

# Nudos, enlaces, ADN y helicidad

Irene Llerena

Marzo 2021

Estas notas tratan sobre un concepto matemático, el número de enlace de dos nudos, y su importancia en dos áreas muy distintas: la Biología Molecular y la Física de Plasmas. No pretenden hacer una exposición detallada y rigurosa, solo satisfacer la curiosidad y el interés por estas aplicaciones de un concepto, en principio, muy elemental: el número de vueltas que una curva cerrada da a otra. Hice estas notas hace algún tiempo, cuando colaborando en un proyecto de plasmas, me encontré con el concepto de helicidad. Parecía que podría aplicarse a los objetivos del proyecto en aquel momento. No fue así y las notas quedaron archivadas. Últimamente la curiosidad y el interés me han hecho volver a ellas y las he ampliado. Espero que no haya ningún error de bulto puesto que no soy especialista en estos temas. Por eso he incluido en la bibliografía todas las referencias que me han parecido útiles para el lector, o bien porque se expon lo que explico con detalle y rigor, o bien son se extienden más en determinados aspectos, o simplemente contienen explicaciones muy ilustrativas. En la bibliografía de esos artículos se encuentran muchas otras fuentes de los temas que se tratan.

## 1 Nudos. Números de enlace

Los nudos se conocen y utilizan desde muy antiguo. Pensemos en los nudos marineros, corredizos, de escalada... No debieron faltar verdaderos expertos en todo tipo de nudos. Sin embargo, desde el punto de vista científico no despertaban gran interés. Eso cambió en la segunda mitad del siglo XIX, como resultado de las investigaciones de tres físicos matemáticos escoceses: William Thomson (más tarde Lord Kelvin), Peter G. Tait y James C. Maxwell [27]. Tait ideó un experimento que creaba torbellinos circulares de humo que duraban un cierto tiempo. Su intención era ilustrar las teorías de Hermann von Helmholtz sobre la estabilidad y evolución de las líneas de vorticidad (los torbellinos) en un fluido perfecto. El aire no es un fluido perfecto, pero aros de torbellinos se pueden observar en ocasiones, por ejemplo, en los vapores que emanan de un volcán en actividad, o en el humo de un fumador de puros.

Thomson estaba por entonces preocupado por la naturaleza de los átomos, cuya existencia se daba por segura pero cuya naturaleza no se entendía. En aquel tiempo se creía que un fluido invisible, el éter, llenaba el espacio y era el medio por el que se transmitían todas las formas de energía. Los experimentos de Tait llevaron a Thomson a pensar que los bloques básicos de la materia podían ser torbellinos de éter, cerrados ya que “necesariamente debían carecer de extremos”, es decir, circuitos cerrados anudados de distintas formas. La teoría atómica de Thomson era muy ambigua pero animó a Tait a dedicar muchos esfuerzos a la clasificación de los nudos. Se trataba de determinar qué nudos eran el mismo nudo, en el sentido de que se podían deformar unos en otros, y para qué pares de nudos eso era imposible. Tait carecía de las herramientas matemáticas necesarias para esta tarea y, sin embargo, la clasificación de nudos que dio en 1878 resultó ser correcta como demostraron años más tarde, Henri Poincaré y James W. Alexander, que contaban ya con las herramientas apropiadas. Cuando a finales de siglo se demostró que

no existía el éter los químicos dejaron de interesarse por la clasificación de los nudos, pero hoy en día sigue siendo un objetivo importante de la teoría matemática de nudos.

Las teorías de Thomson suponían la existencia de torbellinos con la forma de distintos tipos de nudos. Ahora bien, los experimentos de Tait producían solo torbellinos circulares; quedaba en el aire la posibilidad de crear vórtices con la forma de otros tipos de nudos. Incluso se empezó a dudar de su existencia real. No ha sido hasta 2013 que Dustin Kleckner y William TM Irvine [17] han conseguido crear un nudo de trébol con un método innovador, y con el que parece posible crear toda clase de nudos.

En matemáticas un *nudo* es una curva cerrada que no se corta a ella misma. Un *enlace* es un par (o más) de nudos posiblemente entrelazados. El *número de enlace* de un par de nudos es simplemente el número de vueltas que una curva da a la otra. Maxwell se interesó más por cuestiones electromagnéticas. En una carta a Tait, Maxwell le habla del significado físico del número de enlace entre dos nudos: este número, decía Maxwell, es esencialmente el trabajo realizado por una unidad de carga que se mueve en uno de los nudos, sobre el otro nudo.

Del número de enlace pocos se ocuparon hasta que en 1953 James Watson y Francis Crick propusieron el modelo de doble hélice para la molécula del ADN. El número de enlace resultó esencial en el estudio del ADN y los biólogos se dedicaron intensamente a estudiar sus propiedades. Poco después, en 1969, H. Keith Moffatt descubrió la relación entre importantes invariantes de hidrodinámica y de magnetohidrodinámica (MHD) con los números de enlace de las líneas de vorticidad, en el caso de la hidrodinámica, y con las líneas magnéticas, en el caso de la magnetohidrodinámica. Moffatt llamó *helicidad* a estos invariantes, que han adquirido gran importancia en el estudio de los plasma, tanto en astrofísica como plasmas confinados.

## La definición de nudo

En matemáticas un *nudo* es la imagen de una *curva* sin autointersecciones. Es decir, la imagen de una aplicación continua inyectiva  $g : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^3$ . Si la aplicación es inyectiva salvo en los extremos que coinciden:  $g(0) = g(1)$  decimos que se trata de una *curva cerrada* o *nudo*.

Cualquier curva cerrada  $g$  puede expresarse como composición  $g = f\pi$  de la aplicación

$$\pi : [0, 1] \rightarrow S^1, \quad \pi(t) = e^{2\pi t} = (\cos 2\pi t, \sin 2\pi t)$$

que enrolla el intervalo en la circunferencia  $S^1$ , y una aplicación  $f : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$  inyectiva y continua.  $f$  es pues un homeomorfismo <sup>1</sup> en su imagen. Un nudo puede pues interpretarse como una circunferencia inmersa en el espacio. Por otra parte, toda aplicación  $f : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$  inyectiva y continua define una curva cerrada  $g = f\pi$  sin autointersecciones. Resulta pues equivalente dar un nudo como la imagen de una curva cerrada  $g$  o como imagen de una inyección continua de la circunferencia en el espacio.

La pregunta más natural de hacerse cuando se tiene un nudo es: ¿se puede “deshacer”? Si los nudos fueran curvas abiertas, todos los nudos se podrían deshacer, es decir, deformar en un trozo recto, en un segmento. En el caso de un nudo deshacer significa deformarlo en una circunferencia. Las circunferencias se consideran *nudos triviales*. En general, nos interesa saber cuando, dados dos nudos, se puede deformar uno de ellos en el otro. Es este caso decimos que los dos nudos son *equivalentes*. Las circunferencias, por ejemplo, son todos nudos equivalentes. La figura 1 muestra otro ejemplo, procedente de [3].

Pero debemos ir con cuidado ¿qué significa exactamente “deformar” un nudo? Recordemos que los nudos son todos homeomorfos a circunferencias y por tanto homeomorfos entre sí. Así pues, las deformaciones no pueden ser simples aplicaciones de un nudo en el otro, puesto que estas siempre existen. Nosotros queremos interpretar matemáticamente una deformación de cuerdas materiales, y estas cuerdas

---

<sup>1</sup>Un *homeomorfismo* es una aplicación biyectiva tal que tanto ella como su inversa son continuas. En particular observemos que no conserva medidas ni formas geométrica

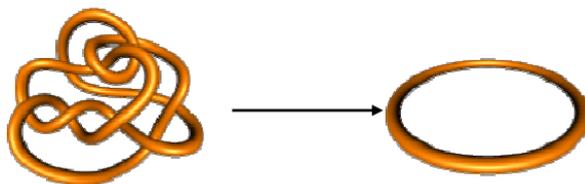


Figure 1: Nudo trivial.

están inmersas en el espacio y se deforman en él de forma que todos los estados intermedios de la deformación son nudos. Esto nos lleva a la siguiente definición.

Dos nudos,  $K$  y  $F$ , representados por aplicaciones  $f_K, f_F : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$  son *equivalentes* si existe una aplicación continua

$$I : \mathbb{R}^3 \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^3$$

que cumpla tres condiciones. Para enunciarlas utilizaremos la siguiente notación: para todo  $t \in [0, 1]$

$$I_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad I_t(\mathbf{x}) = I(\mathbf{x}, t), \quad \text{para todo } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$$

La variable  $t$  suele llamarse *tiempo*. Las condiciones son: (i) para todo  $t$ ,  $I_t$  a un homeomorfismo; (ii) al inicio,  $t = 0$ ,  $I_0$  es la identidad y (iii) al final,  $t = 1$ ,  $I_1$  superpone  $K$  a  $F$ :  $I_1(f_K(\mathbf{x})) = f_F(\mathbf{x})$ , para todo  $\mathbf{x} \in S^1$ . Se dice entonces que  $I$  es una *isotopía del ambiente*<sup>2</sup>.

## Número de enlace

Se llama *enlace* al conjunto de dos o más nudos sin puntos comunes. El *número de enlace* (*linking number*) de un par de nudos  $K$  y  $F$  es ‘simplemente’ el número de vueltas que cada uno de ellos da al otro. Lo designaremos por  $Lk(K, F)$ .

En la figura 2 (a) el número de enlace es claramente 4, que es también la mitad del número de veces que las curvas se cruzan. En la figura 2 (b) las curvas también se cruzan 8 veces, pero en este caso en uno de los cruces hemos intercambiado la curva que pasa por encima con la de abajo, lo que ha motivado que ahora las curvas solo den 3 vueltas una a la otra. Por otra parte, las curvas pueden dar la vuelta la una a la otra en dos sentidos. El número de enlace debe que reflejar también el sentido de las vueltas y lo haremos asinándole un signo + ó -.

