

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

Călugăreanu-White-Fullerjev teorem in topologija DNA

Seminar

Jure Aplinc, dipl. fiz. (UN)

MENTOR:
prof. dr. Rudolf Podgornik

26. september 2012

Povzetek

V tem seminarju se bomo ukvarjali z obliko molekule DNA, ki jo bomo na začetku matematično opisali. Struktura molekule DNA je dvojna vijačnica, kar pomeni, da jo lahko ukrivimo (kot vsako krivuljo) in tudi ovijemo okoli osi vijačnice. Povedali bomo kako lahko za zaprte krivulje izračunamo s tem povezane opazljivke in upeljali Gaußovo povezovalno število, in s tem tudi Călugăreanu-White-Fullerjev izrek. Na koncu bomo vse te opazljivke definirali tudi za odprto krivuljo.

Kazalo

1	Uvod	2
2	Matematični opis molekule DNA	2
2.1	Vijačnica	4
2.2	Dvojna vijačnica	4
3	Povezovalno število, ovijanje, ukrivljanje in Čalugăreanu-White-Fullerjev izrek	6
3.1	Število križanj	6
3.2	Povezovalno število	6
3.3	Ukrivljanje	7
3.4	Ovijanje	7
3.5	Čalugăreanu-White-Fullerjev izrek	8
4	Odprte krivulje	9
4.1	\mathcal{L}_k za odprte krivulje	9
4.2	\mathcal{T}_w za odprte krivulje	10
4.3	\mathcal{W}_r za odprte krivulje	11
5	Ukrivljanje in tangentna krivulja	11
5.1	Polarno ukrivljanje	12
5.2	Ekvivalentne zaprte krivulje	12
6	zaključek	13

1 Uvod

Eni sami krivulji (v matematičnem pomenu) lahko pripišemo le ukrivljanje¹ (writhe), če pa opisu dodamo še drugo krivuljo, skoraj vzporedno prvi lahko definiramo tudi kako močno se druga krivulja ovija (twist) okoli prve. Ti dve krivulji lahko predstavljata rob traku, lahko pa tudi strukturo molekule DNA. Nas bo v prvi vrsti zanimala slednja, naša analiza pa velja bolj splošno. Kadar sta obe krivulji zaključeni (torej nimata robnih točk) tedaj lahko definiramo tudi njuno povezovalno število (linking number). Čalugăreanu je leta 1959 dokazal, da je vsota ovijanja in ukrivljanja enaka povezovalnemu številu.

Vsaka od treh omenjenih količin ima posebne lastnosti. Če proglasimo eno od krivulj za os, drugi pa pravimo sekundarna krivulja, tedaj je ukrivljanje odvisno le od osi, in je nelokalna količina. Nasprotno pa je ovijanje odvisno tudi od sekundarne krivulje in je lokalna količina. Med vsemi tremi je le povezovalno število topološka invarianta, to pomeni, da je invariantno na deformacije krivulj, edina omejitev pri tem je, da ena krivulja ne sme preiti skozi drugo.

Preden bomo začeli razpravljati o teh količinah moramo razmisliti kako matematično opisati krivulje in dvojno vijačno strukturo molekule DNA. Ta seveda ni sestavljena iz tankih matematično idealiziranih krivulj, ampak iz atomov in manjših molekularnih podstruktur, tako, da ni samoumevno kako preiti iz atomske slike na opis z vijačnicami. Običajno se vijačno strukturo napne na atome fosforja, so pa možne tudi drugačne konvencije.

2 Matematični opis molekule DNA

Zanimamo se za krivuljo \mathbf{x} , ki naj ne seka samo sebe. Vsa mesta na krivulji so v neki parametrizaciji t podana z

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(t). \quad (2.0.1)$$

Najbolj običajna parametrizacija (ki pa ni vedno najbolj enostavna za računanje) je naravna parametrizacija, pri kateri $\mathbf{x}(t)$ opiše vso krivuljo, tedaj ko $t = s$ preteče vse vrednosti med 0 in $L = \int dl$, kjer je slednja dolžina krivulje. če je ta krivulja obdana z skoraj paralelnimi krivuljami ji bomo rekli osna krivulja[1].

Predpostavimo, da je $\mathbf{x}(s)$ gladka in najmanj dvakrat zvezno odvedljiva. Tedaj lahko definiramo tangenti vektor

$$\mathbf{t}(s) = \frac{d\mathbf{x}}{ds} \quad (2.0.2)$$

če delamo v naravni parametrizaciji velja zanj tudi $|\mathbf{t}(s)| = 1$. Tudi odvod tangenta vektorja je vektor, ki je definiran kot

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\kappa} \frac{d\mathbf{t}(s)}{ds}, \quad (2.0.3)$$

če $\kappa = \left| \frac{d\mathbf{t}(s)}{ds} \right|$, ki ji pravimo ukrivljenost ni enaka 0. Iz definicije vektorja \mathbf{n} , ki mu pravimo normala vidimo, da je enotski. Sedaj pa lahko definiramo še tretji vektor, binormalo, takole

$$\mathbf{b} = \mathbf{t} \times \mathbf{n}. \quad (2.0.4)$$

Omenjeni trije vektorji $\{\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b}\}$ tvorijo desnorčno ortonormalno bazo in zadoščajo Frenet-

¹Tega in ostale izraze sem bolj ali manj uspešno prevedel iz angleščine, saj nisem poznal ustrezne slovenske besede.

Serretovim enačbam[1, 2]

$$\frac{d\mathbf{t}(s)}{ds} = \kappa\mathbf{n}, \quad (2.0.5)$$

$$\frac{d\mathbf{n}(s)}{ds} = \tau\mathbf{b} - \kappa\mathbf{t}, \quad (2.0.6)$$

$$\frac{d\mathbf{b}(s)}{ds} = -\tau\mathbf{t}, \quad (2.0.7)$$

kjer τ imenujemo torzija, čeprav nima nobene zveze s fizikalno torzijo. To so osnovne enačbe diferencialne geometrije krivulje. Povedo nam, da je "hitrost" tangente $\mathbf{t}(t)$ okoli osi $\mathbf{b}(t)$ $\kappa(t)$ in da je τ "hitrost" rotacije normale \mathbf{n} okoli osi \mathbf{t} . Frenet-Seretove enačbe lahko zapišemo tudi v matrični obliki[1, 2] kot

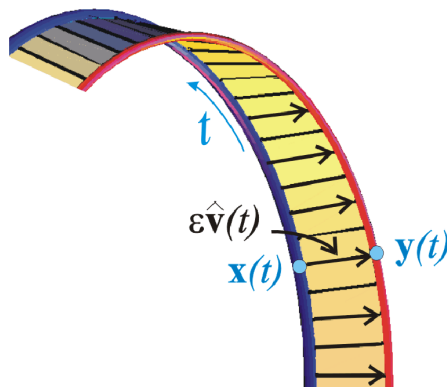
$$(\dot{\mathbf{t}}, \dot{\mathbf{n}}, \dot{\mathbf{b}}) = \mathbf{K}(\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b}), \quad (2.0.8)$$

kjer je \mathbf{K} matrika ukrivljenosti dana z

$$\mathbf{K}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \kappa(t) & 0 \\ -\kappa(t) & 0 & \tau(t) \\ 0 & -\kappa(t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.0.9)$$

Če poznamo ukrivljenost $\kappa(t)$ in torzijo $\tau(t)$ lahko s pomočjo Frenet-Seretovih enačb popolnoma rekonstruiramo krivuljo [2].

