

第二十二屆旺宏科學獎

成果報告書

參賽編號：SA22-513

姓名：郭育熏

作品名稱：繩結能量與機率探究

參賽類別：物理科

關鍵字：繩結、繩結能量、打結機率

摘要

扭結理論將各繩結利用複雜程度進行分類，本研究使用自製的旋轉箱進行多次實驗後，找出各種繩結出現的機率。除了機率之外，我們也嘗試將形成各種繩結的最小能量進行量化，其中包含彎曲能量 E_{bend} 及交錯能量 E_{twist} ，再計算出能量後，我們發現隨著圈數增加，打結機率與平均複雜程度會有趨於定值的形式，並藉此推導出理論機率 $P(E_{\#})$ 呈現波茲曼分布的形式。接著配合實驗數據，整理出與理論機率 $P(E_{\#})$ 誤差最小者，由此可得知 ε_t 為 $0.89 J$ ，並藉由最小平方方法驗證確實圈數增加，整體趨勢會趨於穩定。最後，配合實驗數據及估算，我們可知函數 T 與繩結能量的期望值有非常大的關係，但仍需經由後續實驗加以驗證。

壹、前言

一、研究動機

在日常生活中時常會遇到繩子打結的情形，像是放在口袋中的耳機線，抑或是收在袋子裡面的音源線等等。而從日常經驗中可發現，走路的时间越久，繩子越容易打結，反之則不然，因此我們想探討，是否隨著時間增加，打結機率會持續上升或是趨於一定值。而在閱讀相關資料並進行實驗後，我們發現，所有繩結皆可歸類幾種固定的形式，也讓我們好奇這些形式中各個種類的出現機率為多少以及是否擁有量化各個繩結能量的方式，因而產生此研究。

二、研究目的





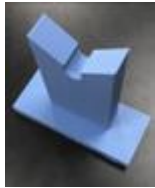



- (一)對同一長度的繩子之打結情形分布進行分析
- (二)不同旋轉圈數對打結的影響
- (三)找出各種繩結的能量以及探討能量對繩結機率分布的關係

三、文獻回顧

繩結在日常生活中被人們廣泛的運用，大至固定船隻，小至藝術表現，都可以見到繩結的蹤影。而隨著對繩結的研究更加透徹，人們已漸漸發現許多繩結的特點，根據扭結理論 (knot theory)，我們可以瞭解到，若將一條繩子的兩端捏起形成一個封閉的環，將不再改變其繩結種類，並可藉由這個方式，分辨每個繩結的繩結種類，而本實驗便是在此理論的基礎上所進行。而扭結理論也不僅使用在分辨繩結種類，在生物 (The Application of Knot Theory to

Models in Biology and Physics [1]) 及化學領域 (Knot theory in modern chemistry [2]) 也有所使用。而在眾多扭結理論的文章中，我們注意到了 Bounds for the minimum step number of knots in the simple cubic lattice [3] 這篇文章，它以格子點的角度簡化現實狀況並探討了各個繩結種類產生所需的「最小步數」，而我們開始考慮，所謂「最小步數」在現實層面上並無直觀的實際意義，因此我們想尋找同樣具有量化能力，並且擁有實際意義的方式來表示各個繩結，而本實驗便是在此思維下展開對同樣的狀況進行數百次後，找出繩結分布情形並進行分析。在實驗方法上，我們主要參考的論文為 Spontaneous knotting of an agitated string [4]，同樣以透明壓克力箱以及旋轉的方式來模擬繩子在經過一定時間擾動後的結果，並藉由改變旋轉箱圈數找出能量與機率函數中的各項數值。

貳、研究設備與器材

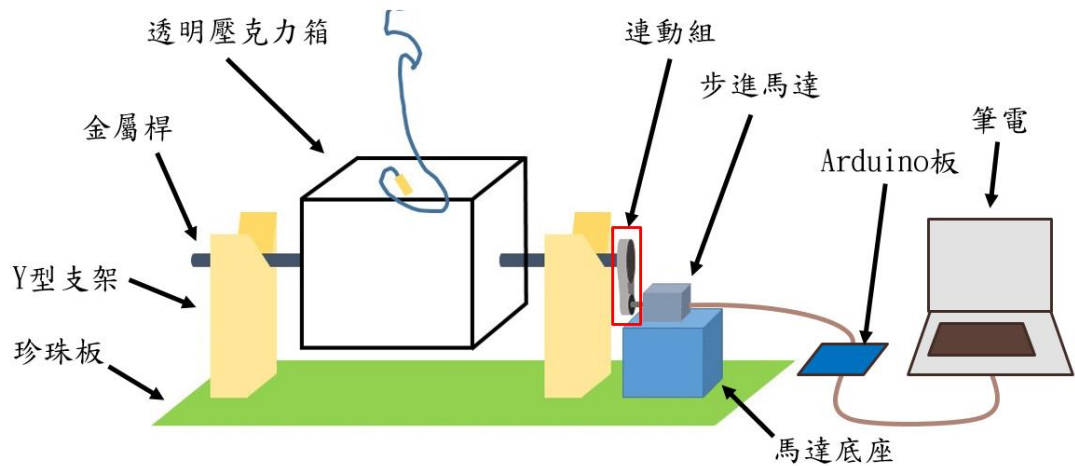
42 步進馬達 	連動組 	透明壓克力箱 	絕緣膠帶 	金屬桿 
馬達底座 	V 型金屬桿支架 	中國繩 	Arduino Uno 	步進馬達驅動版 
電池 	珍珠板 			

表一、實驗器材圖

參、研究過程與方法

一、實驗裝置

(一)實驗裝置圖

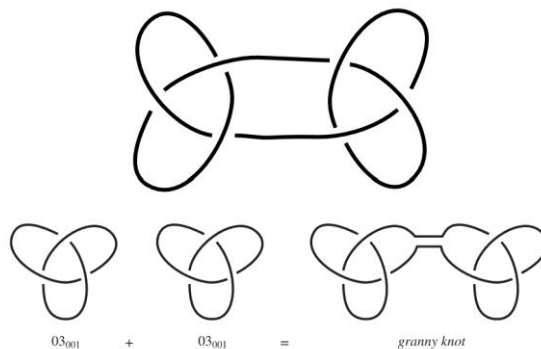


圖一、裝置示意圖

二、名詞解釋與研究方法

(一)繩結定義與分類

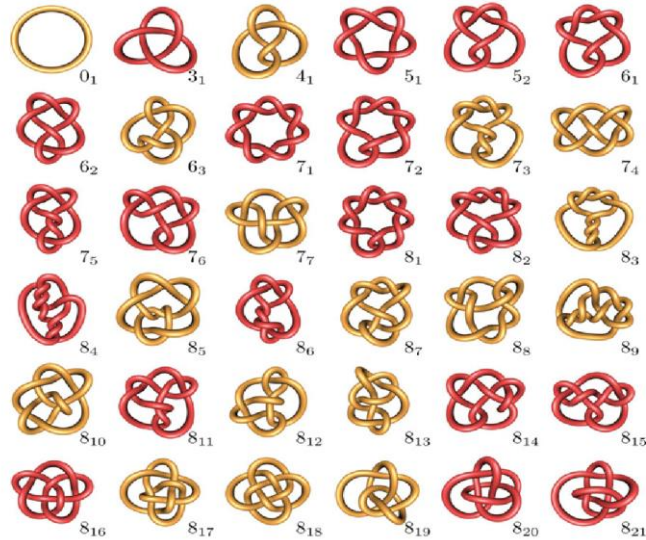
扭結理論是在研究繩結、鏈環、辮子等的理論。繩結在扭結理論中被定義為立體空間中的一條封閉曲線，線上不同的交錯組合會形成不同的繩結。其中，有些繩結可以被分解成數種不同的繩結，稱作合成結，如圖二中的結可分解為兩個 3_1 (記為 $3_1\#3_1$)。而那些無法被分解的結則稱為素扭結，圖三則列出了不同的素扭結種類；最後也有什麼結都沒打的，我們稱為平凡結。另外在這次的報告，我們也會著重討論在素扭結上。



圖二、合成結範例圖。取自 Wolfram Mathworld

(二)繩結種類及複雜程度

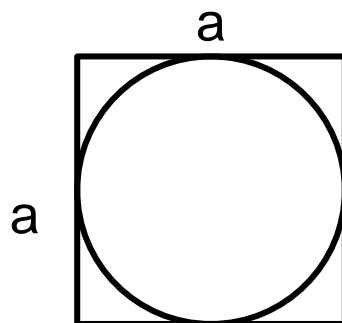
在 KnotInfo: Table of Knot Invariants 中 [7]，已經將單一條繩子所能打出的繩結種類以最簡型態進行列舉，並將其以「交錯點個數」進行排序，其下標則代表此種類繩結的編號，並無任何其他含意。在之後的報告中，我們將以複雜程度，或 C ，代替此名詞。