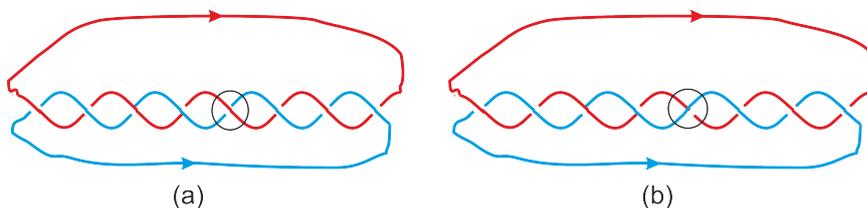


Figure 2: En (a)  $Lk = 4$ . En (b)  $Lk = 3$ .

Establecemos pues el siguiente método de cálculo del número de enlace: Proyectamos el enlace sobre un plano. Eligiendo convenientemente el plano o deformando ligeramente algún trozo de los nudos, la

<sup>2</sup>Entre dos aplicaciones inyectivas  $f_K, g_K : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$  con la misma imagen  $K$  existe siempre una isotopía del ambiente. En otras palabras, dos nudos son equivalentes independientemente de la aplicación con que se representen.

proyección tendrá un número finito de cruces. Escogemos una orientación en cada curva y asignamos un índice a cada cruce como indica la figura 3: consideramos el giro, menor o igual a  $\pi$ , que debería efectuar la rama que pasa por encima para colocarse sobre la rama que pasa por debajo, conservando las orientaciones. Si el giro es en el sentido de las agujas del reloj asignamos  $-1$  a este cruce; si es en el sentido contrario al de las agujas del reloj, le asignamos  $+1$ .



Figure 3: Asignación de un índice a cada cruce.

El número de enlace es la mitad de la suma de los índices de los cruces. Su signo depende de la orientación que hayamos asignado a los nudos. Naturalmente, es necesario demostrar que este número no depende de la proyección y que es invariante cuando se deforma el enlace sin romper los nudos. Las dos cosas son intuitivamente claras, pero engorrosas de comprobar.

Es importante tener en cuenta que dos curvas pueden tener número de enlace cero y, sin embargo, estar enlazadas, en el sentido de que no pueden separarse una de la otra. La figura 4 muestra un ejemplo.

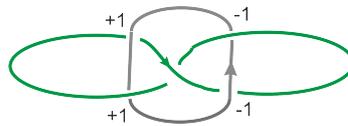


Figure 4: Enlace de Whitehead.

Carl Friedrich Gauss obtuvo la siguiente fórmula integral para el número de enlace de dos curvas diferenciales cerradas,  $C$  y  $C'$ :

$$Lk(C, C') = \frac{1}{4\pi} \oint_C \oint_{C'} \frac{(d\mathbf{x} \wedge d\mathbf{x}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} \quad (1)$$

Esta expresión aparece en un notas privadas de Gauss, escritas en 1833, pero no fue publicada hasta después de su muerte, treinta y tantos años más tarde. En la nota Gauss dice que  $Lk(C, C')$  representa *el número de vueltas que  $C$  da a  $C'$* , pero no da ninguna explicación de como ha llegado a esa expresión. Se supone que fue en el contexto de sus estudios de electromagnetismo, ya que, como le escribió Maxwell a Tait, esa integral es el trabajo realizado, sobre  $C'$ , por una carga unidad que se mueve a lo largo de  $C$ . (Ver [24]).

## La fórmula de Călugăreanu-White

El descubrimiento de la estructura en doble hélice de la molécula de ADN en 1953, despertó el interés por el número de enlace entre dos curvas del espacio. Las dos hélices se representan en matemáticas como los bordes de una estrecha cinta. Estas pueden ser muy largas y pueden ser circulares o tener los extremos

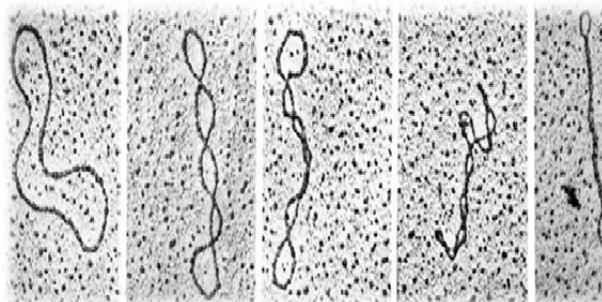


Figure 5: Moléculas de ADN circulares vistas en un microscopio electrónico

fijos en algunas proteínas u otras sustancias. Además por lo general se presentan retorcidas y enrolladas sobre sí mismas helicoidalmente (figura 5).

En 1961 el matemático rumano Gheorghe Călugăreanu en [7] dedujo una expresión del número de enlace de dos nudos como suma de dos cantidades geométricas: el *writhe* y el *twist*. Călugăreanu buscaba invariantes por isotopía de los nudos. Primero probó que, dado cualquier nudo  $K$ , definido por una aplicación continua  $f_K$ , existía una aproximación algebraica de  $f_K$  cuya imagen era un nudo equivalente a  $K$ . Esto le permitía aplicar métodos de geometría diferencial a la búsqueda de invariantes. Me parece ilustrativo resumir como Călugăreanu deduce la fórmula en [4].

Sea  $C$  un nudo sin puntos de inflexión, es decir, con curvatura distinta de cero en todos sus puntos, parametrizada por la longitud de arco. Para cada punto  $\mathbf{x}$  en  $C$ , se toma un punto  $\mathbf{x}^*$  situado en la normal principal en  $\mathbf{x}$ , a una cierta distancia  $\epsilon$  de  $\mathbf{x}$ . Sea  $C^*$  la curva que describe  $\mathbf{x}^*$  al ir variando  $\mathbf{x}$ . Se demuestra que existe un  $\epsilon_0$  tal que, para todo  $\epsilon \leq \epsilon_0$ , el número de enlace de  $C$  y  $C^*$  es siempre el mismo. Tomemos la expresión integral de Gauss de  $Lk(C, C^*)$  (ecuación (1)) y hagamos tender  $\epsilon$  a cero. El límite será pues un entero que designamos por  $L$ . Călugăreanu obtiene la expresión

$$L = \frac{1}{4\pi} \oint_C \oint_C \frac{(d\mathbf{x} \wedge d\mathbf{x}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*|^3} + \frac{1}{2\pi} \oint_C \tau(s) ds$$

donde  $\tau(s)$  indica la torsión de  $C$ . Los dos sumandos no son, en general, ni enteros ni invariantes, pero  $L$  es un entero, invariante de  $C$ .

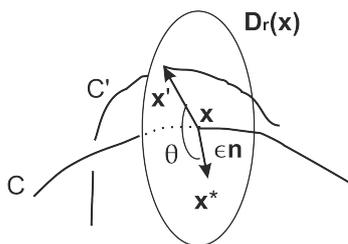


Figure 6: Construcción de las curvas  $C^*$  y  $C'$ .

Sea ahora  $C'$  una curva cerrada cualquiera que no corta a  $C$ . Designemos por  $D_r(\mathbf{x})$  un pequeño disco de radio  $r$ , ortogonal a  $C$  en el punto  $\mathbf{x}$  (figura 6). La curva  $C'$  debe cortar a  $D_r(\mathbf{x})$  en un solo punto  $\mathbf{x}'$  (se deforma en caso contrario). El número de enlace  $Lk(C, C')$  se diferenciará en un entero de  $L$ . Veamos cual es ese entero.

Sea  $\theta$  el ángulo que forma el vector  $\overrightarrow{\mathbf{x}\mathbf{x}'}$  con la normal  $\mathbf{n}$ . Como las curvas son cerradas, al recorrer  $\mathbf{x}$  la curva  $C$ ,  $\theta$  varía en un cierto número entero  $N$  de vueltas.  $N$  es precisamente la diferencia  $Lk(C, C') - L$ .

Es decir,

$$Lk(C, C') = Wr + T + N$$

donde

$$Wr = \frac{1}{4\pi} \oint_C \oint_C \frac{(d\mathbf{x} \wedge d\mathbf{x}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad T = \frac{1}{2\pi} \oint_C \tau(s) ds \quad (2)$$

$Wr$  es el *retorcimiento* o *writhe*<sup>3</sup>.  $T$  es la *torsión total* de la curva  $C$ . Tanto  $Wr$  como  $T$  dependen solo de la curva  $C$ . El *enrollamiento* o *twist* se define como  $Tw = T + N$ .

Estas fórmulas fueron generalizadas por James H. White [33] a dimensiones superiores. Actualmente la fórmula

$$Lk(C, C') = Wr + Tw \quad (3)$$

se conoce generalmente como *fórmula de White*.

Călugăreanu consideraba solo curvas sin puntos de inflexión. En 1992 Moffatt y Ricca [23] estudian qué pasa en los puntos de inflexión (con curvatura cero) y prueban que en ellos la torsión total  $T$  varía en una unidad, y el entero  $N$  también experimenta un cambio de una unidad pero de signo contrario, de forma que  $Tw$  queda invariante.

En [16] Fuller da la siguiente interpretación del writhe de una curva  $C$ . Sea  $\mathbf{T}(t)$  el vector unitario tangente a  $C$  en el punto  $\mathbf{x}(t)$ .  $\mathbf{T}(t)$  describe en la esfera unidad una curva cerrada  $C_T$ . Entonces

$$Wr = \frac{1}{2\pi} A - 1 \quad \text{módulo } 2 \quad (4)$$

donde  $A$  es el ángulo sólido encerrado por  $C_T$ , medido en estereorradianes, esto es, el área limitada por  $C_T$  sobre la esfera unidad. Por ejemplo, si  $C$  es una circunferencia el vector tangente describe el ecuador; el ángulo sólido de un hemisferio es  $2\pi$  y por tanto el writhe es 0.