Mi bi radi opisali molekulo DNA, ki pa ni krivulja. Njeno obliko bolje posnemamo če osno krivuljo obdamo z strukturo in tako definiramo trak, ki nam lahko predstavlja DNA molekulo. Zato bomo potrebovali dodatno, sekundarno krivuljo \mathbf{y} (glej sliko 1) [1]. Najprej



Slika 1: Na sliki je osna krivulja $\mathbf{x}(t)$ skupaj z sekundarno krivuljo $\mathbf{y}(t)$ [1].

vpeljimo nov enotski vektor \mathbf{v} , ki je pravokoten na tangentnega \mathbf{t} , zahtevamo torej $\mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{t}(t) = 0$ (lahko izberemo tudi $\mathbf{v}(t) = \mathbf{n}(t)$). Ta vektor je usmerjen v točko $\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}(t) + \epsilon\mathbf{v}(t)$ na sekundarni krivulji. Običajno izberemo $\epsilon \ll 1$, da obdržimo krivulji blizu skupaj. Omenimo še, da v primeru ko izberemo naravno parametrizacijo lahko parametriziramo obe krivulji z $t = s$, toda parameter meri dolžino le vzdolž osne krivulje, ne pa tudi sekundarne krivulje. Če "narišemo" kroge z radijem ϵ , centrirane na $\mathbf{x}(t)$ in pravokotne na $\mathbf{t}(t)$, dobimo okoli osne krivulje cev, ki ne bo nikjer sekala same sebe, če bomo izbrali ϵ dovolj majhen. Če cev vsebuje tudi sekundarno krivuljo \mathbf{y} , tedaj lahko vsako točko na cevi opišemo s parom koordinat (t, ϕ) , kjer $\phi = 0$ definiramo na sekundarni krivulji, ki ima torej koordinate $(t, 0)$. Če definiramo $\mathbf{w} = \mathbf{t} \times \mathbf{v}$, lahko poljubno točko na površini cevi $\mathbf{y}(t, \phi)$ izrazimo s

$$\mathbf{y}(t, \phi) = \mathbf{x}(t) + \epsilon(\cos \phi \mathbf{v}(t) + \sin \phi \mathbf{w}(t)). \quad (2.0.10)$$

Če držimo konstanten kot $\phi = \beta$ lahko definiramo krivuljo, paralelno krivulji $\mathbf{y}(t, 0)$, ki poteka skozi točke $\mathbf{y}(t, \beta)$. S celo družino takih krivulj $0 \leq \beta < 2\pi$ pa lahko pokrijemo celotno površino cevi[1].

2.1 Vijačnica

V poglavju 2 smo pokazali kako lahko konstruiramo trak, oziroma ekvivalentno, molekulo DNA. Še vedno pa nismo nič rekli o obliki osne in sekundarne krivulje.

Za opis enojnega heliksa (ki se "ovija" okoli z osi) potrebujemo dva parametra ukrivljenost in torzijo ali pa višino enega zavoja heliksa h in njegov radij R . Krivuljo, ki opisuje enojni heliks potem enostavno zapišemo v parametrizaciji s kotom ϕ [2]

$$\mathbf{x}(\phi) = (R \cos \phi, R \sin \phi, \frac{h}{2\pi} \phi). \quad (2.1.1)$$

Upeljimo še kot α med lokalno tangento in ravnino xy , dolžina loka je tako dana z

$$l = \frac{\phi R}{\cos \alpha}. \quad (2.1.2)$$

Sedaj lahko izračunamo tangento na krivuljo \mathbf{x} , kakor smo jo definirali v poglavju 2

$$\mathbf{t} = \frac{d\mathbf{x}(s)}{dl} = (-\cos \alpha \sin \phi, \cos \alpha \cos \phi, \sin \alpha). \quad (2.1.3)$$

Produkt tangente na heliks \mathbf{t} in osi z je konstanta $\mathbf{t} \cdot \hat{z} = \sin \alpha$, kar je značilno za heliks. Če izračunamo ukrivljenost in torzijo heliksa (naprimer s pomočjo Frenet-Serretovih formul) ugotovimo, da je tudi njuno razmerje konstantno $\kappa/\tau = \cot \alpha$. Pravzaprav je Lancret[3] dokazal, da mora imeti heliks konstantno razmerje med ukrivljenostjo in torzijo, še več, izrek velja tudi v obratno smer, torej vsaka krivulja s to lastnostjo je heliks.

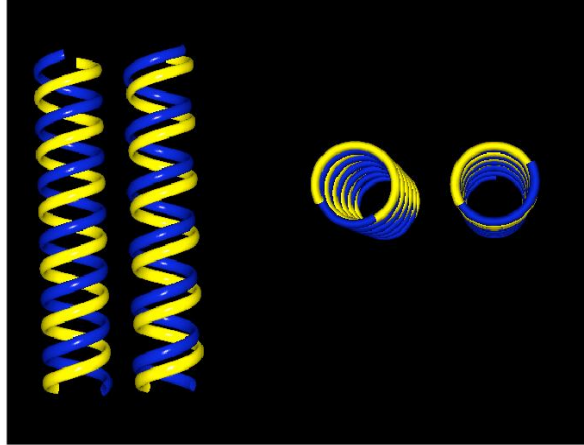
2.2 Dvojna vijačnica

V poglavju 2.1 smo definirali osno krivuljo \mathbf{x} , toda tako smo definirali le enega od obeh heliksov v molekuli DNA. Sedaj pa moramo narediti podobno tudi za sekundarno krivuljo \mathbf{y} , ki je prav tako vijačnica

$$\mathbf{y}(\phi) = (R \cos \phi, \pm R \sin \phi, \frac{h}{2\pi}(\phi + \Delta\psi)). \quad (2.2.1)$$

