější, dokáže totiž „rozlišovat“ mezi více uzly než ty předchozí polynomy.

3.3.1 Výpočet Jonesova polynomu

Jak už jsme si říkali, výpočet Jonesova polynomu je prováděn postupným „rozkládáním“ uzlu na triviální uzly a jejich spojení pomocí skein diagramu. Jediný rozdíl v porovnání s tím, co jsme dosud měli u Alexandrova-Conwayova polynomu je to, že Jonesův polynom triviálního spojení už není nula, ale má tvar uvedený v 3.3.1.

Zkusme vypočítat Jonesův polynom trojlístkového uzlu pomocí skein diagramu, výpočet je znázorněn na obrázku 3.17.

Skein diagram znázorňuje následující výpočet:

$$V_K(t) = t^2 V_{\circ}(t) + t^3 \left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}} \right) V_{\infty} + t^2 \left(\sqrt{t} - \frac{1}{\sqrt{t}} \right)^2 V_{\circ}(t) = t + t^3 - t^4.$$

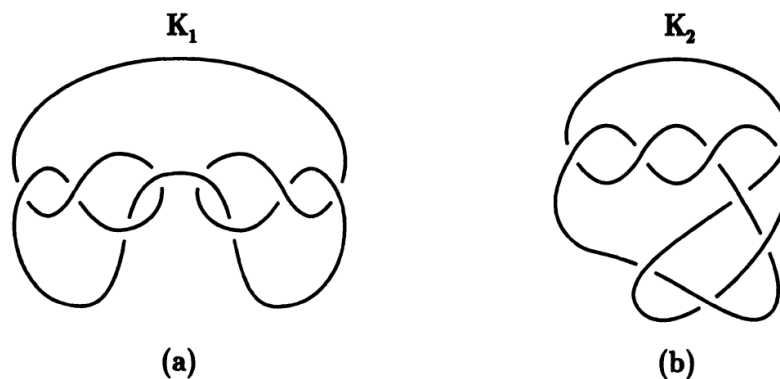
[7, s. 222]

Bohužel Jonesův polynom ne vždycky dokáže rozlišit mezi jednotlivými uzly. Existují totiž různé uzly, které mají stejný Jonesův polynom.

Jako příklad si můžeme uvést uzly K_1 a K_2 , zobrazené na obrázku 3.18.

Tyto uzly jsou složitější než například trojlístkový uzel, takže jenom z pohledu nedokážeme rozpoznat, jestli jsou topologicky ekvivalentní či ne, k jejich rozlišení potřebujeme uzlové polynomy. Jonesův polynom těchto uzlů je stejný:

$$V_{K_1}(t) = V_{K_2}(t) = \left(t^{-2} - t^{-1} + 1 - t + t^2 \right)^2$$



Obrázek 3.18: Uzly K_1 a K_2 , které mají stejné Jonesovy, ale odlišné Alexandrovy polynomy. [7, s. 227]

Proto bychom mohli předpokládat, že tyto uzly jsou topologicky ekvivalentní. Avšak není tomu tak: tyto uzly totiž mají různé Alexandrovy polynomy:

$$\Delta_{K_1}(t) = (t^{-1} - 3 + t)^2$$

$$\Delta_{K_2}(t) = -t^{-3} + 3t^{-2} - 5t^{-1} + 7 - 5t + 3t^2 - t^3$$

Takže tyto uzly nejsou topologicky ekvivalentní, i když mají stejné Jonesovy polynomy. Ale může nastat i obrácené situace: existují uzly, které jsou “rozlišovány” Jonesovým polynomem, ale mají stejný Alexandrův polynom. [7, s. 227]

Existují i neekvivalentní uzly, které mají stejné jak Alexandrovy, tak Jonesovy polynomy. Například, jsou to uzly K_1 a K_2 na obrázku 3.19.

Jejich Jonesův polynom je

$$V_{K_1}(t) = V_{K_2}(t) = -t^{-3} + 2t^{-2} - 3t^{-1} + 5 - 4t + 4t^2 - 3t^3 + 2t^4 - t^5$$

a Alexandrův polynom je

$$\Delta_{K_1}(t) = \Delta_{K_2}(t) = 2t^{-2} - 6t^{-1} + 9 - 6t + 2t^2.$$

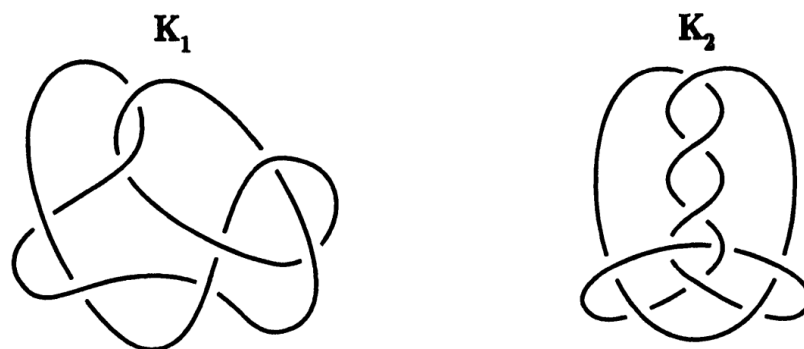
Pomocí pokročilejších metod lze zjistit, že tyto uzly topologicky ekvivalentní nejsou, i když uzlové polynomy je nerozlišují. [7, s. 227-228]

3.4 Další uzlové polynomy

Zmínili jsme tři uzlové polynomy, ale existují i další:

1. HOMFLY polynom

Tento polynom byl motivován pokusem o generalizaci Jonesova a Alexandrova polynomu a jeho název je tvořen prvními písmeny příjmení jeho objevitelů: **H**oste, **O**cneanu, **M**illett, **F**reyd, **L**ickorish a **Y**etter. Zajímavým faktem je, že tito matematici objevili tentýž polynom, když pracovali ve čtyřech různých nezávislých skupinách. [2, s. 168–169]



Obrázek 3.19: Uzly K_1 a K_2 , které mají stejné jak Alexandrovy, tak Jonesovy polynomy. [7, s. 228]

Na rozdíl od předchozích polynomů, HOMFLY polynom je Laurentovým polynomem dvou proměnných m a l . Například, HOMFLY polynom pro Hopfovo spojení (viz obrázek 2.15) má následující tvar:

$$P(m, l) = l^{-3}m^{-1} + l^{-1}m^{-1} - l^{-1}m. [9]$$

2. Kauffmanův polynom

Kauffmanův polynom je pojmenován po americkém matematikovi Loisevi Kauffmanovi. Podobně jako HOMFLY polynom, Kauffmanův polynom vznikl v pokusech o generalizaci Jonesova a Alexandrova polynomu. Je to Laurentův polynom dvou neznámých.