En [23] Ricca y Moffatt dan la siguiente descripción del writhe. Para cada vector unitario  $\mathbf{v} \in S^2$  sea  $C_{\mathbf{v}}$  la proyección de  $C$  sobre el plano ortogonal a  $\mathbf{v}$ . Sea  $n_+(\mathbf{v})$  el número de cruces con índice +1 y  $n_-(\mathbf{v})$  el número de cruces con índice -1. El writhe es el promedio de las diferencias  $n_+(\mathbf{v}) - n_-(\mathbf{v})$  al variar  $\mathbf{v}$  en  $S^2$ :

$$Wr = \langle n_+(\mathbf{v}) - n_-(\mathbf{v}) \rangle$$

En particular, si el nudo es prácticamente plano, y solo hay una pequeña elevación en los cruces de la curva que pasa por encima, la diferencia  $n_+(\mathbf{v}) - n_-(\mathbf{v})$  es la misma para casi todos los vectores. Podemos pues calcular una buena aproximación del writhe calculando esta diferencia para una de estas proyecciones.

Como ejemplo consideremos la cinta de la figura 7(a). El borde rojo y el azul se cruzan dos veces, las dos con índice -1. El número de enlace es  $Lk = -1$ . La cinta es prácticamente plana y  $Wr \simeq -1$  puesto que su línea central<sup>4</sup> se cruza un vez con ella misma, con índice -1. Así pues, esta cinta tiene  $Tw = 0$ . La figura 7(b) representa la misma cinta pero la hemos girado de forma que la línea central sea plana. Por lo tanto  $Wr = 0$ . El número de enlace es el mismo  $Lk = -1$ . así pues  $Tw = -1$ . En este caso la torsión es  $T = 0$  y  $N = -1$ .

En general el cálculo del writhe es complicado: lo es la doble integral que lo define, y también los métodos que acabamos de ver. J. Adlinger y otros [2] y D. Cimasoni [10] han desarrollado algoritmos para el cálculo del writhe en curvas poligonales. De hecho, a menudo, de la curva no tenemos la ecuación sino solo una sucesión de puntos más o menos tupida.

<sup>3</sup>El nombre se debe a Fuller [15].

<sup>4</sup>Se suele utilizar la línea central de la cinta pero podríamos tomar cualquiera de los bordes. El resultado es claramente el mismo.

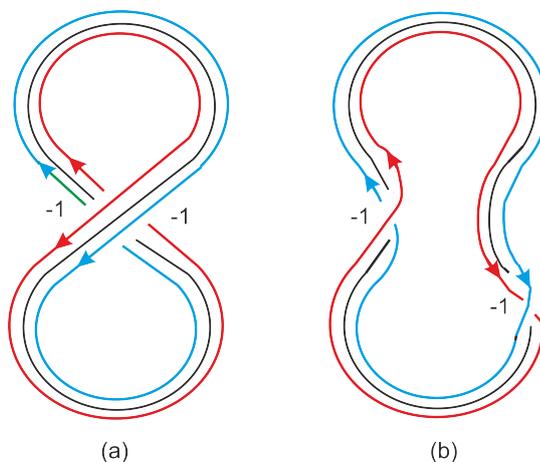


Figure 7: Las dos cintas tienen número de enlace  $Lk = -1$ . En la posición (a) la  $Wr = -1$  y  $Tw = 0$ ; si modificamos la posición a (b)  $Wr = 0$  y  $Tw = -1$ .

## 2 La topología del ADN

Una molécula típica de ADN está formada por dos cadenas que alternan un azúcar (desoxirribosa) y un fosfato. Las dos cadenas se enrollan una en la otra en doble hélice (figura 8). Cada uno de los azúcares se enlaza con una base nitrogenada. Las bases más comunes son: **T**imina, **C**itosina, **A**denina y **G**uanina, y se designan por sus iniciales. Cada terna azúcar, fosfato y base nitrogenada, se llama un *nucleótido*. Las bases de una de las cadenas se unen a las de la otra a modo de travesaños de una escalera. Ahora bien, solo se enlazan para formar un peldaño pares A-T o C-G. La doble hélice de las moléculas de ADN de casi todos los organismos es dextrógira; este sentido se toma como positivo. En estado relajado la molécula de ADN-B (la más normal) tiene 10,4 pares de bases nitrogenadas, por cada vuelta de la doble hélice.

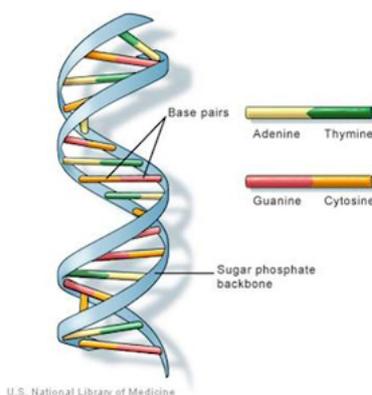


Figure 8: Estructura de la molécula de ADN.

Cada molécula de ADN puede tener millones pares de bases. Por ejemplo, el ADN humano tiene unos 3200 millones de pares, lo que significa una longitud de unos 2 metros. Todas las células con núcleo (eucariotas) tienen en su núcleo el ADN del organismo, y este contiene todos los genes de la especie. En

las células sin núcleo (procariotas) el ADN se encuentra en el citoplasma. En cualquier caso, las largas moléculas de ADN tienen que estar apretadas de forma muy compacta en un espacio muy pequeño.

El ADN guarda toda la información que determinan las características de del organismo vivo y sus funciones. Los *genes* son segmentos de ADN, unidades de almacenamiento de esas informaciones. Un gen puede contener la información, por ejemplo, para la producción de una cierta proteína (los biólogos dicen que ‘codifica’ esa proteína). Los seres vivos más desarrollados contienen muchos genes. Se estima que el ser humano contiene unos 20 000 genes.

Las moléculas de ADN se organizan dentro de cada célula en un cierto número de cúmulos bien estructurados llamados *chromosomas*. Todas las células de una misma especie tienen el mismo número de cromosomas. Una célula humana tiene 23 pares de cromosomas que contienen toda la información del individuo al que pertenecen. Todas las células contienen toda la información genética del individuo.

Entre las funciones biológicas más importantes del ADN están la transcripción y la replicación. En la *transcripción*, se copia la información contenida en un cierto gen para la producción de una determinada proteína. En la *replicación*, o *autoduplicación*, las dos cadenas de nucleótidos de una molécula de ADN se separan y cada cadena se completa para obtener sendas copias idénticas de la molécula original. Estos procesos se llevan a cabo trozo a trozo, en moléculas muy contorsionadas, empaquetadas de forma compacta en el núcleo. Si la molécula es lineal, con dos extremos libres, las cadenas pueden girar y separarse. Cuando la molécula es circular, o con extremos fijos, al separarse las cadenas un trozo, el *writhe* y el *twist* de la doble hélice (pensada como una cinta) se modifican. Si las cadenas no se rompen el número de enlace debe conservarse. En determinadas ocasiones las cadenas se rompen y reconectan variando el número de enlace.

Imaginamos la molécula de ADN como una cuerda circular formada por dos cabos enrollados. Separemos los dos cabos en un segmento de la cuerda. En el resto de la cuerda los dos cabos se enroscan uno en el otro de forma más apretada. Dependiendo de cuanto más enroscados queden los dos cabos (y del material de que está hecha la cuerda) la cuerda se enrolla a su vez sobre sí misma como indica la figura 9. El objetivo es cambiar el *writhe* para que el *twist* se mantenga en los niveles de relajación admitidos por la naturaleza de la cuerda. Estas porciones enrolladas se llaman *superenrollamientos* (*supercoiling*). Es el mismo proceso que se produce a veces con los cordones para abrir y cerrar una cortina. Lo podemos producir en una cuerda varios cabos, girando uno de los extremos mientras mantenemos el otro fijo. En el vídeo [35] este comportamiento está muy bien ilustrado.

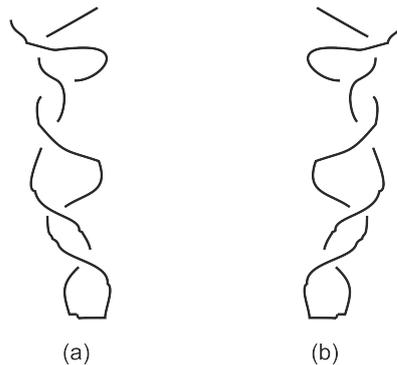


Figure 9: El superenrollamiento puede ser: (a) negativo; (b) positivo.

El fenómeno del superenrollamiento en las moléculas de ADN fue descubierto hacia 1963 por el equipo de Jérôme Vinograd. Observaron la velocidad de sedimentación de una población de un virus con ADN circular (del cáncer de la rata) en una solución y la compararon con la velocidad de sedimentación a una población del mismo virus sometida antes a la acción de una enzima que rompía una de las cadenas. En

este segundo caso, la velocidad de sedimentación era claramente inferior. El microscopio electrónico reveló (figura 5) que los moléculas de la primera población estaba muy contorsionadas, cosa que no ocurría con las de la segunda población. Estas zonas contorsionadas es lo que hoy se conoce como superenrollamientos. (Ver [32]). El superenrollamiento permite un acceso más fácil a un segmento de la cadena y también que el ADN pueda adquirir una forma muy compacta en el interior de las células.

El superenrollamiento puede hacerse en dos sentido (figura 9). En el caso (a) writhe disminuye y por tanto el twist aumenta; en (b) el writhe aumenta y la torsión de la molécula se relaja. En excelente vídeo [36] estos comportamientos están muy bien ilustrados.