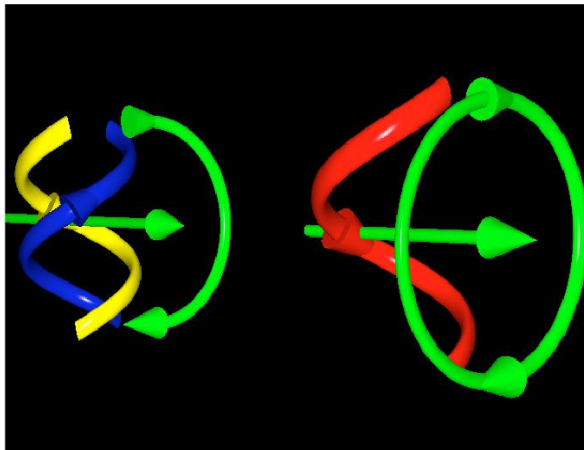
Kot $\Delta\psi$ pove kako sta heliksa medsebojno razmaknjena. Ako bi naprimer presekali dvojno vijačnico z ravnino xy bi v preseku dobili dve točki. Kot med njima (glede na center dvojnega heliksa) bi bil ravno $\Delta\psi$. Če izberemo $\Delta\psi = \pi$, dobimo simetrični heliks, toda struktura molekule DNA ni taka. DNA ja asimetrična dvojna vijačnica z zamikom $\Delta\psi = 3\pi/8$. Obe omenjeni strukturi sta narisani na sliki 2. Vidimo, da asimetrija povzroči neenake razmake med krivuljama \mathbf{x} in \mathbf{y} , nastalim režam pravimo veliki in mali žlebič.

Vsaka vijačnica ima tudi svojo ročnost, ki je definirana takole: če sledimo gibanju namišljene točke vzdolž vijačnice in kaže vektor kotne hitrosti v isto smer kot vektor hitrosti, tedaj je vijačnica desnoročna[2]. Če pa kaže v nasprotno smer tedaj je vijačnica levoročna. Kakorkoli zasučemo naprimer desnoročno vijačnico, še vedno ostane desnoročna vijačnica, če pa jo pogledamo skozi zrcalo vidimo levoročno vijačnico. To je definicija kiralnosti. Pri definiciji sekundarne krivulje v 2.2.1 smo za to namenoma napisali dva predznaka pred drugo koordinato, + pomeni, da imamo desno ročno vijačnico, - pa levoročno vijačnico, oba primera pa imamo skicirana na sliki 3. Ročnost je psevdoskalarna količina in ima le dve možni vrednosti ± 1 , tako, da se obnaša kot skalar pri vseh simetrijskih operacijah, le pri parnosti spremeni predznak.



Slika 2: Na sliki sta simetrični ($\Delta\psi = \pi$) in antisimetrični heliks. Asimetrija povzroči nastanek majhnega in velikega žlebiča[2].

Ročnost vijačnice, kot smo že povedali, pomeni smer gibanja točke $\mathbf{x}(t)$, ko povečujemo parameter t . Če se točka giblje v pozitivni smeri z osi (vseskozi predpostavljamo, da je vijačnica usmerjena v smeri \hat{z}), tedaj pravimo, da je ročnost desna, če pa v negativni, je ročnost leva. Vijačnico lahko vrtimo okoli osi, ki je pravokotna na os vijačnice (torej \hat{z}) in se nahaja ravno na polovici njene periode. Če imamo eno samo vijačnico (oziroma dvojno vijačnico pri čemer imata obe vijačnici, ki jo sestavljata enako ročnost) jo moramo zavrteti za kot 2π , da je slika takšna kot je bila pred rotacijo. Ako pa imamo dvojno vijačnico, pri čemer je ena desnoročna in druga levoročna, jo moramo zavrteti le za kot π da se ujame s svojo sliko pred rotacijo[2]. Realna DNA molekula je sestavljena iz dveh vijačnic nasprotnih ročnosti, torej ima diskretno grupno simetrijo C_2 .



Slika 3: Na levi strani imamo dvojno vijačnico sestavljeno iz levoročne in desnoročne vijačnice, na desni pa imamo samo levoročno vijačnico. Ravne zelene puščice ponazarjajo os vrtenja, ukrivljene pa kot rotacije, ki jo moramo napraviti, da vijačnica po rotaciji postane enaka vijačnici pred rotacijo. Kot vidimo je potrebno dvojno vijačnico z različnima ročnostima zavrteti le za kot π , enojno vijačnico pa za kot 2π [2].

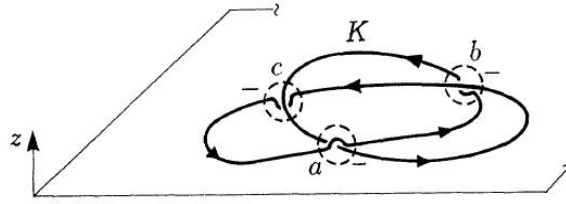
3 Povezovalno število, ovijanje, ukrivljanje in Čalugăreanu-White-Fullerjev izrek

Vsi modeli za molekulo DNA so predpostavljali, da je ta ravna, pa vendar v naravi to nikoli ni običajna situacija. Krivulja, ki je odgovorna za obliko DNA, teče po osi dvojne vijačnice in je lahko odprta ali pa zaprta. V zadnjem primeru sta začetek in konec spojena, tako, da je število zavojev vijačnice fiksno. Za takšno krivuljo lahko najdemo topološko invarianto, ki ji pravimo povezovalno število (linking number).

Ko govorimo o dveh zaključenih krivuljah, moramo to razumeti kot, da opazujemo robova traku (glej poglavje 2) ali pa obe vijačnici v molekuli DNA (glej 2.2). Sprva torej predpostavimo, da sta obe vijačnici zaključeni krivulji, tedaj veljajo spodnje definicije in izrek Čalugăreanu-White-Fullerja.

3.1 Število križanj

Mislimo si, da imamo dve krivulji in ju proiciramo na ravnino s normalo \mathbf{n} . V projekcijski ravnini bosta krivulji križali druga drugo nekajkrat (glej sliko 4). Številu $\mathcal{C}(\mathbf{n})$ pravimo število križanj (crossing number), definiran pa je kot razlika med pozitivnimi in negativnimi križanji (definicija pozitivnega in negativnega križanja sta na sliki 5). Za dve zaprti krivulji je $\mathcal{C}(\mathbf{n})$ neodvisno od \mathbf{n} . Računanje števila križanj je lahko udobna metoda za izračun povezovalnega števila in upogiba, kot bomo videli kasneje[1, 4, 6, 7, 8].



Slika 4: Na sliki imamo orientirani vozeli, ki je proiciran na ravnino xy . Pri točkah križanja dovolimo, da se krivulja ukrivi v pozitivni smeri osi z kot v točki (a) na sliki, in negativni smeri kot v točkah (b) in (c)[4].

