



FACULTADE DE MATEMÁTICAS

Traballo Fin de Grao

Teoría de Nudos y el ADN

Nerea Santomé Rúa

2020/2021

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

GRAO DE MATEMÁTICAS

Traballo Fin de Grao

Teoría de Nudos y el ADN

Nerea Santomé Rúa

Julio 2021

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

Trabajo propuesto

Área de Coñecemento: Geometría y Topología
Título: Teoría de Nudos y ADN
Breve descripción do contido:
<p>El ADN bacteriano suele ser una molécula circular que se enrolla. Este enrollamiento impide el acceso a la información a menos que se actúe sobre la doble hélice para separar las hélices. Si las dos hebras del ADN no estuvieran entrelazadas, sería fácil separarlas simplemente empujando cada una en una dirección diferente. Pero no es así, y lo que ocurre en las bacterias es que una de las hebras se enrolla sobre la otra, de manera que forman un círculo. Pero para poder ser útiles, necesitan desenrollarse para permitir el acceso a la información y la transcripción de genes. La teoría de nudos se ha demostrado muy útil para entender la acción de las enzimas llamadas Topoisomerasas en todo ese proceso de enrollamiento y desenrollamiento.</p> <p>El trabajo consistirá en hacer una introducción a la teoría de nudos y exponer cómo se utiliza para la comprensión del fenómeno del enrollamiento del ADN.</p>
Recomendacións
Outras observacións

Índice general

Resumen	VII
Introducción	IX
1. Teoría de Nudos	1
1.1. Nudos equivalentes	2
1.2. Algunos invariantes	9
1.2.1. Linking number	12
1.2.2. Polinomio de Kauffman	15
2. Teoría de Enredos	23
3. Teoría de Nudos y Biología	33
3.1. Modelo de Ovillos	40
Bibliografía	45

Resumen

En este trabajo se pretende ofrecer una pequeña introducción a la teoría de nudos y su aplicación a la biología. Los nudos son objetos matemáticos que se pueden clasificar mediante una clase de equivalencia; para poder compararlos, utilizaremos una serie de invariantes que nos aportan información de si éstos son equivalentes o no. Además, estudiaremos cómo se relaciona esta teoría con la teoría de enredos y algunas de sus operaciones básicas.

Una vez visto el marco teórico, comprobaremos cómo se pueden aplicar en el campo de la Biología. En concreto, nos centraremos en la analogía que existe con algunas enzimas que actúan sobre el ADN circular. Las topoisomerasas, al igual que las recombinasas, son dos casos particulares de enzimas que cambian la topología del ADN, afectando consecuentemente a la forma que presenta y sus propiedades asociadas. Ambas serán de gran interés para el objetivo final de este trabajo: demostrar que las teorías de nudos y enredos son capaces de explicar el comportamiento de estas enzimas.

Abstract

The objective of this work is to give a brief introduction to the knot theory and its biology application. The knots are mathematical objects that can be classified according to an equivalent class. In order to compare them, we will use a group of invariants that will provide us information so that we can determine if they are equivalent or not. Furthermore, we will study how this theory is related to the knot theory as well as its basic operations.

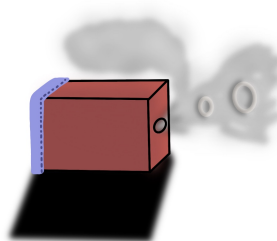
Once we have reviewed the theoretical framework, we will check its applications in Biology. In particular, we will focus on the existent analogy with certain enzymes which act upon circular DNA. Topoisomerases as well as recombinases are two particular cases of enzymes that modify the DNA topology, altering its structure and properties. Both will be really useful for the main objective of this paper which is showing that the knot and tangle theory can explain the behaviour of these enzymes.

Introducción

Se considera que la teoría de nudos tiene sus orígenes en el siglo XIX gracias a unas observaciones del físico escocés Peter Guthrie Tait. Este científico se dio cuenta de que en el volcán Etna se producía un fenómeno particular, y es que debido a la emisión de gases del volcán, emergían unos anillos perfectos de humo.



En el año 1867, Tait empezó a realizar una serie de experimentos que intentaban emular el comportamiento del volcán. Para poder hacerlo, construyó una máquina que ayudaba a estudiar este fenómeno a pequeña escala. Este invento consistía en una pequeña caja de madera a la que le hizo un agujero circular en una de las caras. En la cara opuesta sustituyó la tabla de madera por una toalla tensa. Dentro de ella colocaba amoníaco y ácido sulfúrico que, al reaccionar, producían humo. Luego, le daba golpes a la toalla, movimiento que impulsaba a que el humo saliese por el agujero. Cuando el humo salía del orificio, retrocedía en su camino haciendo una forma circular, lo que daba lugar a los anillos antes mencionados. Fue así como Tait vio que si se utilizaba un patrón circular, el aro se estabilizaba. Sin embargo, cuando en lugar de usar un agujero circular se usaba uno con forma de curva cerrada distinta a la circunferencia, el "aro" salía del orificio con la forma de dicha curva se iba deformando paulatinamente hasta obtener la forma circular.



Tait le enseñó a William Thomson (también conocido como Lord Kelvin) los experimentos realizados, así como algunos trucos de magia que se podían hacer con aros de humo. Lord Kelvin apreció que los anillos formados en esos trucos de magia tendían a estabilizarse en una forma "fundamental", lo que hoy se conoce como un toro. Posteriormente, fue capaz de acoger esta idea para intentar explicar la estructura atómica y la forma de los distintos elementos.

Los científicos de la era victoriana creían en la existencia de un fluido perfecto y no viscoso, conocido como éter. Éste se consideraba esencial para poder explicar cómo se

llenaba el espacio infinito y los procesos que ocurrían en él. Thomson tenía esta idea en mente, y junto a los conocimientos obtenidos de los experimentos de Tait, determinó que los elementos químicos eran tubos de éter anudados.