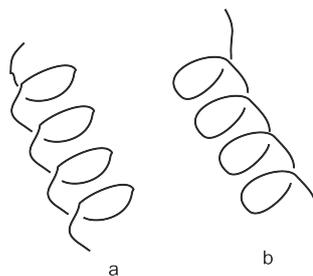


Figure 10: Superenrollamientos toroidales: (a) positivo; (b) negativo.

Los superenrollamientos helicoidales de la figura 9 se llaman *plectonémicos* y son los más comunes, pero no son los únicos. Otro tipo muy importante es el superenrollamiento *toroidal*, *espiral* o *solenoidal* (figura 10). En este caso la molécula se enrolla en espiral, dando vueltas alrededor de una proteína, por ejemplo. Lo puede hacer también en uno u otro sentido: provocando un aumento o disminución del twist.

Las moléculas de ADN en estado relajado tienen normalmente 10,4 pares de bases por vuelta. Por lo tanto el número de enlace es el número de pares de bases dividido 10,4. Este número se suele designar por  $Lk^0$ . Si al formarse un superenrollamiento el twist no varía, necesariamente habrá un cambio del número de enlace. La *diferencia de número de enlace* se designa por

$$\Delta Lk = Lk^0 - Lk$$

Las *topoisomeras* son enzimas capaces de cambiar el número de enlace de una molécula de ADN. Existen dos tipos. El Tipo I rompe una de las cadenas, la pasa al otro lado de la otra cadena y la reconecta. Esto varía el número de enlace en una unidad; +1 o -1 según el sentido. El tipo II rompe las dos cadenas y las pasa al otro lado de la doble hélice. El número de enlace cambia en dos unidades.

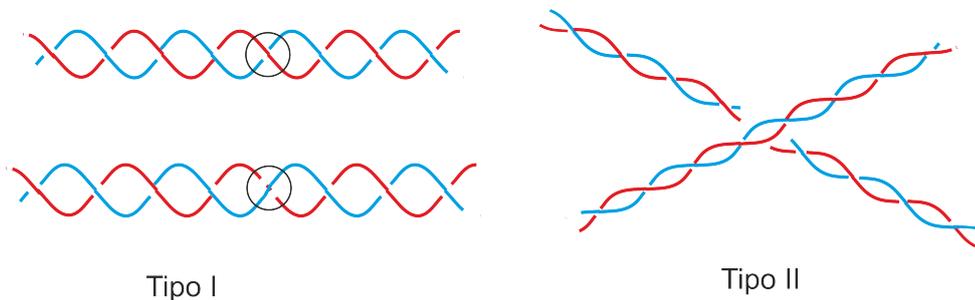


Figure 11: El tipo I rompe un enlace azúcar-fosfato y pasa esa cadena al otro lado de la otra cadena de la doble hélice. El Tipo II rompe las dos cadenas de la doble hélice y pasa esa rama al otro lado.

A lo largo de algunas moléculas de ADN se distribuyen una serie de *nucleosomas* a manera de cuentas de un collar. Los *nucleosomas* son unidades básicas de repetición de la *cromatina*, una estructura compleja compuesta de ADN, con unos 150 pares de bases, enrollada en proteínas. Para entender la contribución de cada nucleosoma al número de enlace de la molécula, F. Brock Fuller en [16] ideó una manera de relacionarlo con el número de enlace de una molécula de referencia, simplificación de la molécula original.

Supongamos una molécula cerrada de ADN dividida en dos trozos que designamos por  $\alpha$  y  $\gamma$ . Designamos toda la molécula por  $\alpha + \gamma$ . Supongamos que  $\beta + \gamma$  es otra molécula que coincide con la anterior en el trozo  $\gamma$  (figura 12).

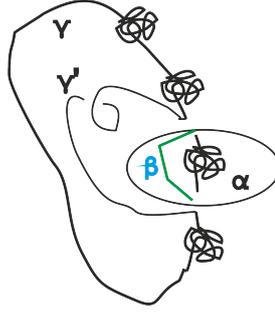


Figure 12: Sustitución de un nucleosoma por un trozo de referencia  $\beta$ . Se han dibujado solo los ejes centrales.

Definimos

$$\delta Lk(\alpha, \beta; \gamma) = Lk(\beta + \gamma) - Lk(\alpha + \gamma)$$

Sea  $\gamma'$  otra posibilidad de completar de  $\alpha$  y  $\beta$ . Fuller demuestra que

$$\delta Lk(\alpha, \beta; \gamma) - \delta Lk(\alpha, \beta; \gamma') = 2Lk(b - a, c' - c) \quad (5)$$

donde  $a, b, c, c'$  son los ejes centrales de las moléculas  $\alpha, \beta, \gamma$  y  $\gamma'$  (de las moléculas, no de las cintas).

Sea  $\alpha + \gamma$  una molécula cerrada de ADN, donde  $\alpha$  es un trozo misterioso, un nucleosoma por ejemplo. Sustituyamos  $\alpha$  por un trozo (no misterioso)  $\beta$  de forma que  $\alpha$  y  $\beta$  estén en una bola que no contiene a  $\gamma$  (ver figura 12). Sea  $\gamma'$  otro trozo de ADN que se puede unir con  $\alpha$  y  $\beta$  y que está fuera de la bola que contiene  $\alpha$  y  $\beta$ . En este caso,  $Lk(b - a, c' - c) = 0$  y la ecuación (5) nos dice que

$$\delta Lk(\alpha, \beta; \gamma) = \delta Lk(\alpha, \beta; \gamma')$$

Es decir, el valor de  $\delta Lk(\alpha, \beta; \gamma')$  no depende del trozo exterior  $\gamma'$ . Lo vamos a indicar por  $\delta Lk(\mathcal{N})$ . Por la definición de  $\delta Lk$

$$Lk(\alpha + \gamma) = Lk(\beta + \gamma) + \delta Lk(\mathcal{N})$$

$\alpha + \gamma$  es la molécula original y  $\beta + \gamma$  la molécula de referencia.

Si a lo largo de la molécula circular de ADN hay  $k$  nucleosomas, podemos sustituir cada uno de ellos por un trozo de ADN en estado relajado. Obtenemos así una molécula de referencia manejable que está relacionada con la original por la fórmula

$$Lk(\text{molécula original}) = Lk(\text{molécula de referencia}) + k \delta Lk(\mathcal{N})$$

### 3 Helicidad

Se llama *helicidad* a una serie de magnitudes de la dinámica de fluidos y de la magnetohidrodinámica (MHD) <sup>5</sup>. Todos estos invariantes están determinados por la topología de las líneas de vorticidad (los torbellinos) en el caso de la hidrodinámica, o con la topología de las líneas magnéticas en el caso de la magnetohidrodinámica. El nombre de helicidad se debe a H. K. Moffatt [20] que fue quien descubrió esta relación con la topología.

La importancia de la helicidad estriba en varias razones, entre ellas: (1) la helicidad acota inferiormente la energía a la que puede relajarse un sistema (energía magnética o de la vorticidad según el caso); (2) la helicidad se conserva mejor que la energía. Esto es, la tasa de disipación de la helicidad es de una escala mucho menor a la escala en que se disipa la energía magnética; (3) la helicidad tiene la propiedad de quiralidad: cambia de signo por simetrías especulares. Esta propiedad no la posee la energía, y resulta esencial en la teoría de dínamo, por ejemplo, y en otras aplicaciones. Pero también implica que la helicidad pueda ser cero sin que la topología de las líneas sea trivial.

#### Definiciones de helicidad

Sea  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  el campo de velocidades de un fluido. Se llama *vorticidad* al rotacional de la velocidad

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \wedge \mathbf{u}$$

En coordenadas cartesianas, si  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ , el rotacional es

$$\boldsymbol{\omega} = \left( \frac{\partial u_3}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_3}, \frac{\partial u_1}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_1}, \frac{\partial u_2}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right)$$

La vorticidad expresa la tendencia a rotar del campo  $\mathbf{u}$  en cada punto. En el caso de un movimiento helicoidal  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \boldsymbol{\Omega}_0 \wedge \mathbf{x}$ , la vorticidad es el doble de la velocidad angular:  $\boldsymbol{\omega} = 2\boldsymbol{\Omega}_0$  <sup>6</sup> En el estudio de las propiedades dinámicas de un fluido, la vorticidad juega un papel muy importante y, a menudo, resulta más útil que la propia velocidad para estudiar el comportamiento del fluido.

Consideremos en un volumen  $V$  un fluido ideal (no viscoso e incompresible) que se mueve sometido a fuerzas conservativas. Suponemos que el borde  $V$ ,  $\partial V = S$  es una superficie de vorticidad, esto es, que  $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} = 0$ , donde  $\mathbf{n}$  es un vector unitario ortogonal a  $S$ . J. Moreau y H. K. Moffatt demostraron independientemente que la integral

$$\mathcal{H} = \int_V \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega} dV \quad (6)$$

es un invariante de las ecuaciones de Navier-Stokes. Moffatt le dio el nombre de *helicidad* por su similitud con la helicidad que se define en Física de Partículas donde indica el producto del momento por el spin de la partícula. El escalar  $\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}$  se denomina *densidad de helicidad* y es una magnitud muy utilizada en el estudio de los fluidos turbulentos.

<sup>5</sup>La magnetohidrodinámica es la rama de la Física que se ocupa de la dinámica de fluidos conductores de electricidad, en presencia de campos eléctricos y magnéticos.