Například, Kauffmanův polynom trojlístkového uzlu je následující:

$$F(m, l) = -m^4 - 2m^2 + (m^4 + m^2)l^2 + (m^5 + m^3)l.$$

[10]

3. Závorkový polynom

Závorkový polynom (anglicky *bracket polynomial*), podobně jako Kauffmanův polynom, byl objeven Louisem Kauffmanem v roce 1987. Není to uzlový invariant: závorkový polynom totiž není invariantní vůči prvnímu Reidemeisterovu pohybu. Ale ze závorkového polynomu lze odvodit Jonesův polynom, který už uzlovým invariantem je. Na rozdíl od dvou předchozích polynomů závorkový polynom je polynomem jedné proměnné.

Jako příklad uvedeme závorkový polynom trojlístkového uzlu:

$$L(a) = -a^5 - a^{-3} + a^{-7}.$$

[2, s. 149]

4. Aplikace

Většina matematických oblastí se objevila díky motivací z přírodních věd, a teorie uzlů není výjimkou. Jak už jsme zmínili na začátku, teorie uzlů měla fyzickou a chemickou motivaci, a až později se začala vyvíjet jako matematická disciplína. Ale ukázalo se, že teorie uzlů může být užitečná i pro některé současné přírodní vědy.

4.1 DNA

Jedním z nejzásadnějších objevů dvacátého století je bezesporu odhalení základní struktury molekuly DNA. Tento objev učinili dva mladí vědci z Cambridge, James Watson a Francis Crick, za což v roce 1962 obdrželi Nobelovou cenu za fyziologii a lékařství.

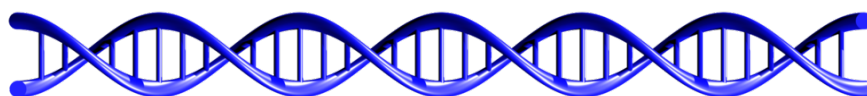
Zjednodušeně molekulu DNA (deoxyribonukleové kyseliny) můžeme chápat jako dvě lineární vlákna propletená ve formě dvojité šroubovice s lineární osou, viz obrázek 4.1. A tato molekula může nabývat i tvar prstenu, může se zamotávat a zauzlovat se. Dokonce se může dočasně zlomit.

DNA podléhá biologickým procesům, které se nazývají replikace, transkripce a rekombinace. Replikace je proces tvorby kopií molekuly DNA, transkripce je přepis genetické informace z DNA do molekuly RNA, rekombinace je modifikace molekul DNA. Všechny tyto procesy jsou nezbytné pro život. Ale jak už jsme si řekli, tyto molekuly se mohou různými způsoby zamotávat a zauzlovat podobně jako telefonní kabel, tento jev se nazývá *supercoiling* a je znázorněn na obrázku 4.2. Tím se délka molekuly zkracuje. Supercoiling umožňuje efektivnější ukládání DNA v jádře buňky. Na druhou stranu zamotaný tvar DNA výrazně komplikuje procesy replikace, transkripce a rekombinace. Proto je potřebný nějaký způsob manipulace s takovými molekulami DNA.

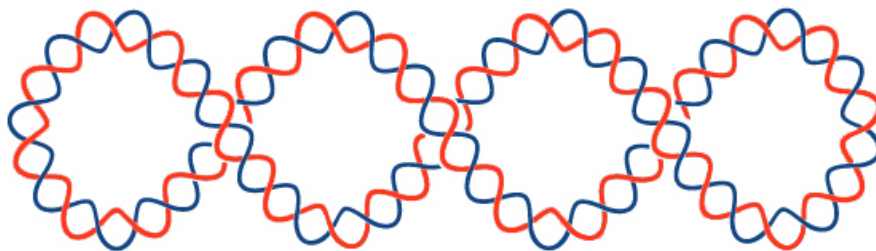
A takový způsob skutečně existuje – pomocí enzymu, který se nazývá topoisomerasa. Enzymy jsou speciální bílkoviny, které ovlivňují chemické reakce a řídí většinu biochemických procesů v těle všech živých organismů včetně člověka.

Termín topoisomerasa se může zdát poněkud zvláštní, ale dá se relativně snadno vysvětlit. Dvě molekuly se stejným chemickým složením, ale odlišnou strukturou, se nazývají *izomery*. Z toho vyplývá, že dvě molekuly DNA se stejnou sekvencí párů bází, ale různými spojovacími čísly jsou také izomery. Ale kvůli různým spojovacím číslům nejsou topologicky ekvivalentní. Topologicky ekvivalentní izomery se nazývají *topoizomery*, a enzym, který způsobuje změnu spojovacího čísla, se nazývá *topoizomerasa*.

Zatímco v teorii uzlů matematici nemohou uzel rozbít nebo nechat vlákna projít skrz sebe, tyto enzymy se při rozmotávání DNA nemusejí řídit těmito pravidly.



Obrázek 4.1: Struktura molekuly DNA.



Obrázek 4.2: Supercoiling molekuly DNA.

Topoizomerázy působí rychlým oddělením daného počtu řetězců DNA a jejich rekombinací. Počet přerušných a rekombinovaných vláken úzce souvisí s počtem rozuzlení tohoto uzlu. Tyto enzymy mohou také provádět operace s vlákny DNA podobné třem Reidemeisterovým pohybům, aby rozmotaly DNA.

Například, na obrázku 4.3 je znázorněn princip fungování topoizomerázy druhého typu. Na začátku rozřízne jedno z vláken DNA, „vyndá“ druhé vlákno a zase spojí dva konce rozříznutého vlákna. A potom udělá přesně druhý Reidemeisterův pohyb, aby oddělila vlákna od sebe.