圖三、素扭結列表圖。取自 Semantic Scholar

在每一次旋轉箱實驗結束後，我們都會將旋轉箱內繩子的兩頭先捏在一起，再向上將繩子提出，以確保不影響繩結的種類與形狀，這樣才可以讓生活中的繩結轉換成扭結理論的形式，利於討論。之後，我們會透過圖三分辨其屬於哪一種類的繩結並記錄。若提出的繩結被分辨為 3_1 結，則記 $3(1)$ 至電腦中；若其複雜程度大於或等於 9，因數量太稀少且難以分辨則不找出其種類，記為 9。在後續實驗討論中，我們觀察繩結的分布情形，發現在 $C=7$ 以後的繩結出現機率較小，故稱 $C \geq 7$ 的結為複雜結，而 $C \leq 6$ 的結我們稱為簡單結。

(三)模型架構與繩結能量



圖四、箱底與鬆弛繩子示意圖

在實驗過程中，旋轉箱停下時繩子會平躺於旋轉箱的底面，而我們在量化繩結時，則以它的最小能量來代表，以下為能量的計算方式：

$$E_{\#} = E_{bend} + E_{twist}$$



圖五、左圖為繩子彎曲示意圖，右圖為交錯示意圖

代表繩結種類， E_{bend} 為繩結彎曲能量，我們參考 Crumpling wires in two dimensions [5] 對於彎曲能量的描述並加以改編，其算式可以寫成如下表示法

$$E_{bend} = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{k_b}{2 \cdot \frac{L}{N}} \cdot \theta_i^2$$

k_b 為彎曲剛度，其又可表達為 $k_b = YI$ ，其中 Y 為楊氏模數， I 為截面二次軸矩， N 為它將繩子切成的份數。而若我們考慮 $N \rightarrow \infty$ ，即

$$E_{bend} = \int \frac{k_b}{2 \cdot dl} d\theta^2 = \int \frac{k_b}{2 \cdot dl} \cdot \frac{1}{R^2} (dl)^2 = \int \frac{k_b}{2} \left(\frac{1}{R}\right)^2 dl$$

R 為曲率半徑， l 為繩長。另外本實驗所使用的中國繩，材質為尼龍製，其楊氏模數 Y 為 3 GPa 。計算截面二次軸矩的方式如下，需考慮其貼齊繩子表面的無限小塊的面積及其與繩子延伸方向的軸的距離

$$I = \int r^2 dA = \frac{\pi d^4}{64} \approx 7.366 \times 10^{-12} \text{ (m}^4\text{)}$$

其中 dA 為繩子截面上無限小塊的面積， r 為 dA 至軸上該軸的距離， d 為繩子截面的直徑為 0.0035 (m) ，由此可知

$$k_b \approx 0.0221 \text{ (J} \cdot \text{m)}$$

E_{twist} 代表其繩結中，繩子交錯所帶來的能量，表示法為 $E_{twist} = C\varepsilon_{\#}$ ，其中， C 為交錯個數， $\varepsilon_{\#}$ 為在繩結種類#的繩結中每個交錯所需的能量，在此稱為單位交錯能量。又每個交錯點間的繩長越長，其單位長度上所需產生的旋轉角度越小，進而

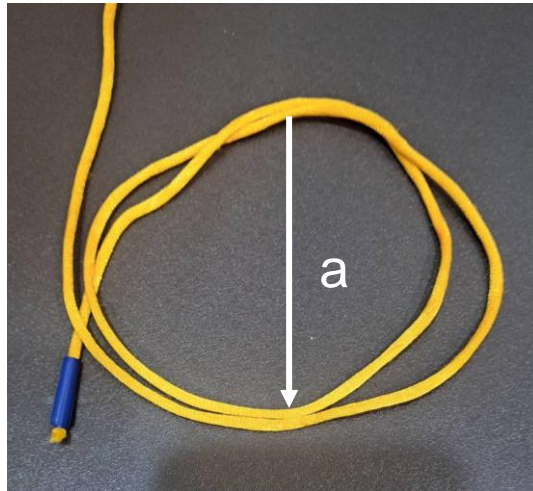
使單位交錯能量越小，因此我們假設單位交錯能量 $\varepsilon_{\#}$ 與兩兩交錯位置的距離成反比，由此單位交錯能量可以寫作

$$\varepsilon_{\#} = \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}} = C \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$$

其中 ε_t 為表達各個 $\varepsilon_{\#}$ 所用到的固定參數，我們最終可將算式整理成

$$E_{\#} = E_{bend} + E_{twist} = \int \frac{k_b}{2} \left(\frac{1}{R}\right)^2 dl + \frac{C^2}{l_{\#}} \varepsilon_t$$

為了找出繩結所需的最小能量 ($E_{\#}$)，便需考慮繩結在最鬆弛且不超過旋轉箱底面大小下的形狀，並找出該情況下所需之繩長 ($l_{\#}$)，以下舉 3_1 為例：



圖六、鬆弛狀態的 3_1 結

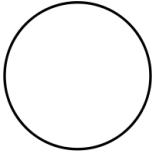









此圖為 3_1 結最鬆弛，亦即能量最低的形式，繩子所需的長度為 $l_{\#} = 2\pi a$ ，考量其 E_{bend} 則有：


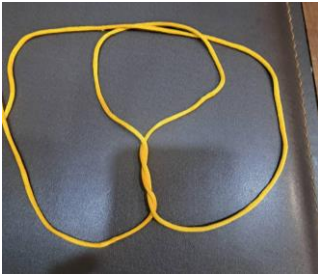


$$E_{bend} = \frac{k_b}{2} \cdot \left(\frac{1}{\frac{1}{2}a}\right)^2 \cdot \pi a \cdot 2 = \frac{4\pi k_b}{a}$$

而因為 3_1 結有 3 個交錯，因此有 $E_{twist} = 9 \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$ ，則 3_1 結總能量可寫為：

$$E_{\#} = \frac{4\pi k_b}{a} + 9 \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$$

以下列表為常見繩結之能量與所需繩長

繩結種類	考慮形狀	$E_{\#}$	$l_{\#}$
 Unknot		$\frac{2\pi k_b}{a}$ $\approx \frac{2\pi \cdot 0.0221}{0.15}$ ≈ 0.9257	πa
 3_1		$\frac{4\pi k_b}{a} + 9 \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$	$2\pi a$
 4_1		$\frac{6\pi k_b}{a} + 16 \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$	$\frac{3}{2}\pi a$
 5_1		$\frac{4\pi k_b}{a} + 25 \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$	$2\pi a$
 5_2		$\frac{6\pi k_b}{a} + 25 \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$	$\frac{3}{2}\pi a$

 <p>6₁</p>		$\frac{6\pi k_b}{a} + 36 \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$	$\frac{3}{2}\pi a$
 <p>6₂</p>		$\frac{10\pi k_b}{a} + 36 \cdot \frac{\varepsilon_t}{l_{\#}}$	$2\pi a$

表二、繩結能量與 $l_{\#}$ 表示式

後續的繩結並無討論，因為其出現的機率較小，並且缺乏對稱性，不易進行最小能量的估算

三、研究步驟

(一)實驗一：對同一長度的繩子之打結情形分布進行分析

1. 取用 160 公分長的中國繩一條
2. 將繩子以隨意放入的方式放入旋轉箱中旋轉七圈
3. 旋轉箱停止後，將繩子的繩頭兩端向上拉起並相連
4. 藉由查表找出其繩結種類並記錄
5. 重複步驟 2~4 五百次