3.2 Povezovalno število

Gaußovo povezovalno število je definirano kot dvojni integral preko osne krivulje \mathbf{x} , z točkami $\mathbf{x}(s)$ in tangento $\mathbf{t}_x(s)$ in \mathbf{y} , z točkami $\mathbf{y}(s')$ in tangento $\mathbf{t}_y(s')$ [1, 6]

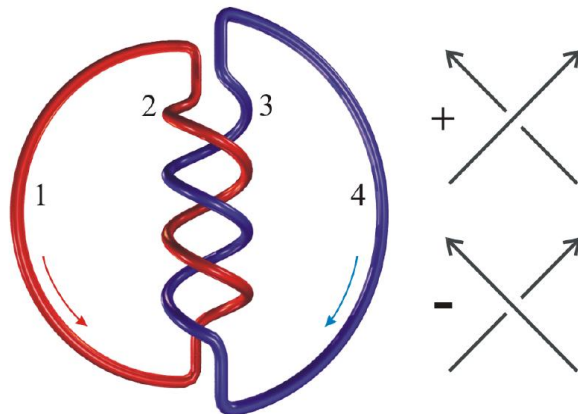
$$\mathcal{L}_k = \frac{1}{4\pi} \oint_{\mathbf{x}} \oint_{\mathbf{y}} \mathbf{t}_x(s) \times \mathbf{t}_y(s') \cdot \frac{\mathbf{x}(s) - \mathbf{y}(s')}{|\mathbf{x}(s) - \mathbf{y}(s')|^3} ds ds'. \quad (3.2.1)$$

Za \mathcal{L}_k veljajo naslednje trditve:

1. \mathcal{L}_k je invarianta na deformacije obeh krivulj, če le krivulji ne moreta preiti ena skozi drugo med deformacijo. To pomeni, da je to povezovalno število topološka invarianta[1, 2].
2. \mathcal{L}_k je naravno število.
3. \mathcal{L}_k je enako polovico števila križanj $\mathcal{C}(\mathbf{n})$ dveh krivulj, ne glede katero ravnino priprojicije izberemo (glej sliko 5)

$$\mathcal{L}_k = \frac{1}{2} \mathcal{C}(\mathbf{n}). \quad (3.2.2)$$

4. \mathcal{L}_k je neodvisno od izbire osne krivulje, kar pomeni, da se ne spremeni, če postavimo $s \rightarrow -s$. Za dve poljubni krivulji povezovalno število spremeni predznak, ako obrnemo smer parametrizacije eni sami. Pri obravnavi dvojne vijačnice moramo zato smer parametrizacije spremeniti obema krivuljama, če želimo, da se povezovalno število ne spremeni[1].



Slika 5: Dve zaključeni krivulji z štirimi križanji, vsa štiri so negativna. Primera pozitivnega in negativnega križanja sta na desni strani slike. Ugotovili smo, da je povezovalno število enako polovici števila križanj, tako, da je v tem primeru $\mathcal{L}_k = -2$ [1].

3.3 Ukrivljanje

Ukrivljanje izračunamo na podoben način kot povezovalno število[1]

$$\mathcal{W}_r = \frac{1}{4\pi} \oint_{\mathbf{x}} \oint_{\mathbf{x}} \mathbf{t}_{\mathbf{x}}(s) \times \mathbf{t}_{\mathbf{x}}(s') \cdot \frac{\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(s')}{|\mathbf{x}(s) - \mathbf{x}(s')|^3} ds ds' \quad (3.3.1)$$

Za \mathcal{W}_r veljajo naslednje trditve:

1. \mathcal{W}_r je odvisen le od krivulje \mathbf{x} .
2. \mathcal{W}_r je enak številu križanj krivulje \mathbf{x} s samo seboj, povprečeno preko vseh možnih projekcijskih kotov[1, 6].
3. \mathcal{W}_r je neodvisen od smeri osne krivulje. To pomeni, da lahko parametrizacijo obrnemo $s \rightarrow -s$, ukrivljanje pa mora pri tem ostati nespremenjeno.

3.4 Ovijanje

Ovijanje je definirano z enojnim integralom[1, 6, 7]

$$\mathcal{T}_w = \frac{1}{2\pi} \oint_x \mathbf{t}(s) \cdot \mathbf{v}(s) \times \frac{d\mathbf{v}(s)}{ds} ds \quad (3.4.1)$$

Za ovijanje veljajo naslednje trditve:

1. \mathcal{T}_w je lokalna količina, odvisna od obeh, osne in sekundarne krivulje. Lahko definiramo tudi lokalno gostoto ovijanja

$$\mathcal{T}_w = \frac{1}{2\pi} \oint_x \frac{d\mathcal{T}_w}{ds} ds. \quad (3.4.2)$$

2. $d\mathcal{T}_w/ds$ meri rotacijo sekundarne krivulje okoli osne krivulje. V vsaki točki na osni krivulji \mathbf{x} definira $d\mathcal{T}_w/ds$ ravnino, pravokotno na tangento $\mathbf{t}_x(s)$. Vektor $\mathbf{v}(s)$, ki smo ga definirali v poglavju 2 leži in se vrti v tej ravnini, zanj velja

$$\mathbf{t}(s) \cdot \mathbf{v}(s) \times \frac{d\mathbf{v}(s)}{ds} = 2\pi \frac{d\mathcal{T}_w}{ds}. \quad (3.4.3)$$

3. \mathcal{T}_w je neodvisen od smeri osne krivulje, kar pomeni, da je ovijanje odvisno od ročnosti vijačnice, ne pa od tega kako to vijačnico zavrtimo. Kot smo omenili že v poglavju 2.2 ni pomembno kako zavrtimo vijačnico, desnoročna vijačnica bo vselej desnoročna, natanko tako je tudi z ovijanjem.

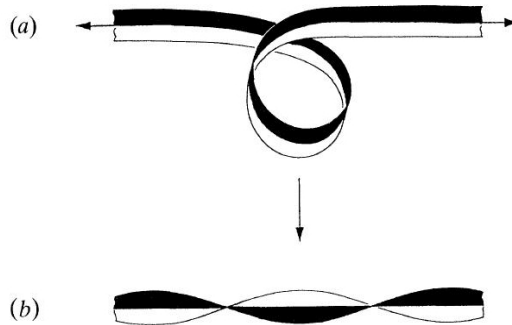
3.5 Čalugăreanu-White-Fullerjev izrek

Čalugăreanu je leta 1959 dokazal preprost izrek, ki povezuje povezovalno število \mathcal{L}_k , ovijanje \mathcal{T}_w in ukrivljanje \mathcal{W}_r [1, 6, 7, 8]

$$\mathcal{L}_k = \mathcal{T}_w + \mathcal{W}_r. \quad (3.5.1)$$

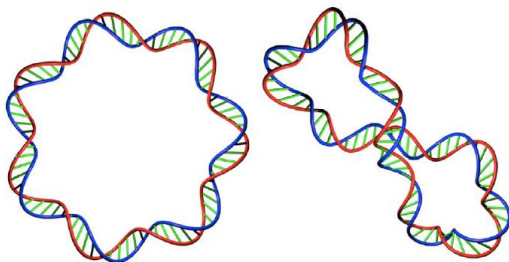
Tega izreka ne bomo dokazali, kljub temu povejmo idejo dokaza [1]. Če primerjamo enačbi ukrivljanja 3.3.1 in povezovalnega števila 3.2.1 opazimo, da sta zelo podobni, razlika je le ta, da v prvem primeru oba integrala tečeta po isti, osni krivulji, v drugem pa po tudi po sekundarni krivulji. Čalugăreanujevo formulo dobimo, če izračunamo povezovalno število v limiti ko gre ϵ proti 0. V tej limiti dobimo singularnost za točke $s = s'$, ki jo lahko ukrotimo tako, da integriramo po majhni okolici točk v katerih nastopi singularnost. Tako dobimo ovijanje \mathcal{T}_w .