A partir de este momento, Thomson intentó explicar los elementos químicos clasificándolos como distintos tipos de nudos. El éter generaba vórtices que “atrapaban” a los átomos dando lugar a este tipo de formaciones.

El modelo de Kelvin motivó a que Tait, en 1877, empezara una clasificación de los nudos de hasta 7 cruces. Ésto lo hizo con el fin de poder diferenciar los átomos correctamente.

En 1887 Michelson y Morley determinaron que el éter no existía. A la luz de este hecho, el modelo atómico propuesto por Kelvin perdía toda la validez e hizo que los químicos perdiesen todo el interés en los nudos. Sin embargo, éste fue el germen de la teoría de nudos.

La clasificación de Tait incitó a otros matemáticos a seguir aumentando la tabla añadiendo nudos con más cruces. Thomas P. Kirkman se encargó de construir un nuevo catálogo con nudos de hasta 10 cruces y se lo mandó a Tait. No obstante, esta lista contenía redundancias que procuró ir eliminando.

En 1899, Little fue el primer matemático en clasificar los nudos alternantes (nudos en donde los cruces se van alternando al pasar por encima y por debajo). Esta lista le fue enviada a Tait y le ayudó a corregir un error que había cometido.

Durante más de 70 años se pensó que la propuesta de Little era correcta hasta que, en 1974, Perko (un abogado que era aficionado a las matemáticas) descubrió que había dos nudos (ver Figura) que eran equivalentes, es decir, eran el mismo nudo, y habían sido omitidos hasta ese momento.



Figura 1: Par de Perko

Con el paso de los años se han ido encontrado muchas aplicaciones para la teoría de nudos, dando lugar a que esta rama de la topología se haya extendido a diversos campos. La aplicación inmediata que trataremos en los siguientes capítulos es la relación que presenta esta teoría con el ADN circular.

Este trabajo pretende ofrecer una visión de cómo se puede aplicar la teoría de nudos y de enredos para entender el funcionamiento de dos tipos de enzima, las topoisomerasas y las recombinasas. Tras dedicar un primer capítulo a proporcionar el marco teórico de la teoría de nudos necesario para el desarrollo de la parte de biología, dedicamos un segundo capítulo para poder explicar qué es la teoría de enredos y sus operaciones básicas, entendiendo la conexión que existe entre las dos teorías. En el último capítulo veremos cuál es la relación de la teoría de nudos con las topoisomerasas. Finalmente explicaremos el modelo de los ovillos que demuestra, gracias a la teoría de enredos, cómo actúa la TN3-Resolvasa, un

caso particular de la enzima recombinasa.

Capítulo 1

Teoría de Nudos

Los nudos son, desde hace muchos años, un elemento muy importante para el ser humano y para la naturaleza. Además de los más conocidos como son los nudos de los zapatos o los nudos marineros, también se puede ver que, mismo en la prehistoria, se fabricaban herramientas que consistían en dos piezas disjuntas unidas gracias al uso de un nudo.

A pesar de ser algo que lleva tanto tiempo en nuestras vidas, no fue hasta hace unos años, que, se empezaron a estudiar los nudos como objetos matemáticos.

En este primer capítulo vamos a ver en qué consiste la teoría de nudos y su objetivo principal: clasificar nudos. Antes de empezar, vamos a recordar una definición:

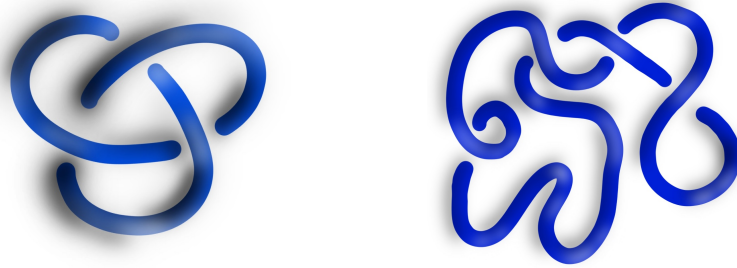
Definición 1.1 (Embebimiento). Sean X, Y dos espacios topológicos. Dada una función $f : X \rightarrow Y$ continua, se dirá que f es un embebimiento si X y $f(X)$ son homeomorfos.

Ahora ya estamos en condiciones de definir qué es un nudo.

Definición 1.2 (Nudo). Diremos que un nudo es un embebimiento $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$

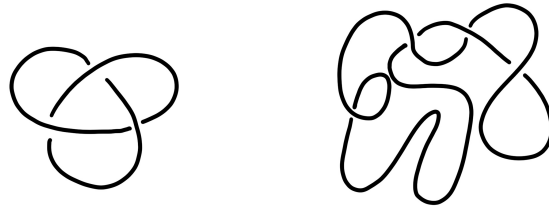
Observación 1.3. Notemos que cuando nos referimos a un nudo $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$, intuitivamente nos estamos refiriendo a la imagen $f(\mathbb{S}^1) \subseteq \mathbb{R}^3$. En muchas ocasiones a lo largo del trabajo, haremos hincapié en la manera en que esta imagen está inmersa en \mathbb{R}^3 : a modo de ejemplo, el conjunto de puntos de $\mathbb{R}^3 : \{(x, y, 0) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 = 1\}$ será el nudo trivial.

Cuando nuestro nudo en \mathbb{R}^3 se puede transformar en la circunferencia anterior mediante una serie de movimientos continuos (que precisaremos más adelante), también se llamará nudo trivial.



En la figura anterior hay dos nudos que, aunque a simple vista se puede pensar que el primer nudo es más sencillo que el segundo, esto no es así. Si nos fijamos, el segundo nudo se puede deshacer hasta conseguir una circunferencia, es decir, se trata del nudo trivial. Por el contrario, por muchos movimientos que intentemos hacer en el primer nudo, no vamos a conseguir deshacerlo. Este nudo se trata del nudo no trivial más simple, y recibe el nombre de nudo de trébol debido a su forma característica.