(二)實驗二：不同旋轉圈數對打結的影響

1. 分別以旋轉圈數一圈、三圈、五圈、七圈、九圈、十一圈並重複研究步驟(一)
2. 比較並分析不同旋轉圈數的分布情形

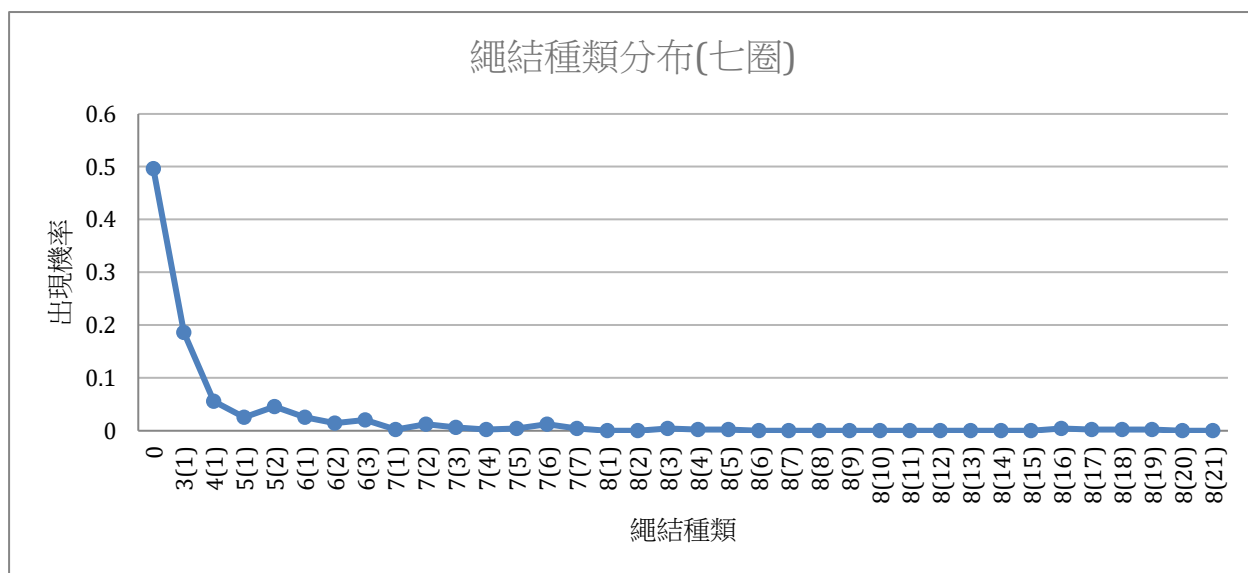
肆、研究結果

一、實驗一：對同一長度的繩子之打結情形分布進行分析

繩結種類	個數	繩結種類	個數	繩結種類	個數
0(1)	248	7(5)	2	8(10)	0
3(1)	93	7(6)	6	8(11)	0
4(1)	28	7(7)	2	8(12)	0
5(1)	13	8(1)	0	8(13)	0
5(2)	23	8(2)	0	8(14)	0
6(1)	13	8(3)	2	8(15)	0
6(2)	7	8(4)	1	8(16)	2
6(3)	10	8(5)	1	8(17)	1
7(1)	1	8(6)	0	8(18)	1
7(2)	6	8(7)	0	8(19)	1
7(3)	3	8(8)	0	8(20)	0
7(4)	1	8(9)	0	8(21)	0

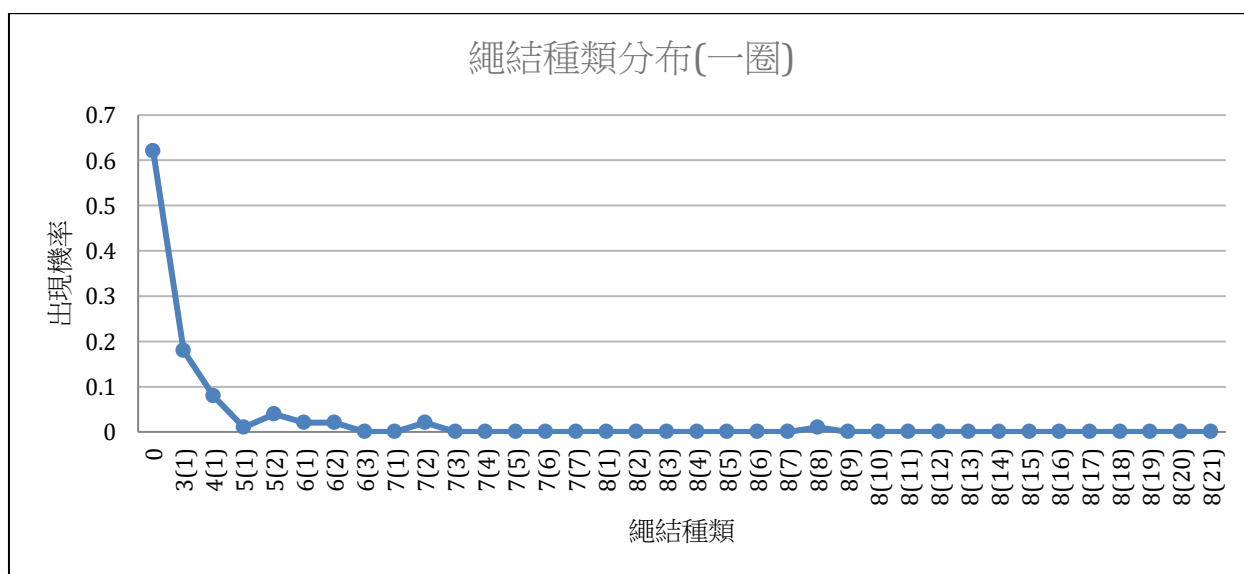
表三、500 次實驗下繩結種類與對應個數表 (七圈)