Izrek, Čalugăreanu-White-Fullerja se nam morda zdi presenetljiv in neintuitiven, pa se ga vendarle da tudi intuitivno dobro razumeti. Na sliki 6 a imamo ukrivljanje in b ovijanje, njuna vsota je (kot vemo po enačbi 3.5.1) enaka povezovalnemu številu če je trak zaprt. Zamislimo si, da imamo na zaprtem traku pentljo (kot na sliki a) če ga začnemo vleči v označenih smereh se bodo te pretvorile v zasuke okoli osi traku (kot na sliki b). Vsota pentelj in zasukov pred in po tem ko smo trak raztegnili bo pri tem ostala enaka - to je izrek Čalugăreanu-White-Fullerja.



Slika 6: Na sliki a imamo eno pentljo, ako jo raztegnemo v označenih smereh se pretvori v vijačnico (trak se začne ovijati okoli osi, ki poteka po sredini traku). Če je trak sklenjen bo vsota pentelj in število period vijačnice enako za obe konfiguraciji (in tudi za vse ostale) - to je bistvo Čalugăreanu-White-Fullerjevega izreka [4].

Dvojna vijačnica, katere krivulja (ki poteka po sredi med baznimi pari oziroma na sredini med osno in sekundarno krivuljo) je ravna ima zaradi tega ukrivljanje 0. To pomeni, da je povezovalno število enako ovijanju. V splošnem primeru pa je povezovalno število vedno razdeljeno na ukrivljanje in ovijanje, kot pravi enačba 3.5.1. Na sliki 7 imamo dve konfiguraciji DNA z istim povezovalnim številom, toda različnim ukrivljanjem in ovijanjem.



Slika 7: Dve konfiguraciji z istim povezovalnim številom $\mathcal{L}_k = 7$. Leva, okrogla DNA ima $\mathcal{T}_w = 7$ in $\mathcal{W}_r = 0$. Ista, vendar nekoliko deformirana DNA (na desni sliki) ima $\mathcal{T}_w = 8$ in $\mathcal{W}_r = -1$ [2].

4 Odprte krivulje

Do sedaj smo se ukvarjali z zaprtimi vijačnicami, zanje smo znali napisati vse zgornje koristne izreke, toda nas v resnici primer zaprtih krivulj ne zanima najbolj, saj DNA v večini primerov ni zaprta, ampak odprta krivulja. Da jo bomo znali opisati moramo na novo premisliti o vsem kar smo zgoraj povedali.

4.1 \mathcal{L}_k za odprte krivulje

Z Gaußovo formulo lahko izračunamo povezovalno število (enačba 3.2.1) s pomočjo dvojnega integrala, kar je lahko zamudno, zato je včasih bolje narediti vsoto po enojnih integralih[1] v neki izbrani smeri (recimo v smeri osi z). To bomo obdelali v tem poglavju. V veliko primerih bodo integrali enostavno izračunljivi, še več ti integrali nam bodo dali naravno definicijo za povezovanje, ukrivljanje in ovijanje odprtih krivulj z ločenimi točkami na robnih ravninah, kot bomo videli v nadaljevanju. To je za nas še posebej pomembno, saj nas zanima molekula DNA, ki pa najpogosteje ni zaprta krivulja, tako, da zanjo zgornji teoremi direktno ne veljajo.

Ključ do teh izrazov je opazovanje rotacije okoli izbrane fiksne smeri (vzeli jo bomo v smeri osi z). Predstavljajmo si, da potujemo v smeri te izbrane smeri \hat{z} in gledamo kako se dve krivulji (naprimer vijačnici) ovijata okoli nje (slika 5). Opazovanje tega kota rotacije nas privede do povezovalnega števila. Opazujmo torej krivulji \mathbf{x}_i in \mathbf{x}_j in predpostavimo, da obe krivulji potujeta v pozitivni smeri osi z , torej $dz/ds > 0$. Tedaj lahko krivulji parametriziramo s z . Naj bo vektor relativne razdalje med obema točkama $\mathbf{r}_{ij}(z) = \mathbf{x}_j(z) - \mathbf{x}_i(z)$, iz konstrukcije je očitno, da vektor leži v xy ravnini. S $\Theta_{ij}(z)$ bomo označili orientacijo tega vektorja v ravnini glede na os x . Ko bomo potovali v smeri osi z , se bo ta vektor vrtil, s pomočjo tega bomo dobili preprost način za izračun povezovanja in ukrivljanja. Spreminjanje tega kota podaja spodnja zveza

$$\frac{d\Theta_{ij}}{dz} = \frac{\hat{z} \cdot \mathbf{r}_{ij}(z) \times \mathbf{r}'_{ij}(z)}{|\mathbf{r}_{ij}(z)|^2} \quad (4.1.1)$$

Skupni kot vrtenja, ki je lahko več kot 2π med dvema ravninama, prvo na višini z_1 in drugo na višini z_2 je preprosto integral tega razmerja

$$\Delta\Theta_{ij} = \int_{z_1}^{z_2} \frac{d\Theta_{ij}}{dz}. \quad (4.1.2)$$

Kot vemo lahko ovijanje \mathcal{T}_w definiramo z rotacijo sekundarne krivulje okoli osne krivulje, izbrano os torej venomer spreminjamo. Tukaj bomo povezovalno število \mathcal{L}_k in ukrivljanje \mathcal{W}_r definirali tako, da bomo gledali rotacijo okoli fiksne osi (naprimer osi z) [1].