<sup>6</sup>Se demuestra utilizando la identidad

$$\nabla \wedge (\mathbf{F} \wedge \mathbf{G}) = \mathbf{F}(\nabla \cdot \mathbf{G}) - \mathbf{G}(\nabla \cdot \mathbf{F}) + (\mathbf{G} \cdot \nabla)\mathbf{F} - (\mathbf{F} \cdot \nabla)\mathbf{G}$$

donde  $(\mathbf{F} \cdot \nabla)\mathbf{G} = (\mathbf{F} \cdot (\nabla G_1), \mathbf{F} \cdot (\nabla G_2), \mathbf{F} \cdot (\nabla G_3))$ . Para  $\mathbf{F} = \boldsymbol{\Omega}_0$  y  $\mathbf{G} = \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ , se tiene  $\nabla \cdot \mathbf{x} = 3$ ,  $\nabla x_1 = (1, 0, 0)$ ,  $\nabla x_2 = (0, 1, 0)$ ,  $\nabla x_3 = (0, 0, 1)$ . Por tanto,

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \wedge (\boldsymbol{\Omega}_0 \wedge \mathbf{x}) = \boldsymbol{\Omega}_0(\nabla \cdot \mathbf{x}) - 0 + 0 - \boldsymbol{\Omega}_0 = 3\boldsymbol{\Omega}_0 - \boldsymbol{\Omega}_0 = 2\boldsymbol{\Omega}_0$$

El nombre de *vorticidad* se debe al físico británico Horace Lamb 1916.

Suponemos siempre que  $V \subset \mathbb{R}^3$  es una 3-variedad compacta simplemente conexa (o todo  $\mathbb{R}^3$ ). Informalmente, una 3-variedad es un sólido de dimensión tres<sup>7</sup>. Simplemente conexo significa que no tiene agujeros que lo atraviesen, como por ejemplo pasa con un donut (o *toro sólido* en lenguaje matemático).

Sea ahora  $\mathbf{B}$  un campo magnético en un fluido incompresible, conductor perfecto y sin viscosidad (MHD ideal) definido en un volumen  $V$ . Suponemos que el borde de  $V$ :  $S = \partial V$  es una superficie magnética, es decir, que  $\mathbf{B}$  es tangente a  $S$ :  $\mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = 0$ , donde, como es habitual,  $\mathbf{n}$  es el vector unitario ortogonal a  $S$  y dirección hacia el exterior. Si  $V = \mathbb{R}^3$  se pide que cuando el punto  $\mathbf{x}$  se aleja, la magnitud del campo campo tienda a cero rápidamente (del orden  $O(|\mathbf{x}|^{-3})$ ).

Sea  $\mathbf{A}$  un campo potencial de  $\mathbf{B}$ :  $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$ . Se llama *helicidad magnética* de  $\mathbf{B}$  en  $V$  a la integral

$$\mathcal{H}_M = \int_V \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} dV \quad (7)$$

Se dice que  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$  es la *densidad de helicidad magnética* en cada punto. L. Woltjer [31] y H.K. Moffatt [20] demostraron de forma independiente la invarianza de  $\mathcal{H}_M$ .

En principio la helicidad depende del potencial tomado y este no está unívocamente determinado. En particular, todos los campos del tipo  $\mathbf{A} + \nabla\phi$  son campos potenciales de  $\mathbf{B}$ . Cuando el dominio  $V$  es simplemente conexo (sin agujeros) estos son los únicos campos potenciales y todos ellos dan lugar a la misma helicidad ya que

$$\int_V \mathbf{B} \cdot \nabla\phi dV = \int_{\partial V} \mathbf{n} \cdot \mathbf{B} dS = 0$$

Esta propiedad se conoce como *invariancia gauge*. Si imponemos además que  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , la Ley de Biot-Savart nos dice que

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) == \frac{1}{4\pi} \int \frac{\mathbf{B}(\mathbf{x}') \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} dV'$$

En este caso se obtiene

$$\mathcal{H}_M = \frac{1}{4\pi} \int_V \int_{V'} (\mathbf{B}(\mathbf{x}) \wedge \mathbf{B}(\mathbf{x}')) \cdot \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} dV' dV \quad (8)$$

Si comparamos con la definición integral de Gauss (1) del número de enlace, no parece extraño que  $\mathcal{H}_M$  esté relacionada con los números de enlace de las líneas del campo  $\mathbf{B}$ , como comentaremos más adelante. ([24]).

Woltjer [31] demostró también la invariancia (en MHD ideal) de la integral del producto  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{B}$ , que en realidad depende solo de la vorticidad, no de la velocidad, y del campo magnético puesto que ([20])

$$\mathcal{H}_c = \int_V \mathbf{u} \cdot \mathbf{B} dV = \int_V \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{B} dV$$

$\mathcal{H}_c$  se denomina *helicidad cruzada* (*cross helicity*) y está relacionada con la conservación del flujo de vorticidad a través de una superficie limitada por una línea cerrada del campo  $\mathbf{B}$  [22].

---

<sup>7</sup>En matemáticas una *3-variedad* se define con la condición de que cada punto tenga un entorno homeomorfo a una esfera o a una semiesfera cerrada. Los segundos constituyen una superficie llamada *borde* de la variedad

## Sobre la invariancia de la helicidad

Los antecedentes del teorema de invariancia de la helicidad de fluidos se encuentran en los trabajos de Hermann von Helmholtz (1858) y Lord Kelvin (1869). En las condiciones que hemos impuesto, llamadas a veces condiciones de Kelvin, las líneas de vorticidad (los *torbellinos*) se mueven con el fluido como si fueran “líneas materiales”. El flujo de la vorticidad a través de cualquier elemento de superficie es siempre el mismo al variar  $S$  con el fluido (figura 13). Se dice entonces que las líneas están *congeladas en el fluido*. Esta propiedad es una consecuencia de la *ecuación de la vorticidad*

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} = \nabla \wedge (\mathbf{u} \wedge \boldsymbol{\omega}) \quad (9)$$

Kelvin observó además que los enlaces y los nudos de las líneas de torbellinos persisten en el tiempo (mientras el campo se conservara diferenciable).

En el caso de la helicidad magnética, la demostración de la invarianza se basa en una ecuación similar a la (9):

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \wedge (\mathbf{u} \wedge \mathbf{B}) \quad (10)$$

que es la *ecuación de inducción* del campo magnético en un fluido incompresible, conductor perfecto y con viscosidad cero (MHD ideal). Alfvén había demostrado en 1943 que estos campos están *congelados en el fluido*, esto es que sus líneas de campo se comportan como si se movieran con el fluido. El motivo es que la ecuación de inducción (10), junto con el teorema de Stokes, permiten probar que el flujo del campo a través de cualquier superficie  $S$  no cambia cuando la superficie se mueve con el fluido

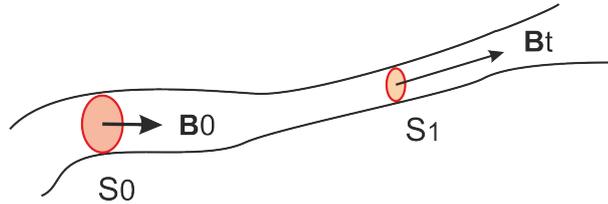


Figure 13: Disminuyendo el área de la superficie, en el límite, el tubo que describe  $S$  es una línea de campo.

## Interpretación topológica

La vorticidad es un campo *solenoidal*, esto es, con divergencia cero:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\omega} = \nabla \cdot (\nabla \wedge \mathbf{u}) = 0$$

Los campos magnéticos también son campos solenoidales. En general, para cualquier campo solenoidal  $\boldsymbol{\xi}$  existe un campo potencial (al menos)  $\mathbf{A}$ :  $\boldsymbol{\xi} = \nabla \wedge \mathbf{A}$ . Así pues, podemos generalizar la definición de *helicidad* a cualquier campo solenoidal  $\boldsymbol{\xi}$ :

$$\mathcal{H}_{\boldsymbol{\xi}} = \int_V \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{A} dV$$

$\mathcal{H}_{\boldsymbol{\xi}}$  depende del potencial pero, como en el caso de los campos magnéticos, todos los campos potenciales de la forma  $\mathbf{A} + \nabla \phi$  dan lugar a la misma helicidad, es decir,  $\mathcal{H}_{\boldsymbol{\xi}}$  es invariante ‘gauge’. Si  $V$  es simplemente conexo estos son los únicos campos potenciales de  $\mathbf{B}$ . En general,  $\mathcal{H}_{\boldsymbol{\xi}}$  no es invariante, como lo es en el caso de fluidos y MHD ideales. Sin embargo, su significado topológico sí es común en todos los casos. Vamos a unificar pues la explicación y suponer que tenemos un campo solenoidal  $\boldsymbol{\xi}$ .

Las líneas de campo de un campo solenoidal son siempre cerradas, o van de infinito a infinito, o a veces se enrollan sobre sí mismas indefinidamente llenando densamente una superficie. Consideremos primero un caso muy simple: suponemos que el campo es cero fuera de dos tubos cerrados con ejes  $C_1, C_2$ , que sean circunferencias o equivalentes a circunferencias. Suponemos que las líneas de campo discurren uniformemente paralelas al eje del tubo. El flujo en cada uno de ellos es:

$$\Phi_i = \int_{S_i} \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} dS = \oint_{C_i} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}, \quad i = 1, 2$$

En este caso, la helicidad se puede calcular directamente de la definición [20]:

$$\mathcal{H}_\xi = \Phi_1 \oint_{C_1} \mathbf{A} d\mathbf{x} + \Phi_2 \oint_{C_2} \mathbf{A} d\mathbf{x} = \pm 2\Phi_1 \Phi_2$$

donde el signo depende del sentido en que discurren las líneas de campo.