在將實驗重複進行五百次後，並將各個複雜程度的繩結種類出現的個數除以實驗進行的總次數以得到各個繩結出現的機率，並由複雜程度小到大的方式排列便可得知以下結果。



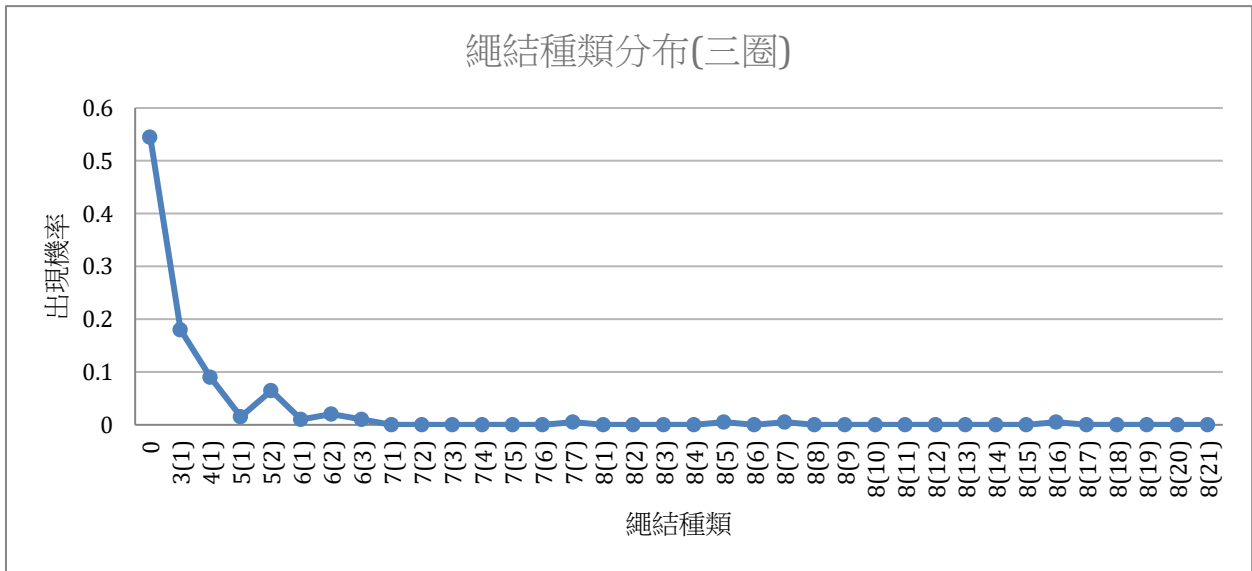
圖七、旋轉七圈後的繩結種類分布

二、實驗二：不同旋轉圈數對打結的影響



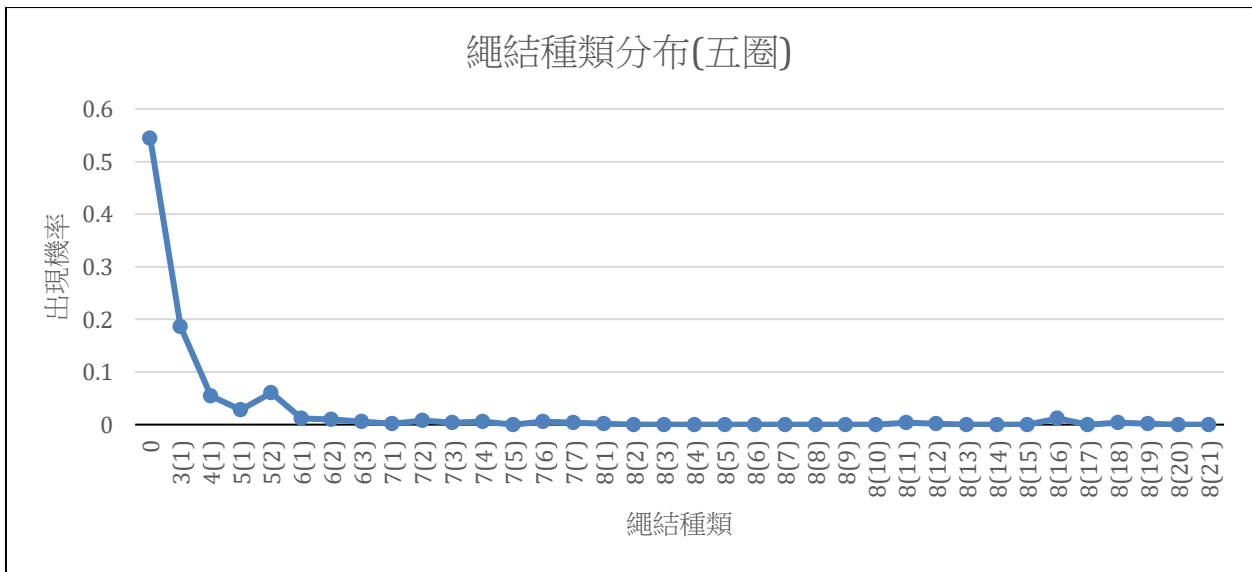
圖八、旋轉一圈後的繩結種類分布

打結機率為 38.0%，複雜程度平均值為 1.570



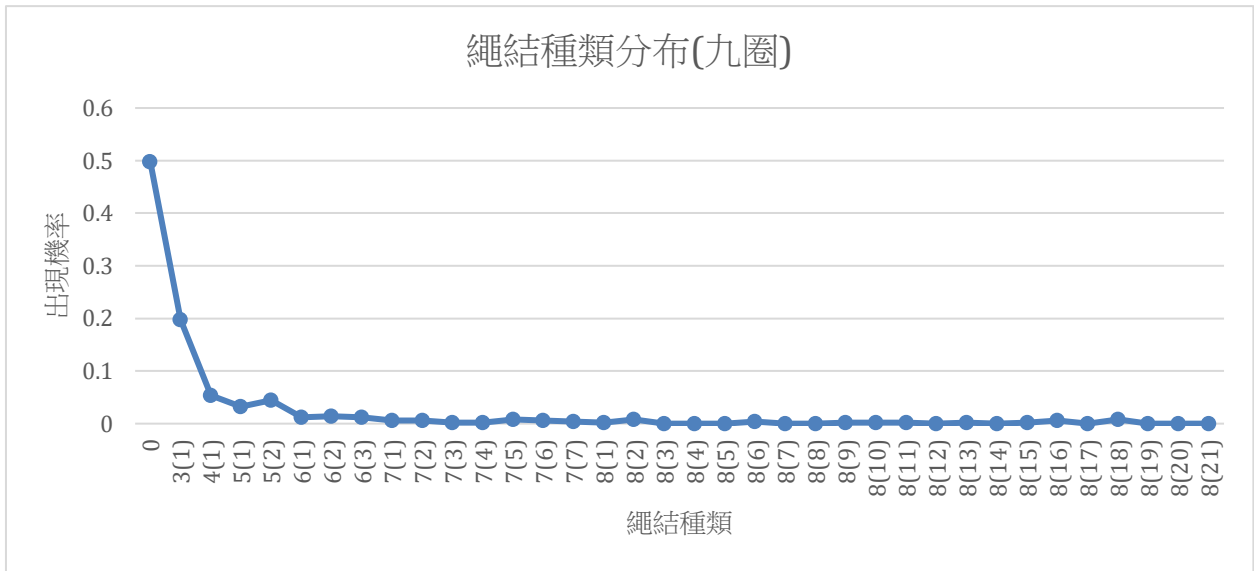
圖九、旋轉三圈後的繩結種類分布

打結機率为 45.6%，複雜程度平均值為 2.09



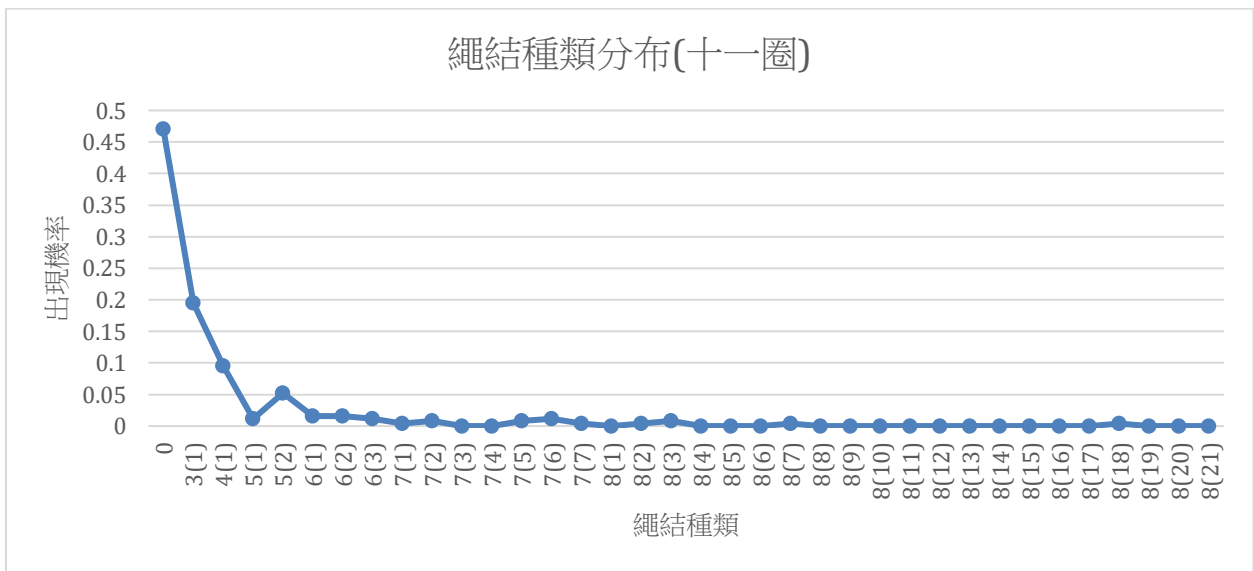
圖十、旋轉五圈後的繩結種類分布

打結機率为 45.6%，複雜程度平均值為 2.242



圖十一、旋轉九圈後的繩結種類分布

打結機率为 50.7%，複雜程度平均值為 2.540



圖十二、旋轉十一圈後的繩結種類分布

打結機率为 53.0%，複雜程度平均值為 2.645

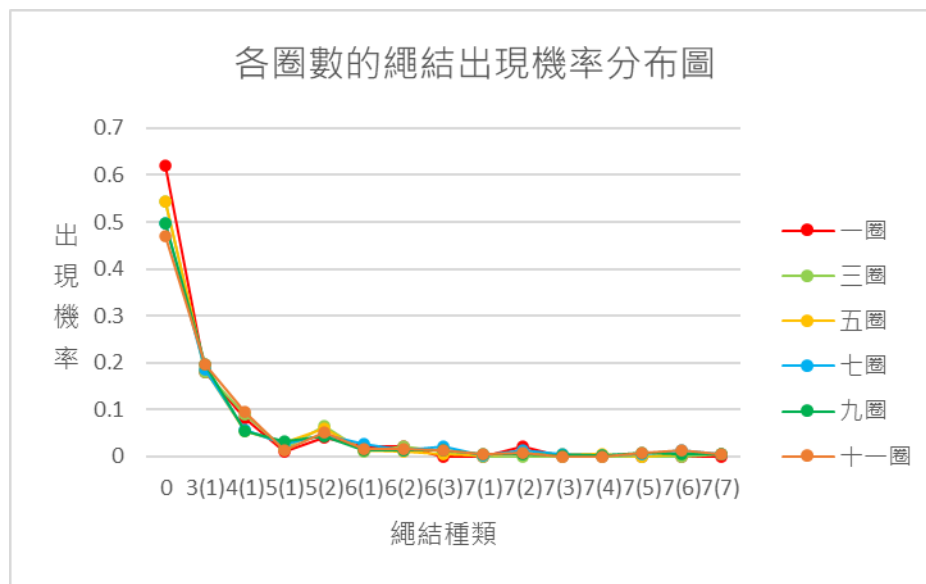
	旋轉 1 圈	旋轉 3 圈	旋轉 5 圈	旋轉 7 圈	旋轉 9 圈	旋轉 11 圈
打結機率 (%)	38	45.6	45.6	50.4	50.2	53.0
複雜程度平均值	1.570	2.09	2.242	2.462	2.570	2.645