Do sedaj smo predpostavili, da obe krivulji vedno potujeta navzgor, sedaj pa to predpostavko opustimo[1]. Krivuljo pa lahko še vedno razdelim na dele, za katere velja $dz/ds > 0$ in $dz/ds <$

0. Recimo, da ima krivulja \mathbf{x} n takih kosov, ki ji označimo $i = 1, \dots, n$. Kos i se začne na višini z_i in končuje na z_{i+1} . S $\sigma_i(z)$ označimo če se kos i dviga ali pada:

$$\sigma_i(z) = \begin{cases} 1 & z \in (z_i, z_{i+1}); \quad dz/ds > 0, \\ -1 & z \in (z_i, z_{i+1}); \quad dz/ds < 0, \\ 0 & z \ni (z_i, z_{i+1}). \end{cases} \quad (4.1.3)$$

Predpostavimo, da je krivulja x sestavljena iz kosov $i = 1, \dots, n$ in krivulja y iz $j = 1, \dots, m$. Naj bo Θ_{ij} orientacija relativnega vektorja $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{y}_j(z) - \mathbf{x}_i(z)$, tedaj povezovalno število med obema kosoma dobimo s

$$\mathcal{L}_k = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sigma_i \sigma_j \frac{d\Theta_{ij}}{dz} dz \quad (4.1.4)$$

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{\sigma_i \sigma_j}{2\pi} \Delta\Theta_{ij}. \quad (4.1.5)$$

Če pa nas zanima le povezovalno število za odsek med $-\infty$ in z_0 , tedaj ga izračunamo takole

$$\tilde{\mathcal{L}}(z_0) = \int_{-\infty}^{z_0} \frac{d\tilde{\mathcal{L}}}{dz} dz, \quad \text{kjer je} \quad (4.1.6)$$

$$\frac{d\tilde{\mathcal{L}}}{dz} dz = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{\sigma_i \sigma_j}{2\pi} \frac{d\Theta_{ij}}{dz}. \quad (4.1.7)$$

$\tilde{\mathcal{L}}(z_0)$ nam da torej povezovalno število pod z_0 . Vedeti moramo, da $\tilde{\mathcal{L}}(z_0)$ za to ni več topološka invarianta v prejšnjem pomenu, saj je odvisen od premikov in deformacij obeh krivulj. Še vedno pa ima topološki pomen, invarianten je namreč na deformacije krivulj, ki izginejo v ravnini $z = z_0$.

4.2 \mathcal{T}_w za odprte krivulje

Ovijanje se da obravnavati na enak način kot povezovalno število[1] in to ni težko, saj je \mathcal{T}_w lokalna količina. Ovijanje do krivulje od $-\infty$ do z_0 torej definiramo kot

$$\tilde{\mathcal{T}}(z_0) = \int_{-\infty}^{z_0} \frac{d\tilde{\mathcal{T}}(z)}{dz} dz. \quad (4.2.1)$$

Spomnimo se definicije sekundarne krivulje $\mathbf{y} = \mathbf{x} + \epsilon \mathbf{v}$, ki teče ob osni krivulji. Krivulji razdelimo na intervale \mathbf{x}_i in \mathbf{y}_i v ekstremih po z , tako kot v prejšnjem poglavju. Vzdolž vsakega kosa lahko izračunamo ovijanje po enačbi 3.4.1. Označimo prispevek i -tega dela z \mathcal{T}_{wi} , kot vemo i -ti del krivulje opisuje celotno krivuljo od z_i^{min} do z_i^{max} . Spomnimo se, da σ_i nosi informacijo o predznaku ds/dz (če je $\sigma_i = +1$, sta $s = s_i^{min}$ in $z = z_i^{min}$). Ovijanje i -tega dela krivulje tako zapišemo

$$\mathcal{T}_{wi} = \int_{s_i^{min}}^{s_i^{max}} \frac{d\mathcal{T}_{wi}}{ds} ds = \int_{z_i^{min}}^{z_i^{max}} \frac{d\mathcal{T}_{wi}}{ds} \left| \frac{ds}{dz} \right| dz \quad (4.2.2)$$

in tako

$$\tilde{\mathcal{T}}'_i(z) = \frac{d\mathcal{T}_{wi}}{ds} \left| \frac{ds}{dz} \right| = \frac{\sigma_i}{2\pi} \mathbf{t}_i(z) \cdot \mathbf{v}_i(z) \times \mathbf{v}'_i(z). \quad (4.2.3)$$

4.3 \mathcal{W}_r za odprte krivulje

Tudi ukrivljanje odprte krivulje lahko obravnavamo podobno kot smo povezovalno število, torej uporabimo podobne tehnike kot zgoraj in izračunamo \mathcal{L}_k , potem pa odštejamo \mathcal{T}_w . Kot smo že omenili je za celotno zaključeno krivuljo $\mathcal{W}_r = \mathcal{L}_k - \mathcal{T}_w$ odvisen le od osne krivulje, sekundarne krivulje spreminjajo le \mathcal{L}_k in \mathcal{T}_w .

Uspelo nam je že izračunati $\tilde{\mathcal{L}}(z_0)$ in $\tilde{\mathcal{T}}_w(z_0)$, zato si želelimo definirati novo količino $\tilde{\mathcal{W}}(z_0) = \tilde{\mathcal{L}}(z_0) - \tilde{\mathcal{T}}_w(z_0)$, ki meri ukrivljanje krivulje pod ravnino na višini z_0 . Če je ta novo definirana količina odvisna le od osne krivulje bi to upravičilo, da jo res obravnavamo kot ukrivljanje, saj ima ukrivljanje za zaprto krivuljo takšno lastnost[1, 4]. Vendar na žalost je $\tilde{\mathcal{L}}(z_0) - \tilde{\mathcal{T}}_w(z_0)$ odvisen tudi od sekundarne krivulje. Z vidika matematike se da ta problem obvladati, vendar celotnega postopka ne bomo navajali v tem seminarju. Napišimo samo rezultat za ukrivljanje, ki ga tako dobimo

$$\mathcal{W}_r = \tilde{\mathcal{W}}_{local} + \tilde{\mathcal{W}}_{nonlocal}; \quad (4.3.1)$$

$$\tilde{\mathcal{W}}_{local} = \frac{1}{2\pi} \sum_{i=1}^n \int_{z_i^{min}}^{z_i^{max}} \frac{1}{1 + |\lambda_i|} (\mathbf{t}_i \times \mathbf{t}_i)_z dz, \quad (4.3.2)$$

$$\tilde{\mathcal{W}}_{nonlocal} = \sum_{i=1}^n \sum_{i \neq j=1}^n \frac{\sigma_i \sigma_j}{2\pi} \int_{z_{ij}^{min}}^{z_{ij}^{max}} \Theta'_{ij}(z) dz, \quad (4.3.3)$$

kjer je $\lambda = dz/ds$ V primeru, da v vsotah vzamemo vse dele razsekane krivulje (in je ta zaprta) izračunamo pač ukrivljanje zaprte krivulje, sicer pa odprte krivulje.