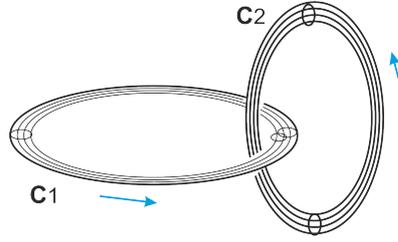


Figure 14: Si la dirección del campo es la de las flechas azules, la helicidad resulta ser  $+2\Phi_1\Phi_2$

Si el número de enlace de  $C_1, C_2$  es  $k$  se obtiene

$$\mathcal{H}_M = 2k\Phi_1\Phi_2 \quad (11)$$

Construimos ahora un campo definido en un tubo cuyo eje es un nudo cerrado  $K$  arbitrario. Lo hacemos de la siguiente forma (ver [21]): Partimos de un tubo circular plano  $T_0$  y en él un campo  $\xi_0$  cuyas líneas son circunferencias planas paralelas al eje  $C_0$  de  $T_0$ . La helicidad de este campo es cero.

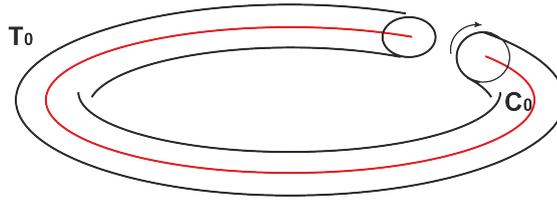


Figure 15: Las líneas del campo dentro de  $T_0$  son concéntricas con su eje  $C_0$ , por lo que la helicidad es cero.

Designamos por  $\Phi$  el flujo en el tubo. Cortamos el tubo perpendicularmente, giramos uno de los extremos  $n_0$  vueltas completas y volvemos a unir. Las líneas de campo en  $T_0$  siguen siendo circunferencias cerradas que ahora se enrollan  $n_0$  veces en el eje  $C_0$ . Para calcular su helicidad podemos aplicar (11) a cada 'filamento' de  $T_0$  con elemento de flujo  $d\phi$ , que se enrolla en un tubo central con flujo  $\phi$ : su helicidad es  $2n_0\phi d\phi$ . Por tanto la helicidad total es

$$\mathcal{H}_0 = \int_0^\Phi 2n_0\phi d\phi = n_0\Phi^2$$

Queremos además que el tubo de flujo no sea circular sino el nudo  $K$ . Aplanemos  $K$ , es decir tomemos un nudo equivalente contenido en un plano salvo en un número finito de puntos en los que una rama pasa por encima de la otra. Asignamos índices  $\pm 1$  a los cruces de la forma habitual (figura 3). Se trata ahora de mover el tubo de flujo  $T_0$  que hemos construido de forma que su eje  $C_0$  se ‘superponga’ a  $K$ , salvo en los autocruces donde la rama que pasa por encima es probable que sea diferente; llamemos  $K_0$  a la deformación de  $C_0$  (que sigue siendo un nudo trivial) (figura 16).

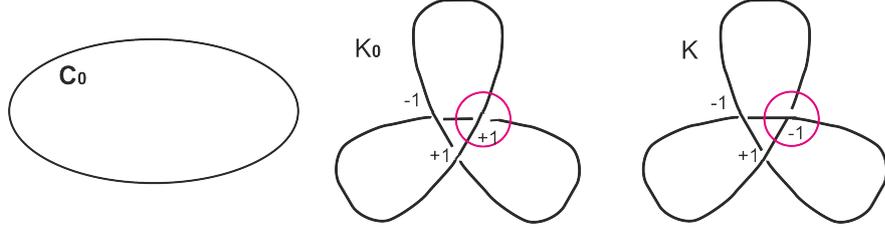


Figure 16:  $C_0$  se deforma en  $K_0$ . Para que  $K_0$  sea equivalente al nudo  $K$  es necesario invertir el cruce marcado con un círculo rojo.

Dos cuestiones importan: (i) como hacer la deformación del campo  $\xi_0$  sin cambiar la helicidad; y (ii) como invertir los cruces para que la rama que pasa por encima pase por debajo. Para mover el campo utilizamos un campo de velocidades  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  de forma que se cumpla la ecuación (10):

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \nabla \wedge (\mathbf{u} \wedge \xi) \quad (12)$$

$\xi$  estará congelado en el fluido y su helicidad no variará. Se trata de escoger una velocidad  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  que lleve el tubo de eje  $C_0$  al tubo de eje  $K_0$ .

Para invertir los cruces se inserta un pequeño tubo circular en la rama superior del cruce, por el que circule un flujo  $\Phi$  en sentido conveniente (ver figura 17).



Figure 17: Representación esquemática del mecanismo en el caso de la figura 16. Solo están dibujados los ejes de los tubos de flujo.

Esto origina un campo  $\xi$  en un tubo  $T$  con eje  $K$  cuya helicidad ha cambiado con arreglo a (11) en  $-2\Phi^2$  si pasamos de un cruce de índice  $-1$  a uno de índice  $+1$ , y en  $+2\Phi^2$  si se pasa de un cruce de índice  $+1$  a uno de índice  $-1$ . Sean  $N_-, N_+$  el número de cruces de uno u otro tipo. La helicidad del campo  $\xi$  obtenido es pues

$$\mathcal{H}_\xi = (n_0 + 2(N_+ - N_-)) \Phi^2$$

Observemos que todos los pares de líneas tienen por construcción el mismo número de enlace  $L$ . Es fácil ver ([23]) que  $L = n_0 + 2(N_+ - N_-)$ .

Desde un punto de vista formal, el papel que juegan en la helicidad del tubo  $T$  anudado el writhe y el twist es el siguiente (ver [23]): Si expresamos  $\xi$  como suma,  $\xi = \xi_a + \xi_m$ , de un campo  $\xi_a$  paralelo al eje de  $T$  y un campo  $\xi_m$  perpendicular a dicho eje. Tomamos vectores potenciales  $\mathbf{A}_a$  y  $\mathbf{A}_m$  de estos

campos. La helicidad de  $\xi$  es

$$\mathcal{H} = \int_T (\xi_a + \xi_m) \cdot (\mathbf{A}_a + \mathbf{A}_m) dV = \int_T \xi_a \cdot \mathbf{A}_a dV + 2 \int_T \xi_m \cdot \mathbf{A}_a dV$$

El primer sumando resulta ser

$$\mathcal{H}_a = \int_T \xi_a \cdot \mathbf{A}_a dV = \frac{1}{4\pi} \Phi^2 \oint_{J_K} \oint_{J_K} \frac{(d\mathbf{x} \wedge d\mathbf{x}') \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^3} = Wr \Phi^2$$

donde  $Wr$  es el writhing del eje  $K$  del tubo  $T$ . El segundo sumando resulta ser

$$\mathcal{H}_m = (\mathcal{T} + N) \Phi^2 = Tw \Phi^2$$

Aquí  $\mathcal{T}$  es la torsión total del eje  $K$  y  $N$  es el número de giros de las líneas de campo en el plano perpendicular a eje.

Si suponemos que el campo está definido en un volumen dividido en una familia de finísimos tubos de flujo, la helicidad total resulta de la helicidad interna en cada uno de los tubos y la externa de los enlaces o nudos de los tubos.

Para el caso de líneas no cerradas de un campo solenoidal  $\xi$  en una 3-variedad simplemente conexa  $V$  Arnold [?] (1974) define un *número de enlace asintótico* cuyo promedio coincide con la helicidad del campo. De forma muy esquemática la definición funciona de la siguiente forma ([4]):

Consideremos un par de líneas de campo  $\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t)$ . Sean  $T_1, T_2$  reales muy grandes. Cerramos la trayectoria  $\mathbf{x}_1(t)$  entre los puntos  $\mathbf{x}_1(0)$  y  $\mathbf{x}_1(T_1)$  uniéndolos por un ‘camino corto’  $\Delta(\mathbf{x}_1(0), \mathbf{x}_1(T_1))$  para obtener una curva cerrada  $\Gamma_1 = \Gamma_1(T_1)$ . De la misma manera, cerramos  $\mathbf{x}_2$  entre  $\mathbf{x}_2(0)$  y  $\mathbf{x}_2(T_2)$  con un ‘camino corto’ para obtener una curva cerrada  $\Gamma_2 = \Gamma_2(T_2)$ .

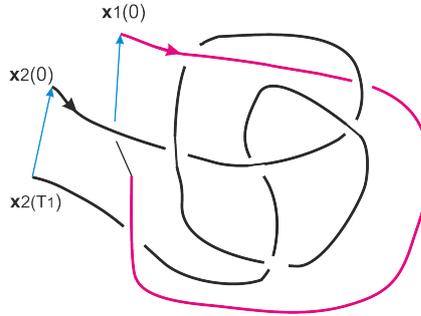


Figure 18: ‘Caminos cortos’ que cierran largos trozos de trayectorias.

Arnold define el *número de enlace asintótico* de las líneas de campo  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  como el límite

$$Lk_a(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \lim_{T_1, T_2 \rightarrow \infty} \frac{Lk(\Gamma_1, \Gamma_2)}{T_1 \cdot T_2}$$

Naturalmente, hay que haber escogido primero un sistema de caminos  $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  entre pares de puntos  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  de forma que las curvas cerradas  $\Gamma_1, \Gamma_2$  no se corten, o al menos no se corten ‘casi nunca’. Arnold prueba que esta elección es posible, que el límite existe y que el número de enlace asintótico no depende del sistema de caminos cortos escogidos. Por último demuestra que la helicidad en un dominio simplemente conexo es igual a la integral

$$\mathcal{H}_\xi = \int_V \int_V Lk_a(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) dV dV$$

A  $\mathcal{H}_\xi$  se le llama también *invariante de Hopf asintótico* porque generaliza el invariante de Hopf clásico <sup>8</sup> ([4]). El clásico es siempre un entero, el asintótico puede ser cualquier real.