Takže molekuly DNA lze zkoumat pomocí teoretických nástrojů teorie uzlů. Výzkum v této oblasti je teď velmi aktivní a může přivést k zajímavým výsledkům. [7, s. 267–283]

4.2 Syntéza zauzlených molekul

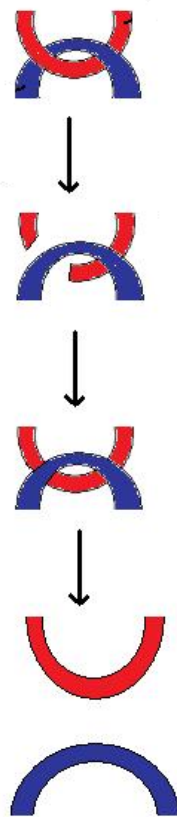
DNA je velmi komplikovaná molekula, a proto se ty uzly u DNA studují obtížně. Můžeme se ptát, jestli jsou nějaké jednodušší molekuly, které se mohou zamotávat do uzlů. A pokud jsou, jak můžeme tyto molekuly vytvářet.

Na začátku si připomeneme pojem izomerů: jsou to molekuly, které mají stejné chemické složení, ale odlišnou strukturu. Například, pokud máme dva řetězce stejných atomů takové, že první řetězec tvoří triviální uzel, ale druhý řetězec je zamotán obtížnějším způsobem, pak z chemického hlediska mohou mít úplně různé vlastnosti. Například, první molekula se může chovat jako olej, druhá molekula – jako želatina.

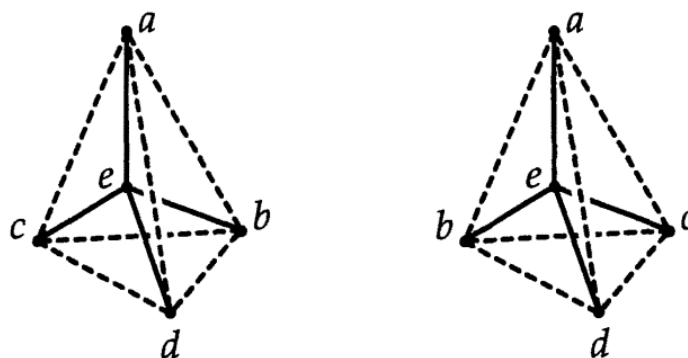
Izomery ale existují různé. Když se podíváme na obrázek 4.4, tak vidíme, že molekuly na obrázku jsou úplně stejné až na přejmenování atomů, a to je právě to, co nechceme. Zajímají nás molekuly, které mají stejné atomy a vazby mezi nimi, ale odlišné molekulární grafy. Takovým dvojicím molekul říkáme *topologické stereoizomery*.

K čemu jsou tyto topologické stereoizomery dobré? Jsou užitečné pro chemiky například proto, že mohou poskytnout mnoho zajímavých látek dosud neznámých.

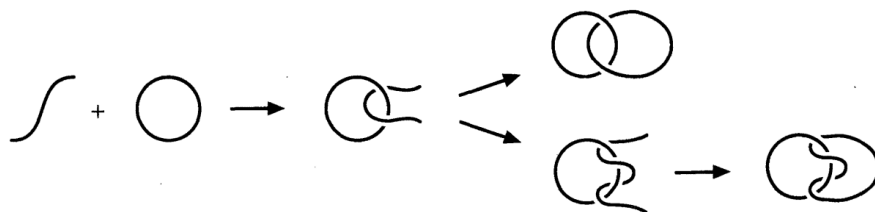
Topologické stereoizomery můžeme získat například syntézou různými způsoby zauzlených molekul. Pak nezauzlená „verze“ molekuly bude topologickým stereoizomerem zauzlená. Chemici nazývají několik vzájemně propojených kružnicových molekul slovem *katenan* (*catena* znamená v řečtině řetězec). Poprvé byl katenan syntezován relativně nedávno, v roce 1960. Jeho syntéza byla provedena



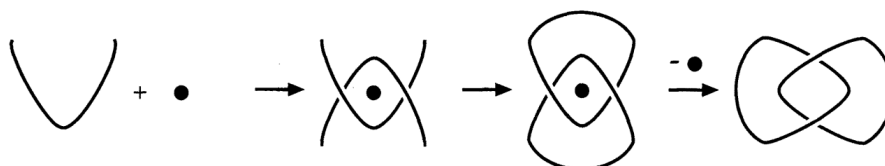
Obrázek 4.3: Princip fungování topoizomerázy druhého typu. [5]



Obrázek 4.4: Příklad izomerů, které nejsou topologickými stereoizomery. [2, s. 196]



Obrázek 4.5: Tvorba spojení molekul. [2, s. 198]



Obrázek 4.6: Jeden z postupů na tvoření netriviálního spojení uzlů. [2, s. 199]

pomocí tzv. *makrocyclizace*, což je tvorba cyklických molekul, které v sobě obsahují alespoň 20 atomů. Když už je cyklická molekula vytvořena, dalším cílem je prostrčit jí druhou molekulu, tvořenou řetězcem atomů, a potom slepit konce druhé molekuly (viz obrázek 4.5).

Když chemici úspěšně vytvořili toto netriviální spojení molekul, tak se potom zaměřili na tvorbu netriviálních uzlů.

Jak obvykle tvoříme uzly? Když to děláme rukama, tak jednou rukou držíme konec vlákna, zatímco druhou rukou tvoříme smyčku a prosouváme druhý konec vlákna přes tuto smyčku. Potom slepíme oba konce a obdržíme uzel.