Para facilitar la comprensión, cuando dibujamos y estudiamos nudos, en lugar de trabajar con el nudo en \mathbb{R}^3 , lo hacemos con una proyección en \mathbb{R}^2 , que recibe el nombre de diagrama plano. Ésta nos facilitará mucho el análisis de la equivalencia de nudos, que es una de las aplicaciones más importantes en la teoría de nudos.



1.1. Nudos equivalentes

Como se ha mencionado antes, lo que más nos va a interesar en este capítulo es el análisis de las propiedades de los nudos para ver si son equivalentes o no.

Para poder entender qué significa que dos nudos sean equivalentes, vamos a definir en primer lugar algunos conceptos:

Definición 1.4 (Homotopía). Sean X, Y dos espacios topológicos, $f, g: X \rightarrow Y$ dos aplicaciones continuas y sea $I = [0, 1] \subset \mathbb{R}$ el intervalo unidad. Una aplicación continua $F: X \times I \rightarrow Y$ se dice que es una homotopía entre f, g si se verifican las siguientes condiciones:

- (1) $F_0 = f(x) \forall x \in X$, siendo $F_0: X \rightarrow Y$ que lleva $x \rightarrow F(x, 0)$

(2) $F_1(x) = g(x) \forall x \in X$, siendo $F_1 : X \rightarrow Y$ que lleva $x \rightarrow F(x, 1)$

Como F es una función continua, se tienen dos propiedades implícitas extra:

(i) La aplicación $t \in I \rightarrow F_x(t) \in Y$ es continua $\forall x \in X$.

Esto se debe a que esta función es la composición de dos funciones continuas. $i_x \circ F$, en donde $i_x : I \rightarrow X \times I$ lleva $t \rightarrow (x, t)$. La condición implica que todos los caminos que siguen los puntos deben ser continuos.

(ii) La aplicación $x \in X \rightarrow F_t(x) \in Y$ es continua $\forall t \in \mathbb{I}$.

Esto se debe a que esta función es la composición de dos funciones continuas. $i_t \circ F$, en donde $i_t : X \rightarrow X \times I$ lleva $x \rightarrow (x, t)$.

Ejemplo 1.5. Un ejemplo de homotopía sería el siguiente, en donde podemos ver cómo un cilindro se transforma de forma continua en el tiempo en un toro.

Sean los espacios $X = \mathbb{S}^1$ e $Y = \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1$. Consideremos la función $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1$ dada por $x \rightarrow (x, p)$, donde $p = (1, 0)$ es un punto fijo. Definimos a continuación la siguiente aplicación continua $F : \mathbb{S}^1 \times \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1$:

$$F(x, t) := (x, \cos(2\pi t), \sin(2\pi t)) \quad (1.1)$$

Tendremos que F es una homotopía de f en sí misma. Ésto es debido a que se verifican las hipótesis $F_0(x) = F(x, 0) = (x, (1, 0)) = f(x)$ y $F_1(x) = F(x, 1) = (x, (1, 0)) = f(x)$. Además, podemos apreciar cómo los caminos $t \rightarrow F_x(t)$ son continuos para todo $x \in \mathbb{S}^1$. La siguiente figura nos muestra la homotopía gráficamente, y sus caminos están representados en rojo:

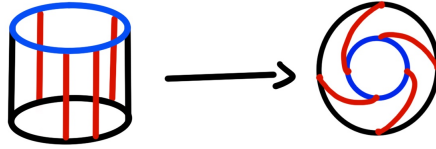


Ejemplo 1.6. Otro ejemplo de homotopía sería el siguiente, en donde podemos ver cómo un circunferencia de radio 1 se transforma de forma continua en el tiempo en una circunferencia de radio $\frac{1}{2}$ a la que le vamos a aplicar una rotación.

Sean los espacios $X = \mathbb{S}^1$ e $Y = \mathbb{R}^2$. Consideremos $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^2$ como la función inclusión y la función $g : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^2$ dada por $\theta \rightarrow \frac{1}{2}1_{\theta + \frac{\pi}{2}}$. Definimos a continuación la siguiente aplicación continua $F : \mathbb{S}^1 \times \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{R}^2$:

$$F(\theta, t) := \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-t)\right) 1_{\theta + t(\frac{\pi}{2})} \quad (1.2)$$

Tendremos que F es una homotopía de f en g . Vemos que se verifican las hipótesis $F_0(\theta) = F(\theta, 0) = \theta = f(x)$ y $F_1(\theta) = F(\theta, 1) = \frac{1}{2}\theta = g(x)$, y además, se puede ver que los caminos $t \rightarrow F_x(t)$ son continuos para todo $x \in \mathbb{S}^1$. La siguiente figura nos muestra la homotopía y los caminos que siguen los puntos en ella.



Definición 1.7 (Isotopía). Se llama isotopía a una homotopía en donde $\forall t, F_t : X \rightarrow Y$ es un embebimiento.

Muchas veces se trata la equivalencia de nudos como la existencia de un homeomorfismo entre las imágenes de los dos nudos. Por esta definición tendríamos que el nudo de trébol y su imagen especular serían equivalentes por ser homeomorfos. Sin embargo, esto no se verifica porque no se puede pasar de uno a otro de forma continua en el espacio ambiente, ni siquiera rotándolo. Este hecho motiva a buscar una nueva definición de nudo equivalente.

Definición 1.8 (Isotopía ambiental). : Sean $f, g : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$ dos embebimientos que dan lugar a dos nudos que denotaremos por K_1, K_2 . Diremos que una isotopía $F : \mathbb{R}^3 \times I \rightarrow \mathbb{R}^3$ es una isotopía ambiental si se tiene que $F_t : \mathbb{R}^3 \times \{t\} \rightarrow \mathbb{R}^3$ es un homeomorfismo $\forall t \in I$. Además, como queremos que sea una isotopía entre los nudos K_1 y K_2 se tiene que verificar que:

- (1) $F_0 : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ es la identidad
- (2) $F_1(K_1) = K_2$

En donde \mathbb{R}^3 es el espacio ambiente (espacio en el que se encuentra el nudo).