## Energía magnética y helicidad

La *energía de un campo*  $\xi$  es, por definición, la integral

$$M(\xi)(t) = \frac{1}{2} \int_V \xi \cdot \xi dVM$$

Es un hecho que la topología de las líneas de  $\xi$  es mucho más estable que su energía, que puede convertirse en otro tipo de energía (cinética térmica,...). En cambio las líneas del campo, como no se cortan ni intersectan, conservan sus enlaces y nudos, y con ellos la helicidad. Naturalmente, todo esto en condiciones ideales (lo que en la práctica duran muy poco).

Woltjer utilizó la invariancia de helicidad de un campo magnético  $\mathbf{B}$  para demostrar que el estado con mínima energía magnética que se puede alcanzar en un sistema cerrado cumple  $\nabla \wedge \mathbf{B} = \alpha \mathbf{B}$ , donde  $\alpha$  es una constante. Los campos que cumplen esta condición se llaman *force-free*, y son campos en los que la fuerza de Lorentz se anula. Es pues lógico que los campos finales del proceso de relajación sean force-free.

En presencia de turbulencia, la topología del campo varía constantemente; las líneas de fuerza se rompen y se vuelven a reconectar rápidamente. Sin embargo en 1974 Taylor [28, 29] observó que, en un plasma turbulento con baja resistividad, el estado de equilibrio final del campo magnético es un campo force-free que se podía predecir teóricamente suponiendo que la helicidad global se conserva. Así conjeturó que la helicidad total se mantiene casi invariante, decae a una escala muy inferior a como lo hace la energía y las posibles helicidades parciales en subdominios interiores. Aunque todo parecía corroborarla la *conjetura de Taylor*, no se ha logrado demostrar hasta 2018 por D. Faraco y S. Lindberg [12].

Por su parte, en 1974 Arnold ([?, 4]) demostró que la helicidad de un campo solenoidal  $\xi$  establece una cota inferior de la energía del campo

$$M(\xi) \geq C \cdot |\mathcal{H}(\xi)| \tag{13}$$

donde  $C$  es una constante positiva que depende de la forma y tamaño del dominio  $V$ . La desigualdad solo establece una cota a la energía cuando la helicidad no es cero. Sin embargo, en 1988 Freedman [14] probó un resultado más restrictivo: aunque la helicidad global sea cero, si la topología del campo no es trivial, la energía está acotada inferiormente.

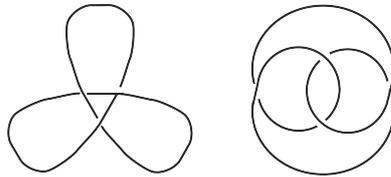


Figure 19: Dos realizaciones del nudo de trébol.

Una manera gráfica de explicar la acotación (13) de Arnold es la siguiente ([21]). Consideremos un tubo de flujo  $\Phi$  con la forma del nudo de trébol en la izquierda de la figura 19. Si se conserva el volumen y el flujo, al disminuir la energía el tubo se engorda y se acorta, aumenta el área de la sección y disminuye

<sup>8</sup>El invariante de Hopf clásico es un entero asociado a aplicaciones continuas  $f : S^3 \rightarrow S^2$  y coincide con el número de enlace de las antiimágenes de los puntos de  $S^2$ .

la longitud. Pero esto tiene un límite: como el tubo tiene la forma del nudo de trébol llega un momento en que las paredes del tubo entran en contacto y la sección no puede seguir aumentando ni la energía disminuyendo. Si el tubo inicialmente tiene otra representación del nudo de trébol, por ejemplo la de la derecha de la figura 19, la energía mínima que se alcanza es distinta.

En [25, 26] Renzo Ricca estudia otras acotaciones con vistas a su aplicación en astrofísica.

## Dominios abiertos y dominios multiconexos

Hasta ahora hemos supuesto que el campo estaba definido en un volumen simplemente conexo compacto (cerrado por una superficie borde) o en todo el espacio. Esto asegura la invariancia temporal y la invariancia ‘gauge’ de la helicidad. Sin embargo, tanto en astrofísica como en plasmas confinados, el dominio que interesa examinar no es siempre simplemente conexo, o bien no es cerrado, o las dos cosas.

Para el caso en que el dominio sea toroidal, usual en física de plasmas confinados, M.K.Bevir y J.W. Gray [6] propusieron tomar la helicidad como

$$\mathcal{H} = \int_V \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} - \oint_{\gamma_1} \mathbf{A} \cdot \mathbf{t}_1 - \oint_{\gamma_2} \mathbf{A} \cdot \mathbf{t}_2$$

donde  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  son caminos cerrados en la superficie del toro, que rodean el agujero central del toro y su sección (figura 20), y  $\mathbf{t}_1$  y  $\mathbf{t}_2$  son los vectores tangentes a esos caminos.

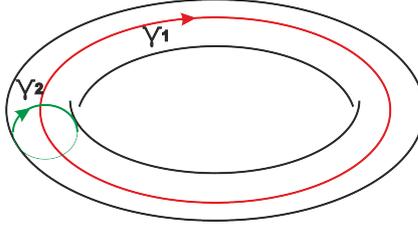


Figure 20: Caminos  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  en la superficie del toro.

En [8, 9] Cantarella y otros, optaron por no modificar la definición de la helicidad sino escoger un vector potencial *Biot-Savart*:

$$BS(\mathbf{B}) = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{B}(y) \wedge \frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} dy$$

En [19] D. MacTaggart y A. Valli comparan estas dos soluciones y unifican su tratamiento.

Más problemático resulta cuando el volumen es abierto y, por tanto las líneas magnéticas salen fuera de él. M. A. Berger y G.B. Field en [5], se inspiraron en un trabajo de Fuller [16] que ya hemos mencionado al hablar de los nucleosomas del ADN, y definieron una ‘helicidad relativa’ invariante temporal y gauge de un subdominio simplemente conexo del dominio  $V$  en que está definida la helicidad total. La idea es la misma, sustituir el campo en el trozo por un campo de referencia conveniente. El método está basado en el siguiente resultado.

Sea  $\mathbf{B}_1$  un campo definido en un volumen  $V$ , cuyo borde es una superficie magnética  $\partial V$ , dividido en dos dominios simplemente conexos,  $V_a$  y  $V_b$ , por una superficie  $S$  (figura 20). El campo  $\mathbf{B}_1$  en  $V$  determina campos  $\mathbf{B}_{1a}$  y  $\mathbf{B}_b$  en  $V_a$  y  $V_b$  respectivamente. Ecribiremos entonces  $\mathbf{B}_1 = (\mathbf{B}_{1a}, \mathbf{B}_b)$ . En los puntos de  $S$  se cumple  $\mathbf{B}_{1a} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{B}_b \cdot \mathbf{n}$ , donde  $\mathbf{n}$  es un vector unitario perpendicular a  $S$ .

Sea  $\mathbf{B}_2 = (\mathbf{B}_{2a}, \mathbf{B}_b)$  otro campo definido en  $V = V_a \cup V_b$  que coincide con  $\mathbf{B}_1$  en los puntos de  $V_b$ . Berger y Field demuestran que la diferencia entre las helicidades de estos dos campos

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{B}_1) - \mathcal{H}(\mathbf{B}_2)$$

no depende de  $\mathbf{B}_b$ . Es decir, que si sustituimos  $\mathbf{B}_b$  por cualquier otro campo  $\mathbf{B}'_b$  en  $V_b$ , que cumpla las condiciones de borde  $\mathbf{B}_{1a} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{B}'_b \cdot \mathbf{n}$ , se tiene

$$\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{B}_{1a}, \mathbf{B}_b) - \mathcal{H}(\mathbf{B}_{2a}, \mathbf{B}_b) = \mathcal{H}(\mathbf{B}_{1a}, \mathbf{B}'_b) - \mathcal{H}(\mathbf{B}_{2a}, \mathbf{B}'_b)$$

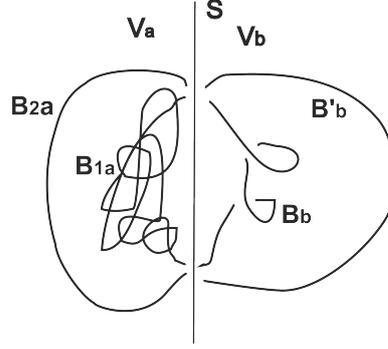


Figure 21: La diferencias de helicidad entre los campos  $\mathbf{B}_1 = (\mathbf{B}_{1a}, \mathbf{B}_b)$  y  $\mathbf{B}_2 = (\mathbf{B}_{2a}, \mathbf{B}_b)$  coincide con la diferencia entre los campos  $\mathbf{B}_1 = (\mathbf{B}_{1a}, \mathbf{B}'_b)$  y  $\mathbf{B}_2 = (\mathbf{B}_{2a}, \mathbf{B}'_b)$

Supongamos que queremos estudiar la contribución del campo en  $V_a$  a la helicidad total. Dicho así no tiene sentido, no existe una helicidad en  $V_a$ . Lo que se hace es comparar la contribución de  $\mathbf{B}_a$  a la contribución de otro campo de referencia. Berger y Field proponen tomar el *campo potencial*  $\mathbf{P}_a$ . Este campo cumple  $\nabla \wedge \mathbf{P}_a = 0$ , y está completamente determinado por las condiciones de borde  $\mathbf{B}_a \cdot \mathbf{n} = \mathbf{P}_a \cdot \mathbf{n}$ . El resultado anterior nos dice que la diferencia

$$\mathcal{H}_R(V_a) = \mathcal{H}(\mathbf{B}_a, \mathbf{B}_b) - \mathcal{H}(\mathbf{P}_a, \mathbf{B}_b)$$

no depende de  $\mathbf{B}_b$ . Berger y Field la llaman *helicidad relativa* a  $\mathcal{H}_R(V_a)$ .