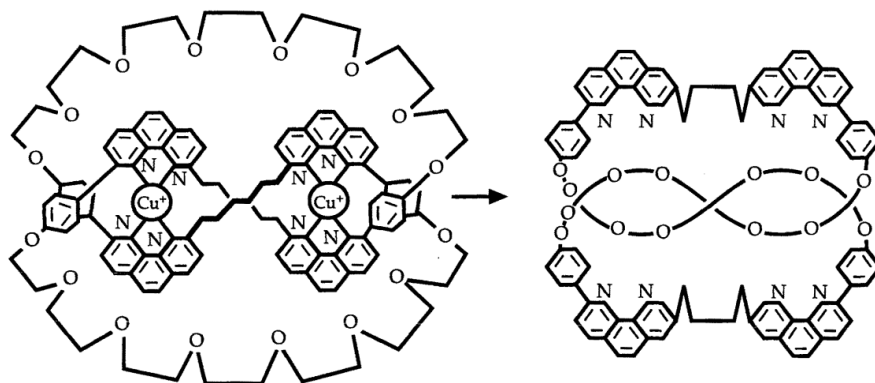
Bohužel, na atomické úrovni to tak nejde, neboť mnoho molekul je tvořeno malým počtem atomů a proto jsou velmi nepružné. Takže je potřeba nějaký jiný postup na tvorbu zauzlených molekul.

S takovým postupem přišli Christina Dietrich-Buchecker a Jean-Pierre Sauvage ze Štrasburské univerzity ve Francii. Vymysleli postup na proplétání dvou molekulárních vláken s využitím speciálního kovu, který se dává mezi tato vlákna. Odstraněním tohoto kovu a slepením konců vláken pak vznikne netriviální spojení uzlů. Tento proces je znázorněn na obrázku 4.6.

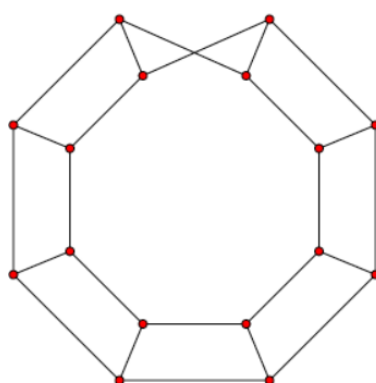
Dietrich-Buchecker a Sauvage si pak uvědomili, že kdyby mohli šablonu zdvojnásobit, mohli by v podstatě vytvořit tři křížení. Takže spojením konců smyček a odstraněním kovů vznikne trojlístkový uzel. V roce 1988 oznámili první úspěšnou syntézu zauzlené molekuly – trojlístkového uzlu. Tato molekula je znázorněna na obrázku 4.7.

Ve stejné době David Walba a jeho kolegové z Koloradské Univerzity se také snažili vyřešit problém tvorby zauzlených molekul, ale jiným způsobem. Wasserman a van Gulick nezávisle na sobě na konci 50. let navrhli syntezovat molekulu ve tvaru Möbiova žebříku (viz obrázek 4.8), a potom zlomit jednotlivé příčky.

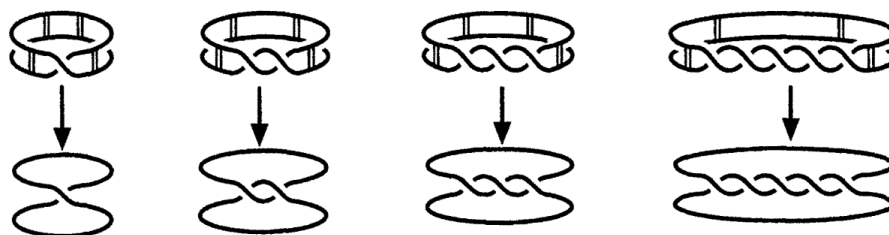
Na obrázku 4.9 jsou znázorněny Möbiovy žebříky s jedním, dvěma, třemi a pěti krouceními a jím příslušejícími uzly: triviální uzel, Hopfovo spojení, trojlístkový uzel, a ještě jeden dosud nezmiňovaný uzel, který se nazývá $(5, 2)$ -torový uzel (an-



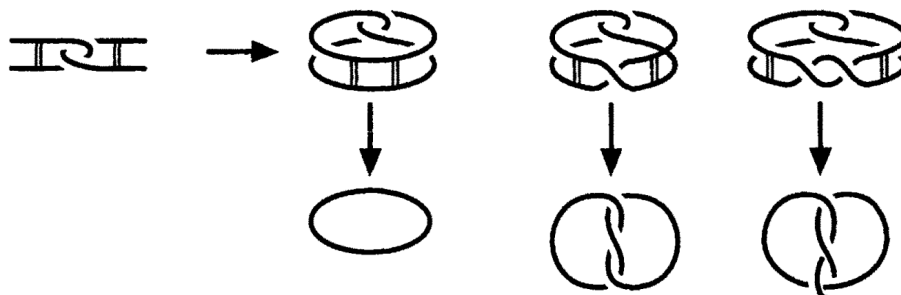
Obrázek 4.7: Syntéza trojlístkového uzlu. [2, s. 199]



Obrázek 4.8: Möbiův žebřík.



Obrázek 4.9: Möbiovy žebříky a vzniklé uzly. [2, s. 200]



Obrázek 4.10: Zhengova zauzlená molekula. [2, s. 200]

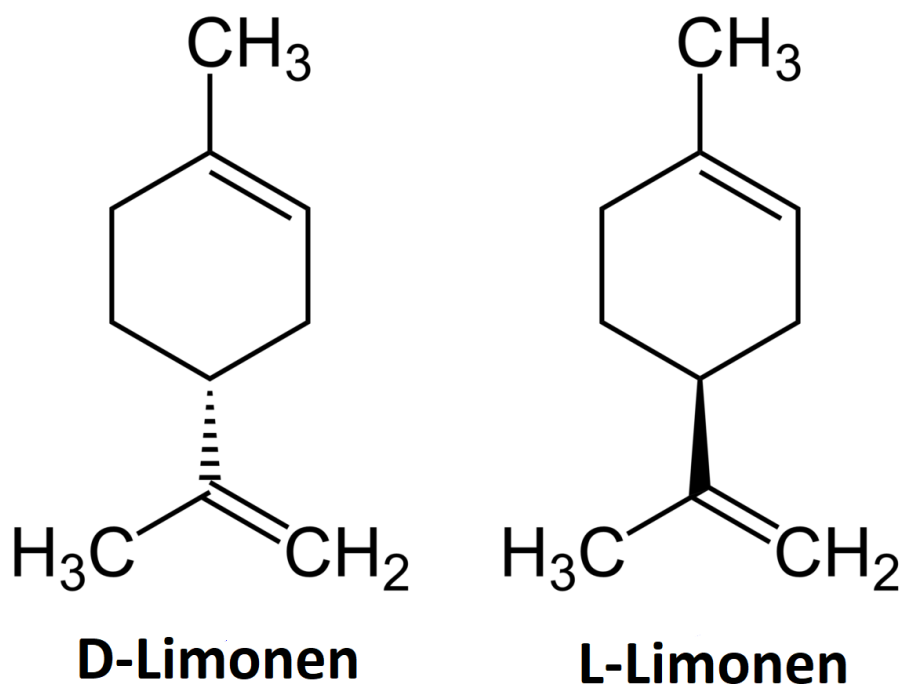
glicky $(5, 2)$ -torus knot). Bohužel použité molekuly se ukázaly příliš nepružnými na vytvoření Möbiova žebříku s potřebným počtem přiček a kroucení. Nicméně Qun Yi Zheng, pracující pod Walbovým vedením, v roce 1990 oznámil úspěšnou syntézu zauzlené molekuly, viz obrázek 4.10. [2, s. 195-200]