Observación 1.9. Consideremos la aplicación $\mathbb{S}^1 \times \mathbb{I} \rightarrow \mathbb{R}^3$ que lleva $(x, t) \rightarrow F_t(f(x))$. Si tomamos $t \in I$ fijo, tendremos un nudo $\mathbb{S}^1 = \mathbb{S}^1 \times \{t\} \rightarrow \mathbb{R}^3 = \mathbb{R}^3 \times \{t\}$. Dado que $\forall t \in \mathbb{I}$, F_t es biyectiva y f un embebimiento, podemos asegurar que la composición $F_t \circ f$, es decir, $\mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^3 \times \{t\} \rightarrow \mathbb{R}^3$, es una colección de nudos $\{K_t\}$ con $t \in \mathbb{I}$, que se puede ver como una deformación del primer nudo, K_0 en el último, K_1 . En todas las etapas tendremos un embebimiento, es decir, un nudo, y por este hecho podemos asegurar que no existen autointersecciones por la propia definición.

Lo que hacemos cuando se considera una isotopía ambiental es, en lugar de deformar el objeto en un espacio formado sólo por éste, deformar su espacio ambiente.

Definición 1.10 (Nudos equivalentes/Isotópicos ambientalmente). Dados dos nudos $f, g : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$, diremos que son equivalentes si son isotópicos ambientalmente, es decir, si existe una isotopía ambiental entre ellos.



Notemos que la definición de nudos equivalentes en 1.10 es trivialmente una relación de equivalencia. Este hecho motiva la siguiente definición:

Definición 1.11 (Tipo de nudo). Llamaremos tipo de nudo a la clase de equivalencia formada por todos los nudos equivalentes

Así, por ejemplo, diremos que el nudo trivial (tipo de nudo trivial) es aquel que está en la misma clase de equivalencia que \mathbb{S}^1 (que la inclusión $\iota : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^3$), siendo ésta la circunferencia situada en el plano OXY .

Habíamos dicho que para estudiar de forma más clara los nudos, los proyectábamos en un plano, creando así los diagramas planos. Sin embargo, estos diagramas de los nudos nos pueden dar problemas. A veces, el diagrama es imposible de representar con un número finito de cruces. Cuando esto ocurre, es imposible analizar sus propiedades.

Si el nudo se puede representar en un diagrama plano con un número finito de cruces, recibirá el nombre de nudo dócil, y en caso contrario, nudo salvaje. Éste último se caracteriza por la existencia de un punto límite que se denomina punto salvaje (representado en rojo).



Queremos solucionar este problema, y para ello debemos tener en cuenta lo siguiente:

Definición 1.12 (Nudo Poligonal). Nudo cuya imagen está formada por segmentos de recta.



En esta imagen podemos observar cómo se puede hacer el diagrama del nudo de trébol, que es un nudo dócil, con segmentos de recta. Esta propiedad se puede aplicar sobre cualquier nudo dócil, porque son topológicamente iguales. Por tanto, si tenemos un nudo poligonal, tendremos un nudo dócil.

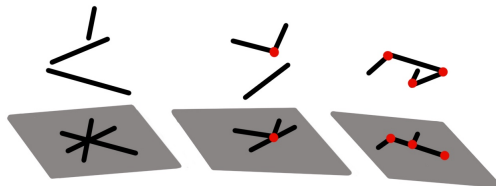
Teniendo esto en cuenta, vamos a definir una serie de conceptos nuevos en base a este tipo de nudos.

Definición 1.13 (Proyección). Diremos que una proyección es una aplicación lineal de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$. Más en particular, una proyección de un nudo sería la composición de un nudo y una proyección:

$$f : \mathbb{S}^1 \longrightarrow \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}^2$$

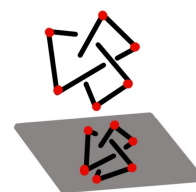
Definición 1.14 (Proyección regular). Diremos que una proyección de un nudo es regular si verifica:

1. En la proyección no hay ningún punto que se corresponda a más de 2 puntos del nudo en \mathbb{R}^3 que denominaremos puntos dobles. esto significa que su imagen inversa corresponde a dos puntos del nudo.
2. Hay un número finito de puntos dobles
3. Cuando se trabaja con la proyección de un nudo poligonal, un punto doble no puede ser un vértice. Cuando este no es el caso y se trabaja con un nudo no poligonal, no se permite la tangencia entre sus curvas.



Aquí podemos ver tres ejemplos en donde no se verifican las propiedades necesarias para ser una proyección regular.

En la imagen de la derecha, por el contrario, sí se puede ver una proyección regular. No hay ningún punto de la proyección que represente más de dos puntos de la figura; el diagrama presenta 3 puntos dobles, por tanto es un número finito, y los 6 vértices del diagrama representan un único punto.



Desde este momento, cuando hablemos de nudo estaremos pensando en un nudo dócil que estudiaremos como nudo poligonal, para evitar los nudos salvajes, y todos sus equivalentes.

Observación 1.15. Podemos decir que un diagrama plano se puede ver cómo la imagen de un nudo por una proyección regular. Los puntos dobles de un diagrama plano reciben el nombre de cruce. Además, como sólo vamos a trabajar con nudos dóciles podemos asegurar

que siempre vamos a encontrar una proyección regular de este, pues bastaría con modificar un poco el diagrama plano.

Como vamos a trabajar con los nudos poligonales, necesitamos definir un nuevo tipo de isotopía, la isotopía ambiental lineal a trozos.