表四、不同旋轉圈數之間的數據比較

伍、討論

一、不同圈數的比較

(一) 繩結種類分布

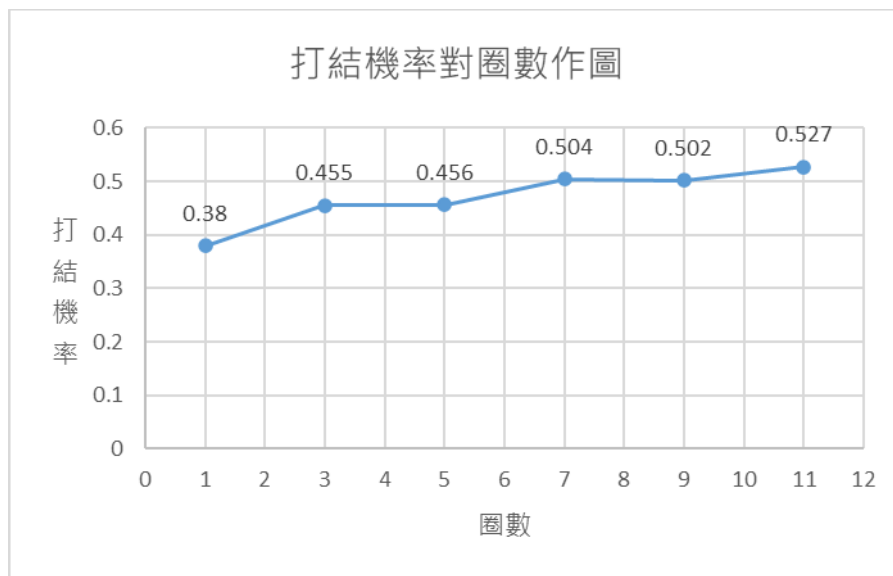


圖十三、旋轉五種圈數後的繩結種類分布

為了能更清楚地了解各圈數的繩結種類分布，我們將 $C \geq 8$ 的部分排除，因為其分布較少。在將六種旋轉圈數進行疊圖比較後我們可以發現，其分布都呈類似的趨勢(從 3_1 開始大幅下降， 5_2 微微回升)。

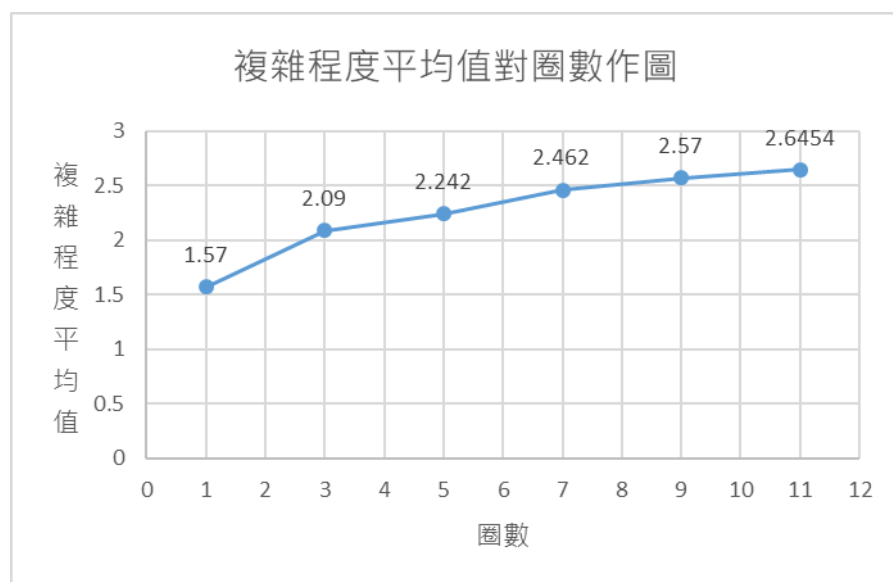
(二) 打結機率、平均複雜程度

觀察表四中的數據，隨著圈數的增加，各項數據的趨勢也十分明顯。首先，就打結機率來看，打結機率的百分比會隨著旋轉圈數增加而上升，而若我們進一步將各個點繪製成圖表：



圖十四、打結機率對圈數作圖

可看出打結機率除了會隨著旋轉圈數增加而上升還有趨緩的趨勢。另外，對於平均複雜程度提升也是可預期的。畢竟在旋轉的過程中，系統本就會朝著更複雜的形勢前進。同樣將旋轉圈數分別對平均複雜程度作圖。

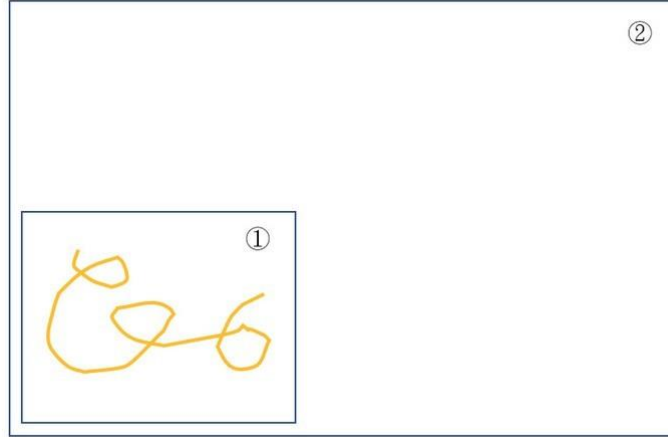


圖十五、複雜程度平均值對圈數作圖

可發現其趨勢呈現趨於定值的樣貌。又由於複雜程度的趨於定值意味著繩結種類分布趨於固定，因此在之後的實驗中，我們會將十一圈當作理論分析對象。

二、繩結機率分布

考慮各繩結的出現機率趨於穩定，我們可以給出以下模型



圖十六、繩子與外界示意圖

其中①代表繩子，②代表外界環境，兩者形成孤立系統，意即繩子僅與外界環境有交互作用。對於①中的特定能量 $E_{\#}$ ，其出現機率 $P(E_{\#})$ 會正比於在此狀況下，兩者所有的簡併態相乘，因此可以列出以下式子

$$P(E_{\#}) \propto N_1(E_{\#}) \cdot N_2(\zeta)$$

其中 ζ 為外界環境的能量。而 N_1 、 N_2 代表在對應能量下，①和②的簡併態數量。考慮二者形成孤立系統，我們有等式

$$E_{\#} + \zeta = K \leftarrow Constant$$

其中 K 為兩系統的總能量，並且為一常數。

為了找出 $P(E_{\#})$ 的確切方程式，我們先考慮 $P(E_{\#})$ 極值時

$$\frac{dN_1(E_{\#})N_2(\zeta)}{dE_{\#}} = 0$$

將其展開後得

$$N_1(E_{\#}) \frac{dN_2(\zeta)}{d\zeta} \cdot \frac{d\zeta}{dE_{\#}} + N_2(\zeta) \frac{dN_1(E_{\#})}{dE_{\#}} = 0 \text{ (式一)}$$

又由於 $E_{\#} + \zeta = K$ ，因此

$$\frac{d\zeta}{dE_{\#}} = -1$$

代入上式並將式一同除 $N_1(E_{\#})N_2(\zeta)$ 可得

$$\frac{1}{N_1(E_{\#})} \frac{dN_1(E_{\#})}{dE_{\#}} - \frac{1}{N_2(\zeta)} \frac{dN_2(\zeta)}{d\zeta} = 0$$

可將算式改寫成

$$\frac{d \ln N_1(E_{\#})}{dE_{\#}} - \frac{d \ln N_2(\zeta)}{d\zeta} = 0$$

而在熱力學的探討中，通常會將溫度的定義寫成以下型式 [6]

$$\frac{1}{k_B T} \equiv \frac{d \ln \Omega}{dE}$$

Ω 代表系統的簡併態個數。由於我們考慮的方向與此類似，因此我們定義函數

$$\frac{1}{T} \equiv \frac{d \ln N(E)}{dE}$$

T 在此定義下，便代表著繩結能量的期望值，此點會在之後配合實驗數據進行討論。

接著，我們考慮的系統為繩子與外界環境，因為外界的空間大小比繩子大上許多，因此可知 $E_{\#} \ll K$ ，利用泰勒級數，我們可有以下近似

$$\ln N_2(\zeta) = \ln N_2(K - E_{\#}) \approx \ln N_2(K) - E_{\#} \cdot \frac{d \ln N_2(K)}{dE}$$