4.3 Chiralita

Jednou z nejdůležitějších vlastností uzlu je jeho *chiralita*. Slovo *chirální* pochází ze starořeckého slova $\chi\rho\rho$, což znamená *ruka*. Ruka se vždycky liší od svého zrcadlového obrazu (není osově souměrná), takže objekt je *chirální*, pokud není totožný se svým zrcadlovým obrazem. Pokud objekt není chirální, říká se mu *achirální*.

Chiralita je v chemii opravdu důležitá, protože molekula a její zrcadlový obraz mohou mít různé vlastnosti. Dva zrcadlové obrazy chirální molekuly se nazývají *enantiomery*. Příkladem enantiomerů je limonen, $C_{10}H_{16}$. Jeho enantiomery D- a L-limonen jsou znázorněny na obrázku 4.11. Písmeno D je zkratkou za dextro (pravý), D-limonen je pravostranný enantiomer. Písmeno L je zkratkou za levo, L-limonen je to levostranný enantiomer. Konfigurace jejich molekul jsou téměř stejné, liší se pouze jednou vazbou atomů. L-limonen má tuto vazbu tučnou, což znamená, že vazba vyčnívá z roviny obrazovky směrem k vám, zatímco D-limonen tuto vazbu má čárkovanou, což znamená, že vyčnívá v opačném směru. L-limonen má ostrou citrónovou vůni, zatímco D-limonen má příjemnější pomerančovou vůni.

Chiralita má velký význam i ve farmaceutickém průmyslu. Chirální lék může mít dva různé účinky: jeden z enantiomerů produkuje požadovaný účinek, zatímco



Obrázek 4.11: D- a L-Limonen.

druhý má vedlejší účinek, který by mohl převážit přínos požadovaného účinku. V 60. letech 20. století byl lék Thalidomid podáván těhotným ženám, aby se vyhnuly ranní nevolnosti. Způsoboval ale kromě snížení nevolnosti i vrozené vady. Docházelo k tomu proto, že zatímco L-Thalidomid uvolňoval ranní nevolnost, D-Thalidomid způsoboval poškození plodu. Pokud je tedy o léku známo, že je chirální, farmaceutický průmysl se může rozhodnout vyrábět pouze preferovanou formu, aby se minimalizovaly vedlejší účinky a maximalizovala účinnost. To je nákladné, protože většina metod molekulární syntézy nerozlišuje mezi různou chiralitou. Bohužel, stejně jako u Thalidomidu, v mnoha případech má špatná chiralita negativní vliv na lidské tělo.

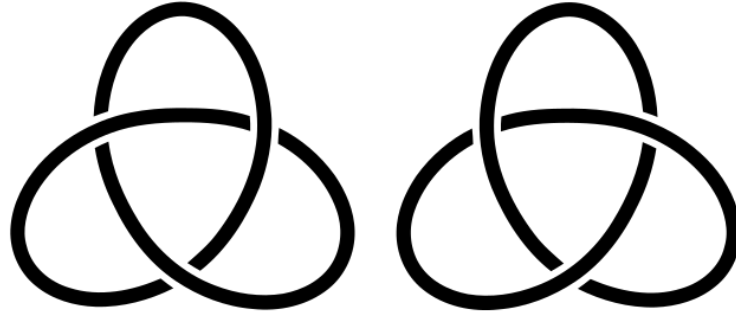
V průběhu let se vědci v oblasti teorie uzlů snažili najít způsob, jak matematicky popsat a určit tuto vlastnost. V roce 1986 matematik Jonathan Simon dokázal, že Möbiův žebřík se čtyřmi nebo více příčkami je vždy topologický chirální. Toto je matematický výsledek, který má chemické důsledky. Tvrdí, že každá molekula s molekulárním grafem, který má tvar Möbiova žebříku, má vždy topologický stereoizomer – její zrcadlový obraz. Chemici se v současné době pokoušejí o syntézu Möbiových žebříků.

4.3.1 Zkoumání chiraloty

Chemici hledají zajímavé páry topologických stereoizomerů, a proto by chtěli vědět, které uzly jsou chirální a které jsou achirální. První uzel, který se ukázal jako chirální, byl trojlístkový uzel: levostranný a pravostranný trojlístek nejsou topologicky ekvivalentní, viz obrázek 4.12.

Příkladem achirálního uzlu je osmičkový uzel.

Existují matematické způsoby, jak poznat, zda je uzel chirální či není?



Obrázek 4.12: Trojlístkový uzel a jeho zrcadlový obraz.

Metoda 1: Uzlový polynom. Už jsme viděli několik různých uzlových polynomů – Alexandrův, Alexandrův-Conwayův, Jonesův. Teď budeme potřebovat právě Jonesův polynom. V průběhu vývoje matematické teorie uzlů se různí teoretici snažili najít způsoby, jak rozlišit, zda je uzel chirální nebo ne. Výpočet Jonesova polynomu je jedinou dosud známou metodou, která může skutečně určit takový rozdíl. Existuje totiž věta, která dává vztah mezi Jonesovým polynomem a chiralitou uzlu.