Podemos definir de manera análoga  $\mathcal{H}_R(V_b)$ . Tenemos

$$\mathcal{H}_R(V_b) = \mathcal{H}(\mathbf{B}_a, \mathbf{B}_b) - \mathcal{H}(\mathbf{B}_a, \mathbf{P}_b) = \mathcal{H}(\mathbf{P}_a, \mathbf{B}_b) - \mathcal{H}(\mathbf{P}_a, \mathbf{P}_b)$$

Como la diferencia no depende del campo en  $V_a$  hemos sustituido en la última expresión  $\mathbf{B}_a$  por  $\mathbf{P}_a$ . Obtenemos así

$$\mathcal{H}(\mathbf{B}) = \mathcal{H}(\mathbf{B}_a, \mathbf{B}_b) = \mathcal{H}_R(V_a) + \mathcal{H}_R(V_b) + \mathcal{H}(\mathbf{P}_a, \mathbf{P}_b)$$

Este resultado puede generalizarse al caso en que  $V$  esté dividido en varios  $V_i$  simplemente conexos:

$$\mathcal{H}(\mathbf{B}) = \sum_i^m \mathcal{H}_R(V_i) + \mathcal{H}(\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_m)$$

## Aplicaciones de la helicidad

Un área donde la helicidad adquirió en seguida un papel importante fue en el estudio de la generación espontánea de campos magnéticos en fluidos buenos conductores, en estado turbulento, lo que se conoce como *efecto dinamo*. Es el caso del sol y del núcleo de la tierra, metálico y a gran temperatura.

La existencia del campo magnético terrestre, en el sol y en muchos otros objetos celestes, fue durante mucho tiempo un misterio. La creencia de que estos campos se hubieran conservado desde el origen del objeto pronto se tuvo que desechar porque la edad del objeto es casi siempre mucho mayor que el tiempo

característico de disipación del campo por el efecto Joule. Durante años se fueron proponiendo varias teorías pero ninguna conseguía explicar satisfactoriamente el fenómeno, hasta que en 1919 Larmor [18] lanzó la idea de que el campo se generaba debido a corrientes inducidas por el movimiento rotatorio turbulento del fluido que conformaba el objeto en parte o en su totalidad. La idea de Larmor ha sido desarrollada por muchos físicos y lo sigue siendo, puesto que continua teniendo muchos puntos por aclarar.

Los movimientos de rotación y cizalla son esenciales en el efecto dínamo. También lo es una falta de simetría, como consecuencia del *Teorema Antidínamo* que demostró T. G. Cowling en 1934 [11]. Este teorema afirma que ningún campo magnético axisimétrico (esto es, simétrico respecto las rotaciones alrededor de un eje central) puede mantenerse por el efecto dínamo autosostendio de una corriente axialmente simétrica. No es pues extraño que la helicidad, que, a diferencia de la energía, refleja la falta de simetría, tenga especial relevancia.

Sabemos que las líneas de un campo magnético no se cortan ni se enganchan unas con otras. Sin embargo, es un hecho que en plasmas turbulentos se producen corrientes que rompen líneas cercanas reconectándolas inmediatamente de forma distinta. Este fenómeno, que se conoce como *reconexión magnética*, libera una enorme cantidad de energía. En este proceso, parte de la energía magnética se convierte en energía termal y/o energía cinética. La reconexión del campo magnético es origen de muchos fenómenos solares. Por ejemplo, las llamaradas solares que disparan al espacio partículas cargadas que cuando llegan a la tierra (*viento solar*) pueden causar perturbaciones en las comunicaciones, redes eléctricas, etc. También son la causa de las *auroras polares* que se producen en los polos terrestres; *boreal* en el hemisferio norte, *austral* en el sur [13].

En Teoría de la Fusión Nuclear, el interés por este invariante ha sido, durante años, mucho menor ([34]). Desconozco la razón de que, a diferencia de en astrofísica, existan tan pocas aplicaciones en este campo. Los experimentos de Taylor para formular su conjetura y, naturalmente todos los experimentos en laboratorio se hacen con plasmas confinados, generalmente toroidales. En el 2015 se publicaron unas notas que me parecen muy interesantes redactadas por J. B. Taylor y S. L. Newton [30] dedicadas a plasmas confinados.

## References

- [1] Agarwal, P. K., Edelsbrunner, H., y Wang, Y. (2004). *Computing the writhing number of a polygonal knot*. Discrete and Computational Geometry, 32(1), 37-53.
- [2] Aldinger, J., Klapper, I., y Tabor, M. (1995). *Formulae for the calculation and estimation of writhe*. Journal of Knot theory and its Ramifications, 4(03), 343-372.
- [3] Alemañ, R. A., y Jornet, E. (2011). *La fascinante matemática de los nudos*. Números. Revista de Didáctica de las Matemáticas, 76, 47-54.  
Arnold, V. I. (1974). *The asymptotic Hopf invariant and its applications*. In Vladimir I. Arnold- Collected Works (pp. 357-375). Springer, Berlin, Heidelberg.
- [4] Arnold, V. I., and Khesin, B. A. (1999). *Topological methods in hydrodynamics* Vol. 125. Springer Science and Business Media. (Cap. III, 4)

- [5] Berger, M. A., and Field, G. B. (1984). *The topological properties of magnetic helicity*. Journal of Fluid Mechanics, 147(133-148), 61.
- [6] Bevir, M. K., y Gray, J. W. (1980). *Reversed Field Pinch Theory*. Proc. Workshop.
- [7] Calugareanu, G. (1961). *Sur les classes d'isotopie des noeuds tridimensionnels et leurs invariants*. Czechoslovak Mathematical Journal, 11(4), 588-625.
- [8] Cantarella, J., DeTurck, D., Gluck, H., y Teytel, M. (2000). *Isoperimetric problems for the helicity of vector fields and the BiotSavart and curl operators*. Journal of Mathematical Physics, 41(8), 5615-5641.
- [9] Cantarella, J., DeTurck, D., y Gluck, H. (2002). *Vector calculus and the topology of domains in 3-space*. The American mathematical monthly, 109(5), 409-442.
- [10] Cimasoni, D. (2001). *Computing the writhe of a knot*. Journal of Knot Theory and Its Ramifications, 10(03), 387-395.
- [11] Cowling, T. G. (1934). *Solar Dynamo Theory*. Mon. Not. Roy. Astr. Soc, 94(39).
- [12] Faraco, D., y Lindberg, S. (2020). *Proof of Taylors conjecture on magnetic helicity conservation*. Communications in Mathematical Physics, 373(2), 707-738.
- [13] Faraco, D. *Matemáticas, turbulencias y auroras boreales*. El País. 15/01/2020.
- [14] Freedman, M. H. (1988). *A note on topology and magnetic energy in incompressible perfectly conducting fluids*. Journal of Fluid Mechanics, 194, 549-551.
- [15] Fuller, F. B. (1971). *The writhing number of a space curve*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 68(4), 815-819.
- [16] Fuller, F. B. (1978). *Decomposition of the linking number of a closed ribbon: a problem from molecular biology*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 75(8), 3557-3561.
- [17] Kleckner, D., and Irvine, W. T. (2013). *Creation and dynamics of knotted vortices*. Nature physics, 9(4), 253-258.
- [18] Larmor, J. (1919). *How could a rotating body such as the Sun become a magnet?* . Rep. Brit. Adv. Sci., 159-160.
- [19] . MacTaggart, D. y Valli, A. (2019). *Magnetic helicity in multiply connected domains*. Journal of Plasma Physics, 85(5).
- [20] Moffatt, H. K. (1969). *The degree of knottedness of tangled vortex lines*. Journal of Fluid Mechanics, 35(1), 117-129.
- [21] Moffatt, H. K. (1990). *The energy spectrum of knots and links*. Nature, 347(6291), 367-369.
- [22] Moffatt, H. K. (2014). *Helicity and singular structures in fluid dynamics*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 111(10), 3663-3670.
- [23] Ricca, H. M. R., y Moffatt, H. K. (1992). *Helicity and the Calugareanu invariant*. Proc. R. Soc. London, Ser. A, 439, 411-429.
- [24] Ricca, R. L., y Nipoti, B. (2011). *Gauss' Linking number revisited*. Journal of Knot Theory and Its Ramifications, 20(10), 1325-1343.

- [25] Ricca, R. L. (2008). *Topology bounds energy of knots and links*. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 464(2090), 293-300.
- [26] Ricca, R. L. (2013). *New energy and helicity bounds for knotted and braided magnetic fields*. Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics, 107(4), 385-402.
- [27] Silver, D. S. (2006). *Knot Theory's Odd Origins: The Modern study of knots grew out an attempt by three 19th-century Scottish physicists to apply knot theory to fundamental questions about the universe*. American Scientist, 94(2), 158-165.
- [28] Taylor, J. B. (1974). *Relaxation of toroidal plasma and generation of reverse magnetic fields*. Physical Review Letters, 33(19), 1139.
- [29] Taylor, J. (1986). *Relaxation and magnetic reconnection in plasmas*. Reviews of Modern Physics, 58(3), 741.
- [30] Taylor, J. B., y Newton, S. L. (2015). *Special topics in plasma confinement*. Journal of Plasma Physics, 81(5).
- [31] Woltjer, L. (1958). *A theorem on force-free magnetic fields*. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 44 (6) 489
- [32] Weber, C. (1995). *Questions de topologie en biologie molculaire*. Gazette des mathmaticiens, 64, 29-42.
- [33] White, J. H. (1969). *Self-linking and the Gauss integral in higher dimensions*. American journal of mathematics, 91(3), 693-728.
- [34] Yoshida, Z. (1990). *Roles of magnetic helicity in plasma confinement*. Journal of Nuclear Science and Technology, 27(3), 193-204.
- [35] DNA Topology <https://www.youtube.com/watch?v=HyP0cEbqKTc>
- [36] DNA Topology <https://www.youtube.com/watch?v=az2c6UbEdug>