將 $\frac{1}{T} = \frac{d \ln N(E)}{dE}$ 代入上式，則有

$$\begin{aligned} \ln N_2(\zeta) &= \ln N_2(K - E_{\#}) \approx \ln N_2(K) - \frac{E_{\#}}{T} \\ \Rightarrow N_2(\zeta) &= N_2(K - E_{\#}) \approx N_2(K) e^{-\frac{E_{\#}}{T}} \end{aligned}$$

故得

$$P(E_{\#}) \propto N_1(E_{\#}) \cdot N_2(K) \cdot e^{-\frac{E_{\#}}{T}}$$

又在本實驗中，我們考慮的是各繩結的最小能量，僅會有一種簡併態，因此

$N_1(E_{\#})$ 為 1，最後我們得出

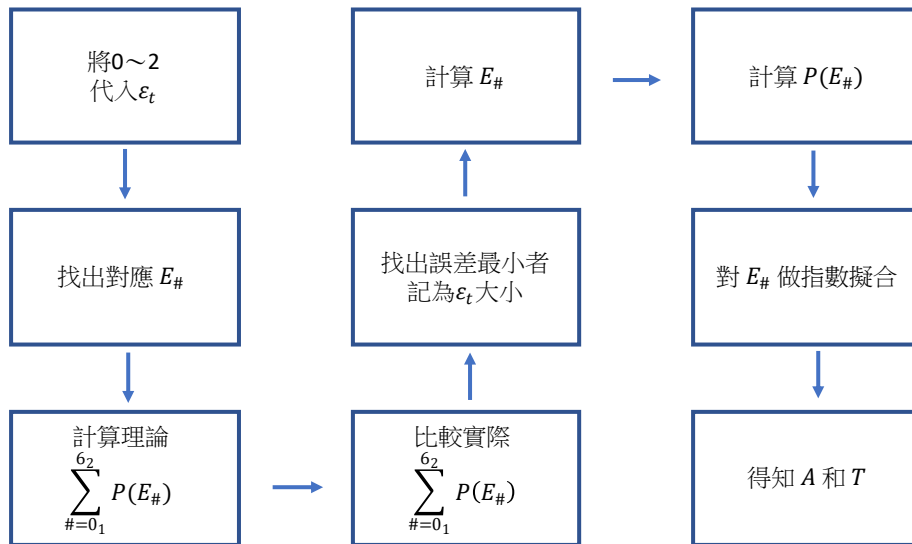
$$P(E_{\#}) \propto N_2(\zeta) \propto N_2(K) \cdot e^{-\frac{E_{\#}}{T}}$$

$N_2(K)$ 為定值，因此

$$P(E_{\#}) = A \cdot e^{-\frac{E_{\#}}{T}} \text{ (式二)}$$

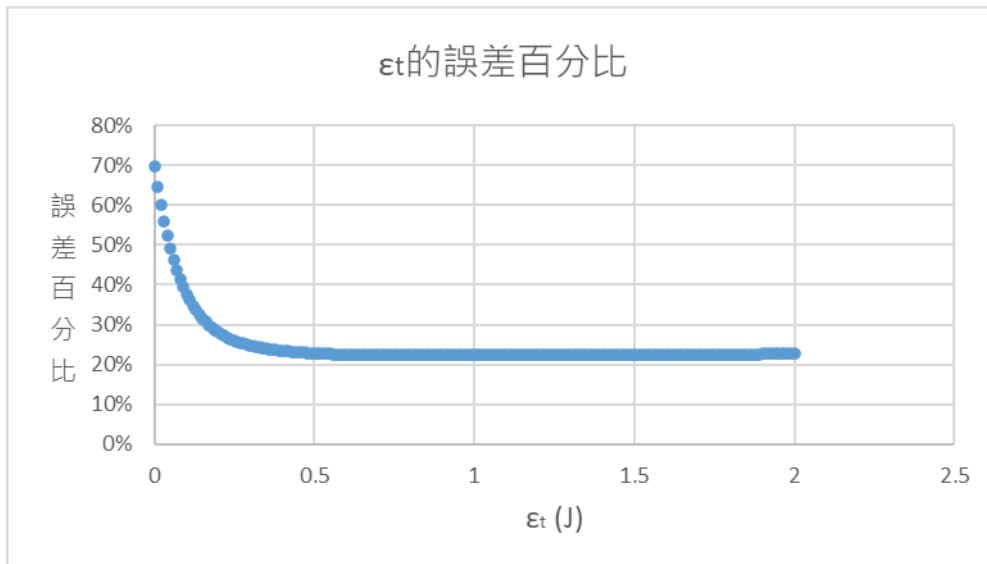
其中 A 為常數。

三、 ϵ_t 擬和



圖十七、擬合流程圖

在有了機率對能量的方程式之後，接著便需要思考如何對式二中的 A 和 T 進行擬合。因為本實驗主要探討的對象為繩結的出現機率與能量之間的關係，然而各繩結的最小能量表示法僅有以 E_{bend} 大小及已知倍數的 ϵ_t 來表示，並無一個實際大小，進而造成擬合上的困難，又由於我們認為 ϵ_t 不大，因此將 ϵ_t 以 0~2，間隔 0.01 代入各繩結能量，與實際機率作圖得到 A 及 T ，再將所得 A 及 T 代入機率方程式得各繩結出現機率，並將理論中 0_1 、 3_1 、 4_1 、 5_1 、 5_2 、 6_1 、 6_2 的出現機率總和與實際出現機率總和進行比較，以誤差值 = $\frac{|\text{理論值}-\text{實際值}|}{\text{理論值}}$ 來計算，挑選出誤差值最小者。



圖十八、 ϵ_t 從0~2 (J)的誤差百分比作圖

最終可得誤差最小的 $\epsilon_t = 0.89 J$ ，誤差大小為 22.31%

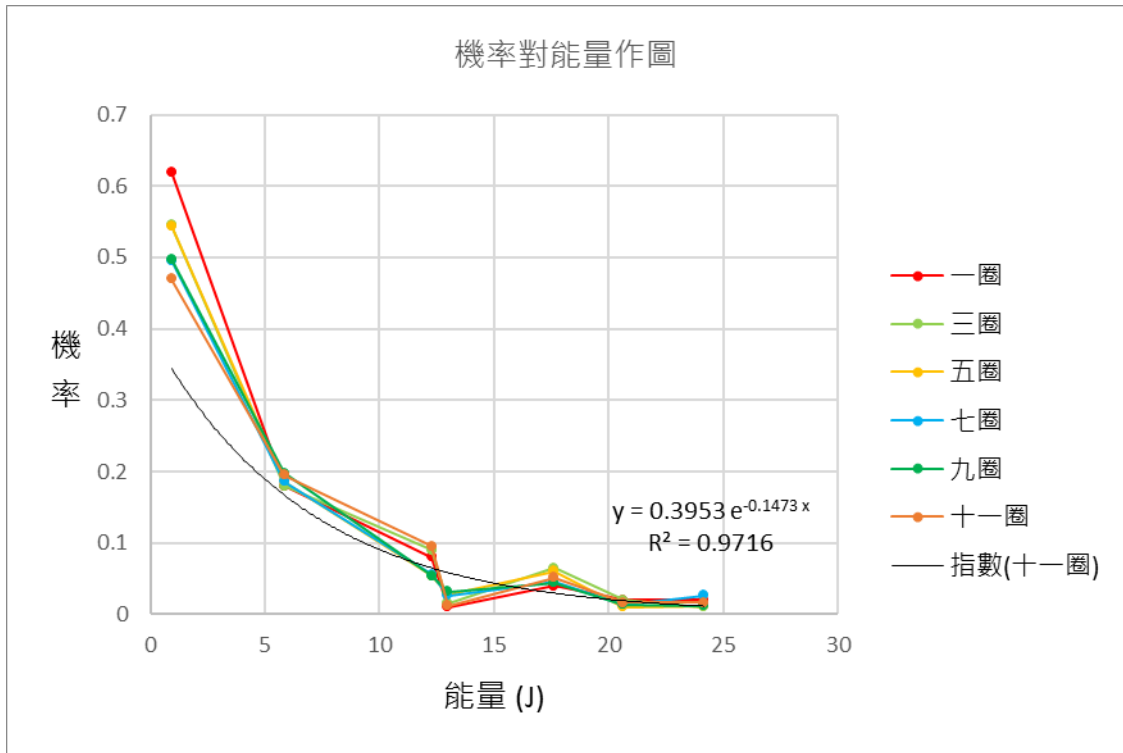
將所得之 ϵ_t 代入表三裡的算式可得每個繩結的實際能量，如下表

繩結種類	$E_{\#}$ (J)	$l_{\#}(m)$
0_1	0.9257	0.4712
3_1	5.8564	0.9425
4_1	12.2704	0.7069
5_1	12.9764	0.9425
5_2	17.6104	0.7069
6_1	24.1371	0.7069
6_2	20.6485	0.9425