Věta 4.3.1. *Necht' D je diagram uzlu K , D^* je diagram jeho zrcadlového obrazu. Pokud $V_D(t) \neq V_{D^*}(t)$, potom je uzel K chirální.*

Takže když chceme zjistit, zda je uzel chirální, tak vypočítáme Jonesovy polynomy tohoto uzlu a jeho zrcadlového obrazu. Pokud ty polynomy vyjdou různé, tak to znamená, že tento uzel je chirální. Bohužel obrácená implikace neplatí: rovnost Jonesových polynomů uzlu a jeho zrcadlového obrazu neznámá, že uzel je achirální. Takže Jonesův polynom je užitečný pro stanovení topologické chiralitty, ale ne pro dokazování topologické achiralitty.

Zkusme teď s využitím Jonesova polynomu prozkoumat chiralitu již známého trojlístkového uzlu. Připomínáme, že jeho Jonesův polynom je následující:

$$V_K(t) = t + t^3 - t^4$$

Dosazením t^{-1} za t získáme:

$$V_K(t^{-1}) = \frac{1}{t} + \frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^4}$$

Tyto polynomy se nerovnají, takže trojlístkový uzel je skutečně chirální.

Už jsme si říkali, že osmičkový uzel je achirální. Jonesův polynom osmičkového uzlu je následující:

$$V_K(t) = t^2 - t + 1 - \frac{1}{t} + \frac{1}{t^2}$$

Dosazením t^{-1} za t získáme:

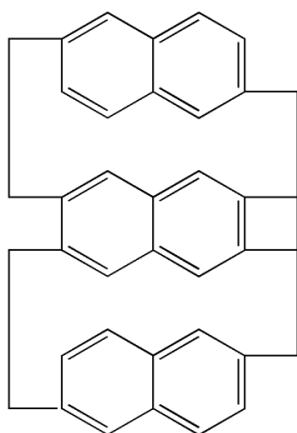
$$V_K(t^{-1}) = \frac{1}{t^2} - \frac{1}{t} + t^2 - t + 1$$

Vidíme, že se po dosazení polynom nezměnil (stačí vhodným způsobem přeuspořádat sčítance), ale to ještě nedokazuje achiralitu osmičkového uzlu.

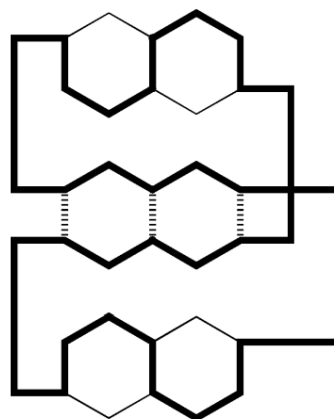
Jedinou nevýhodou této metody je, že ne všechny molekuly jsou ve tvaru uzlu. Například Möbiův žebřík neobsahuje žádný uzel ani spojení uzlů, takže potřebujeme nějakou jinou metodu, abychom zjistili, že tato molekula je topologicky chirální.

Metoda 2: Použití jiných chirálních molekul. Myšlenka této metody je ukázat, že pokud je nějaká konkrétní molekula topologicky chirální, pak i jiná molekula, která ji obsahuje, je topologicky chirální. To je opravdu užitečné, zvláště když molekula obsahuje Möbiův žebřík. Na obrázku 4.13 je znázorněna molekula trojvrstvého naftalenofanu (zkráceně TLN). Pro nás je důležité to, že tato molekula v sobě obsahuje Möbiův žebřík (na obrázku 4.14 je vyznačen tučně).

Pokud by se TLN zdeformoval do zrcadlového obrazu, pak by mohl být deformován i Möbiův žebřík. Z toho vyplývá, že TLN je chirální.



Obrázek 4.13: Molekula trojvrstvého naftalenofanu. [8, s. 80]



Obrázek 4.14: Möbiův žebřík v molekule TLN. [8, s. 81]

4.4 Uzly a statistická mechanika

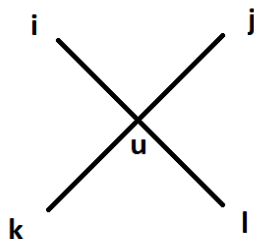
Statistická mechanika pomocí statistiky zkoumá makroskopické vlastnosti materiálů. Nejjednodušším příkladem je vroucí voda v konvici: ta je tvořena jednotlivými atomy, interakce kterých potom určuje makroskopické vlastnosti vody. Mezi makroskopické vlastnosti patří například teplota, objem, viskozita a tlak. Spolu s kvantovou mechanikou se statistická mechanika zabývá vlastnostmi materiálů z pohledu atomů. Jednotlivé atomy se v látce pohybují velmi nepravidelně, a proto jsou obtížné na matematické zkoumání. Statistická mechanika se zabývá „ideálním“ modelem látky, který má název *statistický mechanický model*. Tento model má i matematickou reprezentaci ve tvaru partiční sumy Z :

$$Z = \sum_{\sigma} \exp\left(\frac{-E(\sigma)}{kT}\right),$$

kde σ je stav určitého modelu, $E(\sigma)$ je celková energie tohoto stavu, T je absolutní teplota a k je Boltzmannova konstanta. Sčítá se přes všechny stavy modelu.

Pokud lze přesně odvodit partiční sumu modelu, pak říkáme, že tento model je *přesně řešitelný*. Ukázalo se, že čtné modely jsou přesně řešitelné, zejména od příchodu Drinfel'dovy kvantové grupy. Díky myšlence kvantové grupy a také díky nezávislé práci ve statistické mechanice se ukázalo, že partiční suma úzce souvisí s invarianty uzlů (a jejich spojení).

Uvažujme dvojrozměrnou mřížku. Na mřížce definujeme tzv. *vrcholový model*. Tento model je jedním z klasických modelů dvojrozměrné statistické mechaniky. Jak název napovídá, čtyřem hranám, které vycházejí z vrcholů vrcholového modelu, přiřadíme čtyři stavové proměnné i, j, k, l , viz obrázek 4.15.