Definición 1.16 (Isotopía ambiental lineal a trozos). Una isotopía ambiental lineal a trozos es una isotopía en \mathbb{R}^3 en la que los movimientos que se realizan son los conocidos como movimientos triangulares, que son:



Los movimientos triangulares son un tipo de isotopía ambiental, por lo que no cambian el tipo de nudo, que nos va a ayudar a poder definir la equivalencia entre nudos poligonales.

Definición 1.17 (Isotopía plana). Una isotopía plana es la composición de una isotopía ambiental lineal a trozos con una proyección regular (nos permite pasar de un nudo poligonal a otro sin atravesarse a sí mismo).

$$\begin{array}{ccc}
 \mathbb{R}^3 \times \mathbb{I} & \longrightarrow & \mathbb{R}^3 \\
 & \searrow & \downarrow \\
 & & \mathbb{R}^2
 \end{array}$$

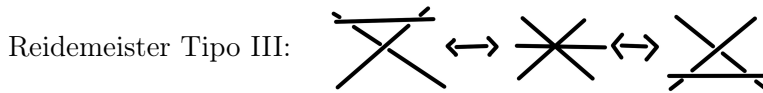
Como una isotopía plana es un tipo de isotopía ambiental lineal a trozos, deducimos que una isotopía plana no varía el tipo de nudo. Un resultado muy importante que podemos intuir de lo que ya hemos mencionado hasta ahora es que, si tenemos una isotopía plana, podemos construir una isotopía ambiental. Sin embargo, que tengamos una isotopía ambiental no significa que tenga que ser una isotopía plana, pues no siempre vamos a encontrar una proyección regular del nudo.

Cualquier nudo de 6 cruces o menos va a ser equivalente a alguno de los nudos siguientes o la imagen especular de alguno de estos:



A veces, que una isotopía ambiental no da lugar a una isotopía plana, no significa que no se pueda hacer algún tipo de movimiento para poder pasar de un nudo a otro que sea

equivalente. Por ese motivo, vamos a distinguir tres casos particulares de desplazamiento que sí se pueden aplicar aunque halla que pasar por una proyección no regular. Los Movimientos de Reidemeister:



Los movimientos de Reidemeister no varían el tipo de nudo, por lo que, si aplicamos una cantidad de movimientos de Reidemeister, el nudo no cambia.

En 1927, Kurt Reidemeister consiguió dar una condición necesaria y suficiente para comprobar la equivalencia de los nudos. Él fue capaz de probar que la existencia de una isotopía ambiental entre nudos es equivalente a estudiar la equivalencia de los diagramas planos asociados a ellos.

Teorema 1.18 (Reidemeister). *Dos nudos son equivalentes si y sólo si existe una sucesión finita de isotopías planas o movimientos de Reidemeister que transforman el diagrama plano de un nudo en el otro.*

Demostración.

” \Rightarrow ”

Queremos ver que si tenemos dos nudos equivalentes, existirá una secuencia de isotopías planas y/o movimientos de Reidemeister que llevan de un diagrama al otro.

Supongamos entonces que tenemos dos nudos equivalentes con sus proyecciones correspondientes. Como ya sabemos, estamos trabajando con nudos poligonales, por tanto, consideraremos un diagrama plano asociado a cada nudo poligonal, los cuales vienen determinados por un número finito de segmentos de recta.

Como los nudos son equivalentes, tiene que existir una isotopía ambiental lineal a trozos que lleve uno en el otro. El hecho de que esta isotopía sea a trozos, puede dar lugar a dos situaciones:

- Si podemos pasar de un diagrama al otro mediante movimientos triangulares (es decir, en todo momento el diagrama es regular), tendremos que es una secuencia de isotopías planas.
- Cuando realizamos una secuencia de movimientos triangulares a veces no podemos evitar pasar por un diagrama que no es regular. Sin embargo, sabemos que los nudos son equivalentes, por tanto, podemos asegurar que se podría "saltar" el paso en el que el diagrama no es regular utilizando alguno de los tres tipos de movimientos de Reidemeister, que como mencionamos anteriormente, son movimientos permitidos cuando ocurren estas situaciones y no cambian el tipo de nudo.

Por tanto, por ser nudos equivalentes se tiene que verificar la existencia de una secuencia de isotopías planas o movimientos triangulares.

" \Leftarrow "

Tanto las isotopías planas como los movimientos de Reidemeister no varían el tipo de nudo. Por tanto, es trivial que una secuencia de éstos tampoco lo va a hacer, lo que significa que llegaremos a un nudo equivalente. \square

Sabemos que existen tres tipos de movimientos de Reidemeister, no obstante, esto no significa que para pasar de un nudo a otro equivalente necesitemos usar los tres. De hecho, a veces no hace falta usar ninguno de estos movimientos porque basta con hacer movimientos triangulares. Aún así, cabe destacar la siguiente definición por ser un caso particular:

Definición 1.19 (Regularmente equivalentes). Diremos que dos nudos son regularmente equivalentes cuando para pasar de uno a otro se usan únicamente movimientos de Reidemeister de tipo II y III.

1.2. Algunos invariantes

Como podemos imaginar, es fácil ver que dos nudos son equivalentes si encontramos una combinación de movimientos que lleve un nudo en el otro. Sin embargo, demostrar que dos nudos son distintos es bastante complejo, pues puede ser que estemos hablando del mismo nudo pero no encontremos la secuencia correcta.

Para poder asegurarnos de que dos nudos no son equivalentes, se definen una serie de invariantes que nos pueden ayudar a ver cuándo los dos nudos son distintos.

Tendremos que tener siempre en cuenta que, si dos nudos tienen el mismo invariante, pueden ser equivalentes o no. Sin embargo, si presentan un invariante distinto, estaremos hablando de tipos de nudo diferentes.

A continuación, estudiaremos algunos tipos de invariantes, empezando con algunos tan básicos como la tricoloreabilidad, y terminando por los más complejos a los que le dedicaremos un subapartado para poder explicarlos.

Antes de empezar a ver los invariantes, vamos a definir qué son los nudos alternantes porque, a veces, presentan características importantes que nos ayudan a conocer dichos invariantes.