Izkaže se, da je rezultat neodvisen od izbire sekundarne krivulje, kar je v redu. Torej lahko to mero posplošimo v kateri koli smeri. Naj bo q kartezična koordinata na osi, ki jo definira enotski vektor \hat{q} , ki ima poljubno smer v prostoru. Tedaj lahko definiramo ukrivljanje odprte krivulje $\tilde{\mathcal{W}}(q_0, \hat{q})$ glede na smer \hat{q} . Tako opišemo ukrivljanje krivulje od $-\infty$ do ravnine, ki se nahaja na višini q_0 . Tako pa definiramo ukrivljanje med dvema ravninama q_0 in q_1

$$\tilde{\mathcal{W}}(q_0, q_1, \hat{q}) = \tilde{\mathcal{W}}(q_1, \hat{q}) - \tilde{\mathcal{W}}(q_0, \hat{q}). \quad (4.3.4)$$

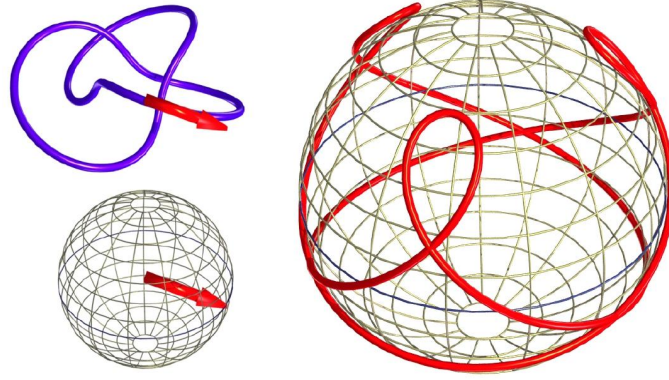
Tej na novo definirani meri za ukrivljanje pravimo polarno ukrivljanje[1, 4] v smeri \hat{q} (polar wright with respect to \hat{q}), od zdaj naprej bomo zaradi enostavnosti raje izbrali, os z .

Povejmo še, da je polarno ukrivljanje neodvisno od orintacije osne krivulje, to pomeni, da transformacija $s \rightarrow -s$ ne vpliva na polarno ukrivljanje. Z drugimi besedami to pomeni, da desnoročni heliks ostane desnoročni keliks, če ga obrnemo na glavo.

5 Ukrivljanje in tangentna krivulja

Ukrivljanje pa lahko izračunamo tudi geometrično, tako, da konstruiramo tangentno krivuljo (tantrix curve). Tangentni vektor \mathbf{t} je po definiciji enotski vektor, kadar se pomikamo po krivulji se torej tangentni vektor pomika po enotski sferi. To sfero imenujmo tangentna sfera (tantrix sphere) in dopustimo, da konica tangentnega vektorja \mathbf{t} po ti sferi pusti sled. To pot, ki jo izriše tangentni vektor med gibanjem po enotski sferi imenujemo tangentna krivulja. Fuller je leta 1978 dokazal[7], da je upogib zaprte krivulje enak površini A , ki jo na sferi zapre tangentna krivulja (glej sliko 8)

$$\mathcal{W}_r = \frac{A}{2\pi} - 1 \quad \text{mod } 2. \quad (5.0.5)$$



Slika 8: Vozel in njegova tangentna krivulja. Zgornja leva slika prikazuje vozlo z tangentnim vektorjem v neki točki na krivulji. Levo spodaj je ta vektor narisana skupaj z enotsko sfero. Kot vidimo konica vektorja leži na enotski sferi. Slika na desni predstavlja celo tangentno krivuljo za vozlo na levi strani (za to krivuljo je $\mathcal{W}_r = 3.52$) [4].

5.1 Polarno ukrivljanje

Tangentna sfera pa nam lahko pomaga tudi pri obravnavi polarnega ukrivljanja [1]. Obstaja namreč izrek, ki pravi, da je polarno ukrivljanje za odsek krivulje, za katerega velja $ds/dz > 0$ enako $A/2\pi$, kjer je A površina med tangentno krivuljo in severnim polom (konca tangentne krivulje pa sta povezana s severnim polom po poldnevnikih). To površino definiramo za pozitivno, če tangentna krivulja potuje okoli pola v pozitivnem smislu. Podobno je polarno ukrivljanje dela krivulje, za katerega velja $ds/dz < 0$ enako $A/2\pi$, kjer pa je A sedaj površina med tangentno krivuljo in južnim polom.

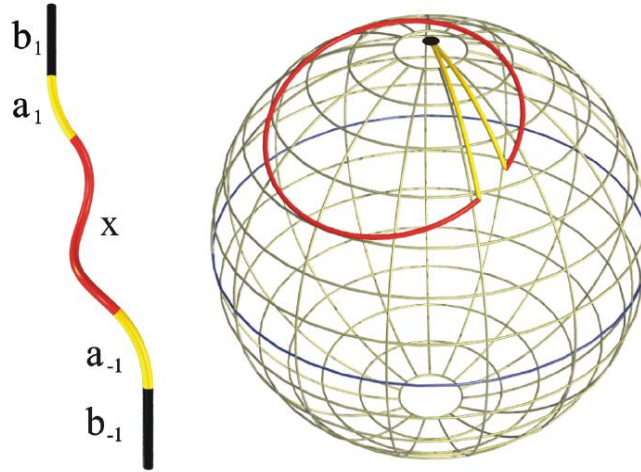
To kar smo do sedaj povedali v tem poglavju velja samo za zaprte krivulje, sedaj pa bomo obdelali še odprte.

5.2 Ekvivalentne zaprte krivulje

Vzemimo, da se odprta krivulja (recimo dvojna vijačnica DNA) razteza (oblika ni pomembna) med dvema ravninama. Tedaj lahko ukrivljanje odprte krivulje izračunamo tako, da dopolnimo odprto krivuljo do zaprte krivulje in nato izračunamo ukrivljanje zaprte krivulje. Definicija polarnega ukrivljanja ni odvisna od tega ali imamo odprto ali zaprto krivuljo. Če razrežemo krivuljo na več delov z paralelnimi rezinami, tedaj je polarno ukrivljanje vsota teh kosov.

Recimo da imamo del krivulje \mathbf{x} , ki ima $ds/dz > 0$, zgornji del krivulje naj bo na višini z_1 , spodnji pa na z_{-1} . Tedaj celotna tangentna krivulja leži na severni hemisferi enotske sfere. Tangentno krivuljo lahko zato zapremo tako, da povežemo konca krivulje s severnim polom po poldnevnikih [1] (glej sliko 9). Če tangentno krivuljo slikamo nazaj v originalno krivuljo vidimo, da smo s tem odprto krivuljo zaprli. Tako spreminjanje tangentne krivulje za našo originalno krivuljo pomeni, da na zgornjem koncu $\mathbf{x}(z_1)$ dodamo krožni lok [1] \mathbf{a}_1 , ki krivuljo podaljša do $z_2 > z_1$. Razlog, da dodamo ta lok je le v tem, da krivuljo gladko poravnamo z osjo z . Robni pogoji za del \mathbf{a}_1 so torej $\mathbf{a}_1(z_1) = \mathbf{x}(z_1)$, $\mathbf{a}'_1(z_1) = \mathbf{x}'(z_1)$ in $\mathbf{a}'(z_2) = \hat{z}$. Nato pa dodamo še navpično krivuljo $\mathbf{b}_1(z)$ na lok \mathbf{a}_1 na višini z_2 , to pomeni, da so robni pogoji $\mathbf{a}_1(z_2) = \mathbf{b}_1(z_2)$ in $\mathbf{a}'_1(z_2) = \mathbf{b}'_1(z_2) = \hat{z}$. Dodatka \mathbf{a}_1 in \mathbf{b}_1 ne prispevata nič k ukrivljanju, kar smo tudi želeli. Tudi spodnji del krivulje razširimo na ta način.