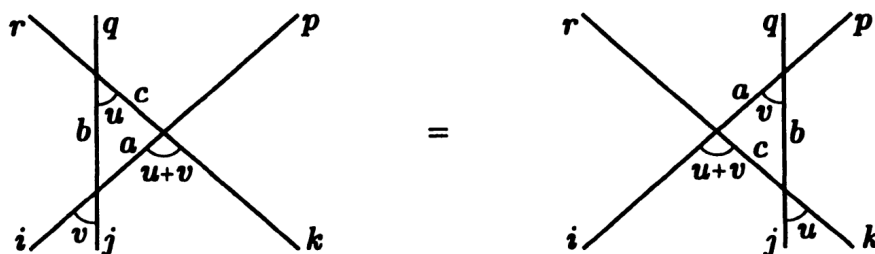


Obrázek 4.15: Vrcholový model.

Pro tento model je možné určit pravděpodobnost realizace w ve vrcholu. Tato pravděpodobnost se značí $w(i, j, k, l)(u)$. Proměnná u se nazývá spektrální parametr a udává vzájemné interakce systému.

Postačující podmínkou pro řešitelnost statistického mechanického modelu je *Yang-Baxterova rovnice*. Tato rovnice je obtížná, a proto nebudeme uvádět její obecný tvar. V případě vrcholového modelu má tato rovnice následující tvar:

$$\sum_{a,b,c} w(b,c,q,r)(u)w(a,k,p,c)(u+v)w(i,j,a,b)(v) = \sum_{a,b,c} w(a,b,p,q)(v)w(i,c,a,r)(u+v)w(j,k,b,c)(u) \quad (4.1)$$



Obrázek 4.16: Yang-Baxterova rovnice pomocí diagramu. [7, s. 250]

Pokud tedy najdeme Boltzmannovu váhu w , která vyhovuje tyto rovnici, model je přesně řešitelný. Ale jak to souvisí s teorií uzlů?

Pokud se pečlivě podíváme na rovnici a obrázek 4.16, který jí odpovídá, můžeme si všimnout, že je to přesně třetí Reidemeisterův pohyb. Jinými slovy, partiční suma se třetím Reidemeisterovým pohybem nemění.

Ted' uvažujme jiný statistický mechanický model - šestivrcholový model. Je to přesně řešitelný model. V tomto případě mohou stavové proměnné nabývat pouze hodnoty $\frac{1}{2}$ nebo $-\frac{1}{2}$ a ve vrcholu předpokládáme zachování stavových proměnných, tedy $i + j = k + l$. Pokud výše uvedená podmínka zachování není splněna, Boltzmannova váha v tomto vrcholu je nulová.

V tomto případě hodnoty Boltzmannových vah jsou následující:

$$w\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)(u) = w\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)(u) = 1$$

$$w\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)(u) = w\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)(u) = \frac{\sinh u}{\sinh(\lambda - u)}$$

$$w\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)(u) = w\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)(u) = \frac{\sinh \lambda}{\sinh(\lambda - u)}$$

Ve všech ostatních případech $w(i, j, k, l) = 0$.

Funkce \sinh má název *hyperbolický sinus* a je definována následujícím způsobem: $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$.

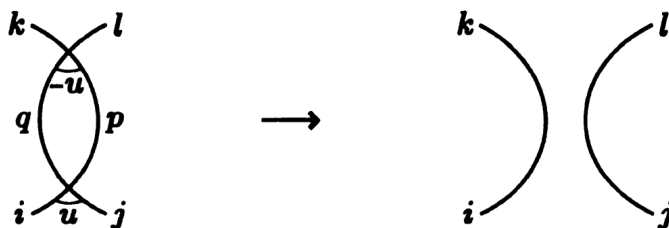
Ve skutečnosti Boltzmannovy váhy, kromě Yang-Baxterovy rovnice, splňují další důležité podmínky ve statistické mechanice. Například, platí následující vztah

$$w(i, j, k, l)(u) = w(-i, -j, -k, -l)(u)$$

Z hlediska teorie uzlů splňují také následující důležitou podmínku, která má název *unitární podmínka*.

$$\sum_{p, q = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} w(i, j, p, q)(u) w(q, p, l, k)(-u) = \delta_{ik} \delta_{jl}$$

Symbol δ_{ik} se nazývá *Kroneckerovo delta* a je roven 1 v případě, když $i = k$. Pokud $i \neq k$, $\delta_{ik} = 0$.



Obrázek 4.17: Unitární podmínka pomocí diagramu. [7, s. 252]

Pokud znázorníme unitární podmínku pomocí obrázku 4.17, můžeme si všimnout, že odpovídá druhému Reidemeisterovu pohybu uzlů.

Můžeme tedy udělat závěr, že partiční suma je uzlovým invariantem vůči druhému a třetímu Reidemeisterovu pohybu. [7, s. 248–255]

Závěr

Cílem mé bakalářské práce bylo vysvětlit základní myšlenky teorie uzlů pochopitelným jazykem. Jak už jsem zmínila v úvodě, matematická teorie uzlů je rozsáhlá a náročná disciplína, ale zkusila jsem zjednodušit obtížné pojmy a vysvětlit je pomocí obrázků, aby základní myšlenky byly dostupné i pro laiky.

V první kapitole o historii teorie uzlů jsem se pokusila ukázat, že teorie uzlů nevznikla najednou, ale má dlouhý původ. Mnoho matematiků a fyziků přispělo k jejímu rozvoji. I dnes vývoj matematické teorie uzlů pokračuje.

Druhá kapitola je základem celé práce, neboť mluví o elementárních pojmech v teorii uzlů: co je uzel, jak ho můžeme znázornit v rovině, jaké existují uzly a jaké operace s nimi můžeme provádět.

Třetí kapitola je věnovaná uzlovým polynomům, velmi důležitým uzlovým invariantům. Prozkoumali jsme definice a výpočet Alexandrova, Alexandrova-Conwayova a Jonesova polynomu, a taky jsme uvedly příklady těchto polynomů pro různé uzly.

Čtvrtá kapitola se zabývá aplikacemi teorie uzlů v různých vědách: fyzice, chemii a biologii.