Definición 1.20 (Nudo alternante). Diremos que un nudo es alternante cuando presenta un diagrama alternado, es decir, los cruces van por encima y por debajo sucesivamente

En los dos ejemplos que se muestran a la derecha se puede ver fácilmente que los cruces se van alternando pasando por encima y por debajo hasta dar la vuelta completa por el nudo.



Los primeros invariantes que vamos a definir están relacionados con los cruces de los diagramas planos de los nudos.

Definición 1.21 (Tricoloreabilidad). Diremos que un nudo es tricoloreable si se verifica que en el diagrama plano se utilizan 3 colores, de forma que para todos sus cruces, los tres arcos asociados verifiquen una de estas dos condiciones:

- Los tres arcos que se cruzan tienen el mismo color. Es decir, en cada cruce sólo hay un color.
- Los tres arcos que se cruzan tienen colores distintos. Es decir, en cada cruce hay tres colores.

Para entender la tricoloreabilidad vamos a ver los ejemplos de nudos alternantes que aparecen en esta misma página.



El nudo de trébol es un claro ejemplo de un nudo tricoloreable. Si fijamos un cruce, se puede pintar cada uno de sus tres arcos de un color distinto. Observamos así que los tres cruces del diagrama tienen un color distinto.

Sin embargo, si ahora vemos el nudo de la derecha podemos ver que no es tricoloreable.



En el primer caso vemos que si el cruce está formado por tres aristas del mismo color, no habría forma de hacer que sea tricoloreable porque si pintamos las dos aristas que quedan de azul sólo habría un color y, si se utilizan los otros dos colores, habría cruces bicolors. En el segundo caso vemos que si intentamos poner cada arista de un color es imposible,

pues si la arista que está sin color se pintase de azul, habría aristas bicoloreables, y si se pinta de cualquiera de los otros dos, pasaría lo mismo.

Definición 1.22 (Crossing number). Llamamos *crossing number*, $c(K)$ al número mínimo de cruces con el que se puede representar un nudo.

Este invariante es útil cuando queremos comparar un nudo alterante con otro nudo cualquiera. Esto se debe a que si tenemos un nudo alternante, el número de cruces de éste va a ser el *crossing number*. Por tanto, si comparamos un nudo alternante con otro que tiene menos cruces, podremos asegurar que son distintos.

Definición 1.23 (Unknotting number). Llamamos *unknotting number*, $u(K)$, al número de cruces que habría que cambiar en un diagrama para obtener la equivalencia con el nudo trivial.

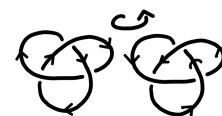


En esta imagen podemos observar que partimos de un nudo alternante, por tanto $c(K) = 5$. Para calcular el *unknotting number* vamos a intercambiar los enlaces que están rodeados, es decir, intercambiaremos la arista de delante con la de detrás del cruce. En este caso, podemos observar que sólo necesitamos realizar dos cambios de cruce, por lo que $u(K) = 2$.

Los dos invariantes que vienen a continuación no están relacionados con los cruces del nudo, sino con la forma que éste tiene.

Definición 1.24 (Nudo invertible). Diremos que un nudo es invertible si es equivalente a sí mismo con la orientación opuesta.

Como podemos observar en la imagen de la derecha, dotamos al nudo de trébol con una orientación. Seguidamente, rotamos el nudo 180° y vemos que el nudo sigue siendo el mismo pero ahora la orientación ha cambiado. Por lo que es invertible.



Cabe destacar que todos los nudos de 7 cruces o menos son invertibles.

Definición 1.25 (Nudo quirral). Diremos que un nudo es quirral cuando no es equivalente a su imagen especular.

Cuando un nudo no es quirral, es decir, cuando un nudo sí es equivalente a su imagen especular, estaremos hablando de un nudo anfiqueiral.



De esta propiedad conocida como quiralidad podemos deducir que un nudo y su imagen especular no son necesariamente equivalentes (por ejemplo el nudo de trébol). Esto es muy útil sobre todo en el campo de la Química y también en la Biología.

Teorema 1.26. *Sea K un nudo alternante, si $c(K)$ es impar entonces K es quiral.*

Demostración. Ver [18]

□

1.2.1. Linking number

En este apartado vamos a generalizar el concepto de nudo. Para ello definimos qué es un enlace.

Definición 1.27 (Enlace). Diremos que un enlace es un embebimiento de un conjunto de circunferencias en \mathbb{R}^3 .

Un enlace se puede pensar como un conjunto de nudos entrelazados entre sí, en donde cada circunferencia que forma parte del enlace recibe el nombre de componente. Por tanto, cuando hablemos de enlaces diremos que se trata de un enlace de n -componentes.

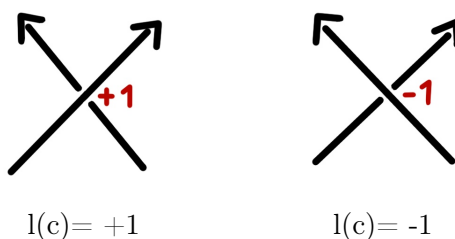


Estos dos ejemplos son enlaces muy usados desde hace mucho tiempo. El primero es un enlace de 3 componentes que tiene la característica de que sus componentes son disjuntas dos a dos, esto significa que si suprimiésemos una de las componentes, las otras dos quedarían libres, no estarían entrelazadas. Este enlace aparecía en el escudo de la familia Borromeo, y debido a esto, se conocen con el nombre de Anillos de Borromeo. El segundo es un enlace de 2-componentes que está formado por un nudo trivial y un nudo al que se le ha aplicado un movimiento de Reidemeister de tipo I. Este enlace se denomina de Whitehead y se considera un enlace universal y uno de los más importantes. Al igual que los nudos, presentan muchas características que se estudian de la misma forma. Por ejemplo, cabe destacar la importancia de ver si son equivalentes o no, para lo cual se aplican los movimientos de Reidemeister. Vamos a ver a continuación cómo sería un ejemplo de enlaces equivalentes para los anillos de Borromeo y para el enlace de Whitehead.