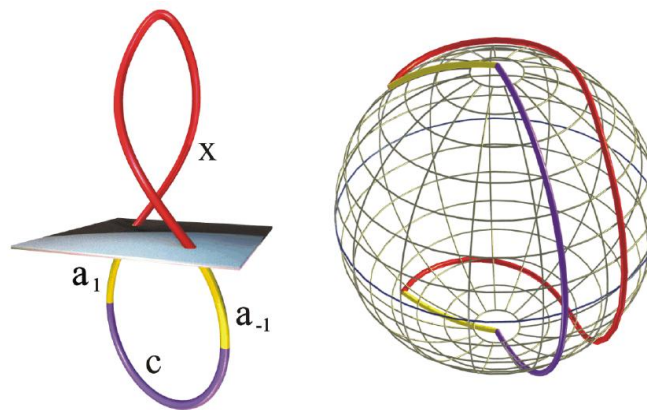
Konca \mathbf{b}_1 in \mathbf{b}_{-1} lahko razširimo v $\pm\infty$ in tako zapremo krivuljo v neskončnosti. Lahko pa tudi povežemo \mathbf{b}_1 in \mathbf{b}_{-1} s planarno krivuljo \mathbf{c} in tako tvorimo končno zaprto krivuljo. V tem primeru mora krivulja \mathbf{c} ležati v ravnini, ki jo definira \hat{z} in vektor, ki povezuje oba konca krivulj



Slika 9: Odprto krivuljo x smo razširili z dodatkom krožnih segmentov a_1 in a_{-1} , nato pa navpičnih krivulj b_1 in b_{-1} . Na desni strani imamo tangento krivuljo, ki smo jo po tem postopku dobili[1].

b_1 in b_{-1} , ki smo ju dodali. Za to krivuljo je ukrivljanje 0, saj se ne upogiba glede na ostali del krivulje.

Četudi se odprta krivulja ne razteza med dvema ravninama kot kaže slika 9, ampak ima obliko zanke z končnimi točkami na isti ravnini, na višini $z = 0$ jo lahko preprosto razširimo do zaprte krivulje. Najprej povežemo oba konca s krožnimi odseki a_1 in a_{-1} , nato pa ta odseka povežemo s polkrožno krivuljo c . Odseka a_1 in a_{-1} imata nalogo, da gladko spremenita smer tangente obstoječi krivulji v navpično. Tangentna krivulja, ki temu ustreza je del poldnevnika, ki poveže konce krivulje x s severnim ali južnim polom.



Slika 10: Odprto krivuljo x s konci na isti ravnini smo razširili do zaprte krivulje z dodatkom dveh krožnih lokov a_1 , a_{-1} in polkrogom c . Tangentna krivulja, ki temu ustreza je prikazana na desni sliki[1].

6 zaključek

Molekula DNA ima strukturo dvojne vijačnice, kot sta leta 1953 ugotovila Watson in Crick. Strukturo poljubnega traku lahko matematično opišemo s pomočjo osne in sekundarne krivu-

lje. Mi se ukvarjamo z dvojno vijačnico, zato osno in sekundarno krivuljo konstruiramo kot dve enojni vijačnici. Pri tem upoštevamo tudi dejstvo, ki sta ga z analizo difraktograma (ki ga je posnela Rosalind Franklin) odkrila omenjena fizika, dvojno vijačna struktura molekule DNA je namreč nesimetrična. Ugotovimo, da lahko zaprti dvojno vijačni strukturi pripišemo ukrivljanje \mathcal{W}_r , ovijanje \mathcal{T}_w in povezovalno število \mathcal{L}_k , ki poveže vse tri preko Čalugăreanu-White-Fullerjevega izreka. Edino povezovalno število pa je tudi topološka invarianta za zaprte krivulje.

Molekula DNA, ki jo najdemo v naravi večinoma ni zaključena sama s sabo, ampak je odprta krivulja. Zato smo definirali vse omenjene količine še za odprte krivulje. Pri tem smo imeli nekaj težav s ukrivljanjem, saj ta ni lokalna opazljivka, ampak je odvisen od celotne oblike krivulje. Pri računanju ukrivljanja smo si zato pomagali tudi s tangentnimi krivuljami, obstaja namreč izrek, ki nam na ta način omogoča enostavno računanje ukrivljanja.

Obstajajo pa še drugi, bolj preprosti, načini za izračun ukrivljanja. Fuller je na primer leta 1978 dokazal izrek, kjer je pokazal, da lahko ukrivljanje zaprte krivulje \mathbf{x} pod določenimi pogoji primerjamo s ukrivljanjem referenčne krivulje \mathbf{x}_{ref} in ga tako izračunamo z enojnim integralom²[1, 7].

²Pri uporabi Fullerjevega izreka moramo biti pazljivi, saj da kršenju predpostavk popolnoma napačne rezultate[1].

Literatura

- [1] M. A. Berger and C. Prior *The Writhe of Open and Closed Curves*, J. Phys. **39**, 8321-8348 (2006).
- [2] R. Podgornik, <http://www.fmf.uni-lj.si/podgornik/download/physics-of-DNA-1.0.pdf>, (2012).
- [3] M. Barros *General helices and a theorem of Lancret*, Proc. A. Math. Soc. **125**, 5 (1997).
- [4] H. K. Moffatt and R. L. Ricca, *Helicity and the Călugăreanu invariant*, Proc. R. Soc. Lond. **439**, 411-429 (1992).
- [5] S. Neukirch and E. L. Starostin *Writhe formulas and antipodal points in plectonemic DNA configurations*, Phys. Rev. **78**, 041912 (2008).
- [6] M. R. Dennis and J. H. Hannay *Geometry of Călugăreanu's theorem*, Proc. R. Soc. Lond. **461**, 2062 (2005).
- [7] F. B. Fuller *The Writhing Number of a Space Curve*, Proc. Nat. Acad. Sci. USA **68**, 815-819 (1971).
- [8] J. H. White *Self linking and the Gauss integral in higher dimensions*, Ame. Jour. of Math. **91**, 3 (1968).