V této práci jsem uvedla pouze malou část matematické teorie uzlů, která je vysvětlitelná jednoduchými pojmy. Ve skutečnosti existuje mnoho dalších zajímavých myšlenek, takže tato práce slouží i jako motivace k dalšímu studiu.

Seznam použité literatury

- [1] ACCELEROMETER, CC BY-SA 3.0 (2011). Borromean seifert surface.png. URL https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Borromean_Seifert_surface.png.
- [2] ADAMS, C. (1994). *Knot Book*. W.H. Freeman.
- [3] HEAP, A. a LACOURT, N. (2020). Space-efficient prime knot 7-mosaics. *Symmetry*, **12**, 576. doi: 10.3390/sym12040576.
- [4] INC., W. R. Mathematica, Version 12.0. Champaign, IL, 2019.
- [5] K90, CC BY-SA 3.0 (2008). Effet des topoisomereses.jpg. URL https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Effet_des_topoisomereses.jpg.
- [6] KILOM691, CC BY-SA 3.0 (2013). Effet des topoisomereses.jpg.
- [7] MURASUGI, K. a KURPITA, B. (1996). *Knot theory and its applications*. Birkhauser Boston.
- [8] PATONE, M. *Knot theory and its applications*. PhD thesis. URL <http://amslaurea.unibo.it/2643/>.
- [9] WEISSTEIN, E. W. Hopf link. From MathWorld—A Wolfram Web Resource. URL <https://mathworld.wolfram.com/HopfLink.html>.
- [10] WEISSTEIN, E. W. Trefoil knot. From MathWorld—A Wolfram Web Resource. URL <https://mathworld.wolfram.com/TrefoilKnot.html>.

Seznam obrázků

1.1	Slavný problém Königsbergových mostů.	4
1.2	Trojlístkový uzel a jeho křížení.	4
1.3	Hopfovo spojení.	5
1.4	Levotočivý a pravotočivý trojlístkové uzly. [8, s. 21]	6
1.5	Oblasti ohraničené méně než čtyřmi oblouky. [8, s. 21]	7
1.6	Redukce. [3, s. 3]	8
2.1	Uzlový diagram trojlístkového uzlu.	11
2.2	Triviální uzel.	12
2.3	Trojlístkový uzel.	12
2.4	Tři různé projekce osmičkového uzlu. [2, p. 3]	13
2.5	Osmičkový uzel.	13
2.6	Elementární pohyby (1) a (1)'. [7, s. 7]	14
2.7	Elementární pohyby (2) a (2)'. [7, s. 7]	14
2.8	Reidemeisterovy pohyby I. typu. [2, s. 13]	15
2.9	Reidemeisterovy pohyby II. typu. [2, s. 13]	15
2.10	Reidemeisterovy pohyby III. typu. [2, s. 13]	15
2.11	Jedna z projekcí triviálního uzlu. [2, s. 16]	16
2.12	Projekce Whiteheadova spojení.	16
2.13	Boromejské prsteny.	17
2.14	Triviální spojení.	17
2.15	Hopfovo spojení.	18
2.16	Výpočet spojovacího čísla. [2, s. 19]	18
2.17	Spojovací číslo triviálního spojení je 0: kružnice se ani neprotínají, takže výsledný součet bude 0.	19
2.18	Spojovací číslo Whiteheadova spojení je 0, protože toto spojení má dvě křížení prvního druhu a dvě křížení druhého druhu.	19
3.1	Diagramy uzlu z definice Alexandrova polynomu.[2, s. 165]	21
3.2	Kulová plocha.	21
3.3	Torus.	21
3.4	Möbiová páska.	22
3.5	Kleinova láhev.	22
3.6	Boromejské prsteny.	22
3.7	Seifertova plocha pro Boromejské prsteny.[1]	22
3.8	Pravostranný trojlístkový uzel.	23
3.9	Seifertova plocha pro pravostranný trojlístkový uzel.[6]	23
3.10	Zdeformovaný diagram trojlístkového uzlu (a) a kružnice α_1 a α_2 (b). [7, s. 86]	23
3.11	Průsečíky kružnic na Seifertové ploše. [7, s. 86]	24
3.12	Diagramy uzlu z definice Alexandrova-Conwayova polynomu.[2, s. 165]	25
3.13	Triviální spojení třech uzlů.	26
3.14	Skein relace pro diagram triviálního uzlu. [8, s. 48]	26
3.15	Skein diagram pro diagram trojlístkového uzlu. [8, s. 48]	27

3.16	Diagramy uzlu z definice Jonesova polynomu. [2, s. 165]	29
3.17	Skein diagram pro diagram trojlístkového uzlu. [7, s. 221]	30
3.18	Uzly K_1 a K_2 , které mají stejné Jonesovy, ale odlišné Alexandrovy polynomy. [7, s. 227]	31
3.19	Uzly K_1 a K_2 , které mají stejné jak Alexandrovy, tak Jonesovy polynomy. [7, s. 228]	32
4.1	Struktura molekuly DNA.	33
4.2	Supercoiling molekuly DNA.	34
4.3	Princip fungování topoizomerázy druhého typu. [5]	35
4.4	Příklad izomerů, které nejsou topologickými stereoizomery. [2, s. 196]	35
4.5	Tvorba spojení molekul. [2, s. 198]	36
4.6	Jeden z postupů na tvoření netriviálního spojení uzlů. [2, s. 199]	36
4.7	Syntéza trojlístkového uzlu. [2, s. 199]	37
4.8	Möbiův žebřík.	37
4.9	Möbiovy žebříky a vzniklé uzly. [2, s. 200]	38
4.10	Zhengova zauzlená molekula. [2, s. 200]	38
4.11	D- a L-Limonen.	39
4.12	Trojlistkový uzel a jeho zrcadlový obraz.	40
4.13	Molekula trojvrstvého naftalenofanu. [8, s. 80]	41
4.14	Möbiův žebřík v molekule TLN. [8, s. 81]	41
4.15	Vrcholový model.	42
4.16	Yang-Baxterova rovnice pomocí diagramu. [7, s. 250]	42
4.17	Unitární podmínka pomocí diagramu. [7, s. 252]	43