表五、繩結能量與 $l_{\#}$ 表示式

四、繩結機率對能量作圖

在得知了各個繩結的能量之後，我們可將各圈數的出現機率對能量作圖

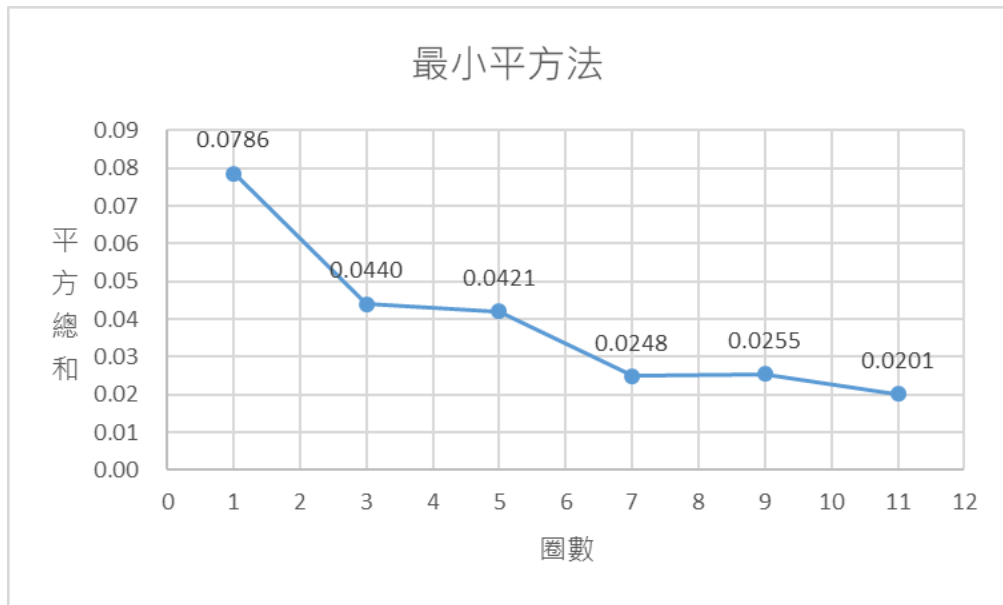


圖十九、機率對能量作圖

我們對於十一圈的數據結果進行指數擬合產生趨勢線，作為我們的理論線，其中A為0.3953，T為 $\frac{1}{0.1473} = 6.7889 J$ 。所以我們對於十一圈的情況，可以寫出以下機率方程式

$$P(E_{\#}) = 0.3953 \cdot e^{-\frac{E_{\#}}{6.7889}}$$

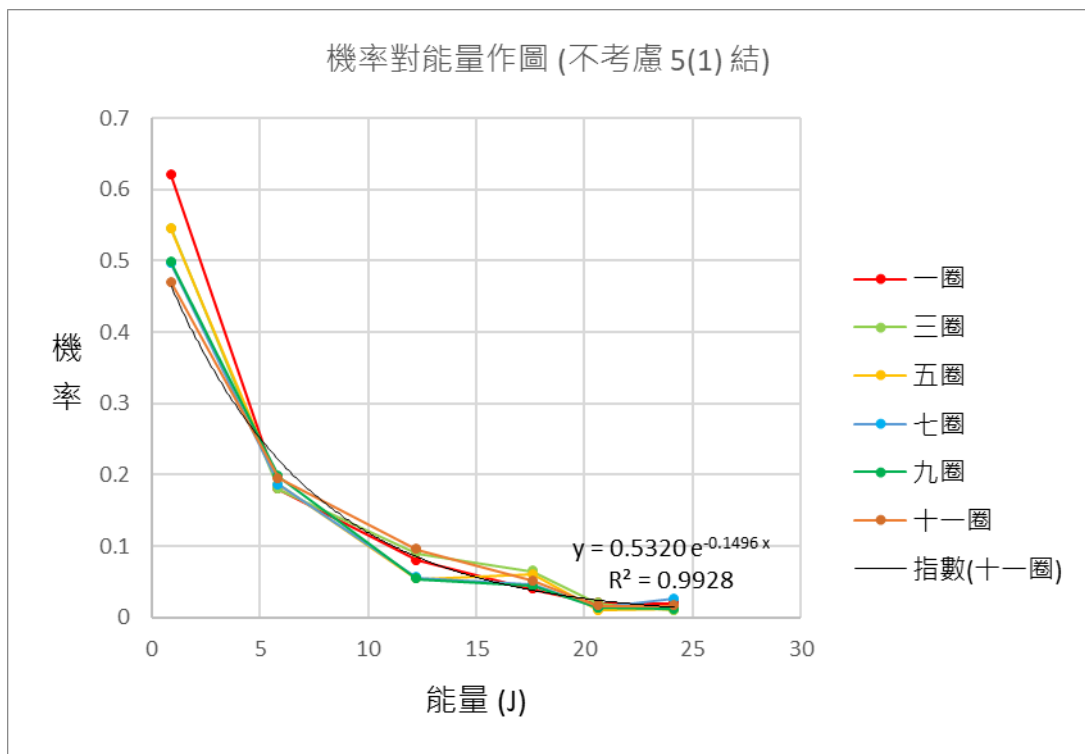
接著比較各圈數對於十一圈數據所產生的理論線進行誤差比較，以驗證旋轉箱在旋轉圈數增加時會愈趨於理論線。我們採取的方法為最小平方法，具體計算方式為，計算各圈數中每個繩結的出現機率與理論出現機率的差值平方，最後進行加總，由此我們便可得出以下圖表



圖二十、最小平方方法

由誤差隨著圈數下降可見，隨著圈數的增加，繩結的分布會越趨近於趨勢線，這項結果也符合前面的假設，隨著圈數的增加，趨勢會趨於穩定。

然而在圖表中，我們可發現，整體趨勢最不符合的繩結為 5_1 ，因此我們將先不考慮 5_1 結進行擬合，繪出如下圖表。

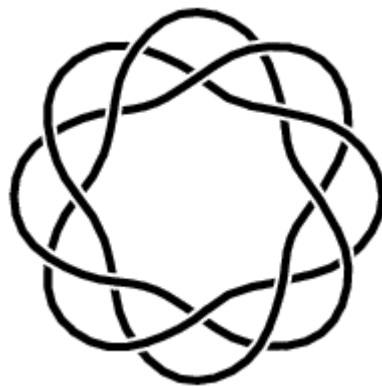


圖二十一、機率對能量作圖(不考慮 5_1 結)

其中 A 為 0.5320 ， T 為 $\frac{1}{0.1496} = 6.6845 J$ 。因此我們對於不考慮 5_1 結的機率方程式為

$$P(E_{\#}) = 0.5320 \cdot e^{-\frac{E_{\#}}{6.6845}}$$

不難發現，實際出現機率與理論線較圖十九貼合，也代表著 5_1 結的數據本身存在著一些誤差或偏差。我們推測，主因為 5_1 的形狀是屬於環面對稱的，在形成後，其繩與繩之間的接觸較少，兩兩之間的摩擦作用過小，因此結構不穩定。而 7_1 、 8_{19} 在結構上也有類似的性質，但因為複雜程度太高，或許相對來說並不會那麼明顯。這樣的繩結稱為環面扭結，其形狀也主要會是如下圖，在旋轉的過程中也很容易就會被解開。



圖二十二、環面扭結

五、 T 與繩結能量的關係

以下為十一圈 0_1 、 3_1 、 4_1 、 5_1 、 5_2 、 6_1 、 6_2 每個繩結與其對應出現機率

繩結種類	出現機率
0_1	0.470
3_1	0.195
4_1	0.096
5_1	0.012
5_2	0.052
6_1	0.016
6_2	0.016

圖二十三、十一圈繩結種類對其出現機率

我們配合表五中每個繩結的能量以及上圖的出現機率，可計算出十一圈時，只考慮這七個繩結的情況下，繩結能量的期望值為

$$\sum_{\#=0_1}^{6_2} E_{\#} \cdot P(E_{\#}) = 4.5326 (J)$$

根據討論二中的推導過程，我們認為上式所得之數值應與 T 值相同。但從圖十九中，所得 T 值為6.7889，雖量級上相同，但數值仍有些許差距。因此我們的期望值計算需再考慮 6_2 以後的繩結。