Lo primero que haremos para distinguir si dos enlaces son equivalentes o no, es ver el número de componentes que tienen. Pues si el número de componentes es distinto, nunca podrán ser el mismo tipo de enlace. Se podría decir que éste es un invariante muy básico que en pocos casos nos aporta algo de información, puesto que sólo nos asegura que dos enlaces son distintos si difieren en el número de componentes.

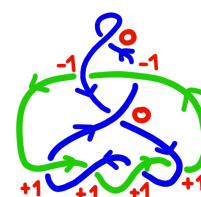
Los anillos de Borromeo y el enlace de Whitehead es imposible que sean equivalentes puesto que el primero tiene 3 componentes y el segundo tiene 2 componentes. Un invariante mucho más importante que se utiliza para distinguir enlaces es el *linking number*. Para definirlo, vamos a considerar un enlace de 2 componentes, y dotaremos a cada una de las componentes con una orientación, en donde denotaremos por $l(c)$ al número asociado a cada cruce que existe entre las dos componentes. Si el cruce es consigo mismo no se tendrá en cuenta.



Definición 1.28 (Linking Number). Dado un enlace de 2 componentes, el *linking number* viene dado por la expresión: $Lk(K) = \frac{1}{2} \sum_c l(c)$.

A la derecha tenemos un ejemplo de un nudo K cuyo *linking number* es $Lk(K) = \frac{1}{2}(1 + 1 + 1 + 1 - 1 - 1) = 1$.

El siguiente resultado demuestra que el *linking number* es un invariante.



Teorema 1.29. *Si dos enlaces de 2 componentes y orientados son equivalentes, entonces tienen el mismo linking number.*

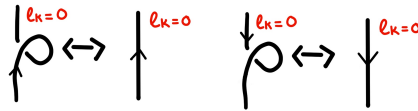
Demostración.

Al igual que con los nudos, si dos enlaces son equivalentes podemos asegurar que existe una secuencia finita de isotopías planas y movimientos de Reidemeister.

Como ya sabemos, las isotopías planas no afectan al número de cruces, y por tanto, tampoco

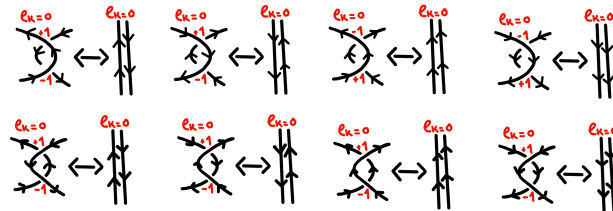
al *linking number*. Los movimientos de Reidemeister, por el contrario, sí varían el número de cruces, pero se compensan y no afectan. Para entender esto, lo veremos de forma gráfica:

Reidemeister Tipo I:



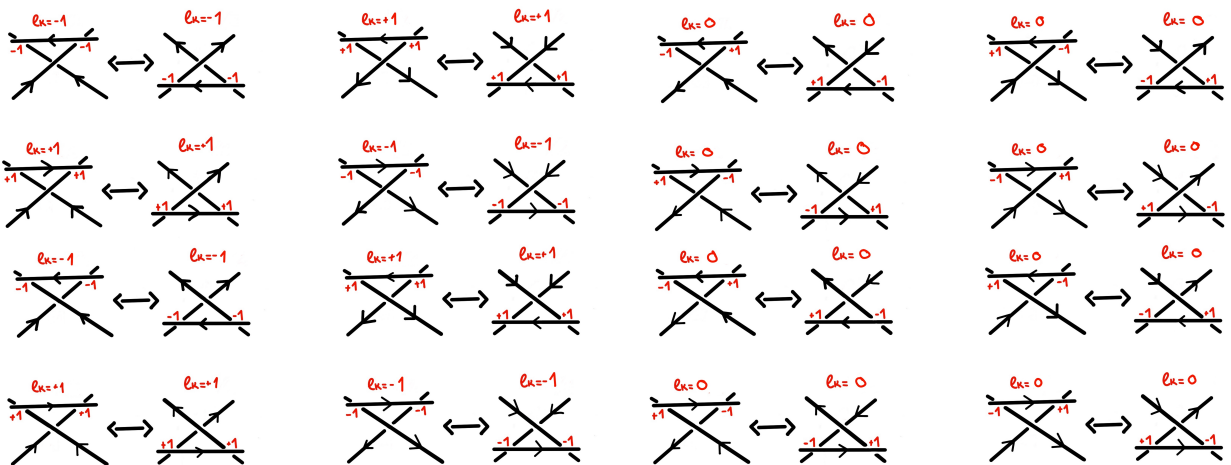
Como podemos observar, en este caso no hay ningún cruce, pues el cruce que se ve es consigo mismo y no se tiene en cuenta.

Reidemeister Tipo II:



En los movimientos de tipo II siempre va a haber dos cruces. Si el cruce es entre la misma componente no se considera. En la imagen se ve cómo sería el *linking number* si los cruces fuesen entre dos componentes. Observamos que, independientemente de la orientación, siempre se va a anular uno con el otro, por tanto, a nivel global se va a mantener el *linking number*.

Reidemeister Tipo III:



Los movimientos de Reidemeister de tipo III tienen 3 cruces, pero como estamos trabajando con enlaces de 2 componentes, es imposible que los 3 cruces sean de componentes distintas. Existen muchos casos posibles dependiendo de cuáles sean los cruces de componentes distintas y cuáles de la misma:

- Si los 3 cruces son de la misma componente, no se considera ningún cruce y lk será 0 antes y después de hacer el movimiento.
- Si los 2 cruces de las rectas diagonales son de la misma componente (ejemplo de la imagen). Vemos que hay dos posibilidades:
 - Los cruces se mantienen, y por tanto no varía el *linking number*.
 - Cuando hay un cruce positivo y otro negativo, se invierten, lo cual tampoco afecta a nivel global porque no cambia el *linking number*.
- Si los 2 cruces de la misma componente son uno de la diagonal y el correspondiente con la recta horizontal, el procedimiento sería análogo al de la imagen.