我們知道其餘繩結所佔的出現機率為9.16%，我們猜測其餘繩結的能量會大於或等於 6_2 的能量。所以我們假設其餘繩結的能量與 6_1 的能量相同，皆為24.1371 (J)，並加入期望值的計算

$$\sum_{\#=0_1}^{6_2} E_{\#} \cdot P(E_{\#}) + 0.0916 \cdot 24.1371 = 6.7436 (J)$$

可得與 T 較為接近的數值，因此我們可以很大程度地認為 T 便是繩結能量的期望值。

不過，在找出 ε_t 和十一圈的趨勢線的過程中，只有考慮 $0_1 \sim 6_2$ 的繩結，並無考慮其餘繩結能量的確切大小，因此關於 T 以及繩結能量的期望值的關係並未確定，僅能以簡單估計的方式去猜測，也期望之後能再更完整的討論其餘繩結的能量形式。

六、繩結與熵

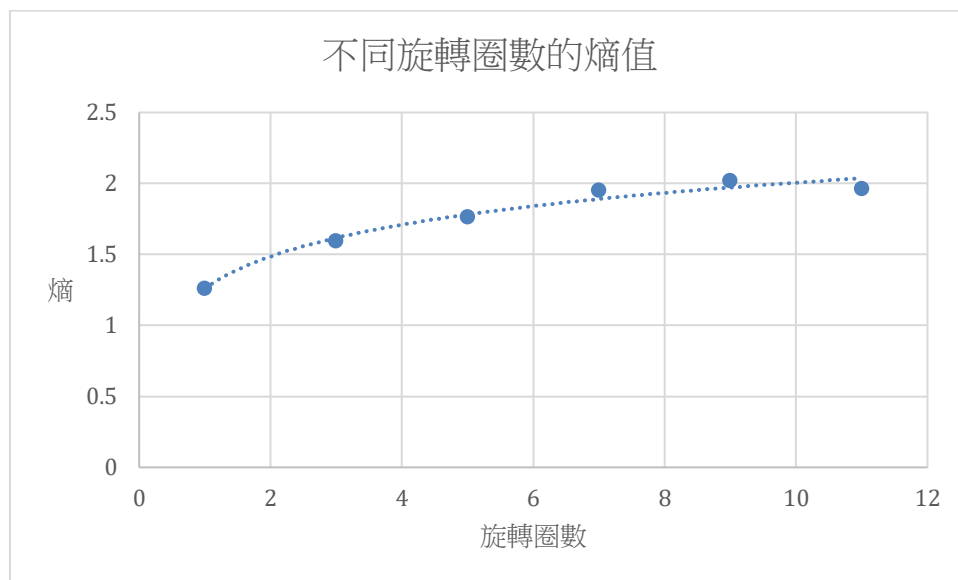
在前面我們嘗試將繩結機率分布以波茲曼分布的形式呈現，而在一般波茲曼分布中，最後的極值意味著系統的自由能降至最低，即 $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ 值為最低，此時熵亦會趨於一穩定的值。

為了驗證這樣的現象是否存在於我們的實驗中，我們使用了資訊熵的計算方式對我們每個圈數計算出當下的熵值：

$$S = \sum -P(\#) \cdot \ln P(\#)$$

而由於我們並未細分複雜程度為9以上的繩結，因此我們假定每個 $C \geq 9$ 的繩結皆為不同種類的繩結。這樣做是因為 $C = 9$ 的繩結共有49種，且 $C = 10$ 的繩結共有165種，複雜程度更大的繩結種類更有超過500種，所以如此假設每次出現的種類皆不一樣。

以下為各圈數的熵值圖表：



圖二十四、旋轉圈數及其資訊熵值

從中我們可以明顯發現隨著旋轉圈數的上升，意即繩子的擾動時長愈長，熵值會慢慢趨於一定值，符合前面的猜測。

七、繩結擾動的過程

經過前面的推論，我們得知繩結在特定圈數下的機率分布會呈現波茲曼分布，並且隨旋轉圈數上升，其熵值、打結機率、和複雜程度平均值皆會趨近於一個值，這樣的現象都代表著這個系統正自然地趨向於一個狀態。

我們認為，旋轉箱的旋轉是讓繩子與外界環境能量交換的作用機制，因此開始旋轉意味著繩結的能量開始有所增減，而旋轉的圈數則代表了作用的時長。對於繩子，它與箱體的碰撞、位能的改變都是一次次的能量交換，這樣的過程是隨機且不可預測的，就像水中的花粉微粒做布朗運動，每次的碰撞都會產生新的不規則軌跡。

然而在隨機過程下，繩結的分布還是會趨向自由能最低的狀態，因此特定時間點的繩結分布會接近於最終的波茲曼分布。作用時間愈久，分布圖愈趨近於波茲曼分布，且各項數值如熵值、打結機率、複雜程度平均值也自然會趨於該波茲曼分布時的數值。

陸、結論

一、藉由固定箱子大小(0.15 m)，並以各繩結最鬆弛狀態計算出最低能量，計算方式如下：

$$E_{\#} = E_{bend} + E_{twist} = \int \frac{k_b}{2} \left(\frac{1}{R}\right)^2 dl + \frac{C^2}{l_{\#}} \varepsilon_t$$

二、打結機率、平均複雜程度會隨著旋轉圈數增加而上升，並且皆會趨於定值

三、藉由擬合得出 ε_t 為 $0.89 J$ ，並計算出常見繩結的能量(表六)

四、藉由結論二可推知，整體的分布會隨著圈數增加趨於穩定，再配合理論推導後，可得到機率對繩結能量的方程式為

$$P(E_{\#}) = A \cdot e^{-\frac{E_{\#}}{T}}$$

其中 A 為常數，而 T 的定義式如下

$$\frac{1}{T} \equiv \frac{d \ln N(E)}{dE}$$

五、藉由十一圈的數據，我們可以得到對於邊長 $0.15 m$ 的旋轉箱及長度 $1.6 m$ 的中國繩而言，繩結出現機率對其能量的方程式為

$$P(E_{\#}) = 0.3953 \cdot e^{-\frac{E_{\#}}{6.7889}}$$

六、在十一圈時，考慮 0_1 、 3_1 、 4_1 、 5_1 、 5_2 、 6_1 、 6_2 的出現機率與能量，並假設其餘繩結的能量皆略等於 6_2 後，可估算出繩結能量的期望值為

$$\sum_{\# = 0_1}^{6_2} E_{\#} \cdot P(E_{\#}) + 0.0916 \cdot 24.1371 = 6.7436 (J)$$

其數值與趨勢線中計算出來的 T 有非常大程度的相似，因此我們可以很大程度地認為 T 是繩結能量的期望值。但由於目前考慮的繩結種類不夠完整，無法準確的說明是否兩者是等價關係，也期望後續的研究能夠將其完善。

七、我們以資訊熵和隨機過程的角度去探討這個現象，發現隨著圈數的增加，繩結種類的資訊熵也會跟著上升。而我們認為在擾動繩子的過程中，繩子會與外界隨機交換能量，並且會趨於自由能最低的狀態。

柒、參考文獻

1. The Application of Knot Theory to Models in Biology and Physics. (2019, April). MIT Mathematics.

Retrieved from

https://math.mit.edu/research/highschool/primes/circle/documents/2019/Lim_Martin_2019.pdf?fbclid=IwAR0hdACyYgtvz9lsPeHnmXnux0coXLldojl_ayBET5DYK6GYmew7olsSkIw

2. Horner, K.E., Miller, M.A., Steed, J.W., Sutcliffe, P.M. (2016). Knot theory in modern chemistry. *Chem. Soc. Rev.*, (). doi: 10.1039/C6CS00448B.
3. Scharein, R., Ishihara, K., Arsuaga, J., Diao, Y., Shimokawa, K., Vazquez, M. (2009). Bounds for the minimum step number of knots in the simple cubic lattice. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical.*, (). doi: 10.1088/1751-8113/42/47/475006.
4. Raymer, Dorian M., Smith, Douglas E. (2006). Spontaneous knotting of an agitated string. *PNAS*, 16432-16437. doi: 10.1073/pnas.0611320104.
5. Lin, Y.C., Lin Y.W., Hong, T.M. (2008). Crumpling wires in two dimensions. *Physical Review E* 78, 067101. doi: 10.1103/PhysRevE.78.067101.
6. 溫度與波茲曼分布。淡江大學物理系。取自
http://boson4.phys.tku.edu.tw/thermodynamics/Ch-04_Temperature_n_the_Boltzmann_factor.html
7. C. Livingston and A. H. Moore, KnotInfo: Table of Knot Invariants, Retrieved from
knotinfo.math.indiana.edu.