Hemos demostrado entonces que ni las isotopías planas ni los movimientos de Reidemeister afectan al *linking number*, por tanto, hemos probado que el *linking number* es un invariante.

□

1.2.2. Polinomio de Kauffman

En 1928 aparece un nuevo tipo de invariante muy distinto a todos los vistos hasta ahora, el primer invariante polinomial, conocido como polinomio de Alexander.

Este polinomio era más preciso que los invariantes conocidos hasta el momento, pero aún así, había muchos casos en los que no podíamos concluir nada, pues existen bastantes tipos de nudo que presentan el mismo polinomio de Alexander.

A raíz de la aparición de éste, empezaron a surgir otros invariantes polinómicos, como es por ejemplo el polinomio de Jones, que apareció en los ochenta. Con la llegada de cada invariante polinómico nuevo, se conseguía ir mejorando un poco la capacidad de distinción entre los nudos, pero se seguía buscando cada vez más y más precisión.

Una variación del polinomio de Jones, da lugar a un nuevo polinomio mucho más preciso, pero que sigue sin ser suficiente. Éste recibe el nombre de Polinomio corchete de Kauffman, el cual estudiaremos a continuación.

Lo que más nos va a interesar es poder calcular este invariante, al igual que hicimos con los demás, a través de sus diagramas planos. Para ello, vamos a suponer que estamos

construyendo un polinomio de tres variables A, B, C que puede ser calculado en base a una proyección regular K del nudo. El polinomio corchete de Kauffman se denota por $\langle K \rangle$ y sirve tanto para nudos como para enlaces.

Antes de empezar a ver la construcción de este polinomio, vamos a explicar en qué consiste la operación $K \cup \bigcirc$.

Como hemos dicho, K es una proyección regular de un nudo, y \bigcirc es el nudo trivial. Cuando unimos estos dos diagramas, vamos a obtener un diagrama formado por dos nudos disjuntos. Para la construcción, lo que haremos será obviar el nudo trivial del diagrama y considerarlo una constante que multiplica al polinomio del diagrama sin el nudo trivial.

Ahora ya estamos en condiciones de ver la construcción del polinomio de Kauffman, para ello le vamos a imponer las siguientes condiciones:

- $\langle \bigcirc \rangle = 1$ **Condición de normalización**
- $\langle K \cup \bigcirc \rangle = C \langle K \rangle$
- $\begin{cases} \langle \nearrow \searrow \rangle = A \langle \rangle \langle \rangle + B \langle \frown \rangle \\ \langle \searrow \nearrow \rangle = A \langle \frown \rangle + B \langle \rangle \langle \rangle \end{cases}$ **Relación de madeja**

La relación de madeja nos da una relación que nos ayuda a obtener K , en términos de K_1 y K_2 , en donde ambas son proyecciones con un cruce menos que K .

Dada una proyección de un nudo, si tomamos un cruce $\langle \nearrow \searrow \rangle$ y lo cortamos en vertical y horizontal obtenemos $\langle \rangle \langle \rangle$ y $\langle \frown \rangle$. Y si el cruce es $\langle \searrow \nearrow \rangle$, obtendremos la misma relación. La diferencia que hay es que si la pendiente es positiva, primero cortamos en vertical y después en horizontal y, si por el contrario, la pendiente es negativa, primero cortamos en horizontal y después en vertical.

Para entender esto mejor, vamos a ver la condición de madeja paso a paso, pues será esencial para poder entender lo que viene a continuación:

En $\langle \nearrow \searrow \rangle$ vemos que sólo hay un cruce, el cual tiene pendiente positiva. Como tiene pendiente positiva, cortaremos el cruce primero en vertical, es decir:

$$\langle \nearrow \searrow \rangle = \langle \nearrow \searrow \rangle = \langle \nearrow \searrow \rangle = \langle \rangle \langle \rangle = A \langle \rangle \langle \rangle .$$

A continuación, cortaremos el cruce en horizontal:

$$\langle \nearrow \searrow \rangle = \langle \nearrow \searrow \rangle = \langle \nearrow \searrow \rangle = \langle \frown \rangle = B \langle \frown \rangle .$$

De esta forma llegamos a la primera ecuación de la relación de madeja:

$$\langle \nearrow \searrow \rangle = A \langle \rangle \langle \rangle + B \langle \frown \rangle .$$

Por el contrario, en $\langle \searrow \nearrow \rangle$ vemos que sólo hay un cruce, pero éste tiene pendiente negativa. Como tiene pendiente negativa, cortaremos el cruce primero en horizontal, es

decir:

$$\langle \times \rangle = \langle \times \rangle = \langle \times \rangle = \langle \times \rangle = B \langle \smile \rangle .$$

A continuación, cortaremos el cruce en vertical:

$$\langle \times \rangle = \langle \times \rangle = \langle \times \rangle = \langle \times \rangle = A \langle \rangle \langle \rangle .$$

De esta forma llegamos a la segunda ecuación de la relación de madeja:

$$\langle \times \rangle = A \langle \smile \rangle + B \langle \rangle \langle \rangle .$$

Queremos comprobar si es un invariante, y como los movimientos de Reidemeister sabemos que no afectan al tipo de nudo, vamos a aplicar las hipótesis de partida para ver si afectan o no. En caso de que afecten, habría que imponer alguna condición.

El primer movimiento que veremos será el Tipo II. Vamos a descomponer el diagrama $\langle \times \rangle$, para ello elegiremos un cruce, en este caso empezaremos con el cruce de abajo. Este enlace tiene pendiente negativa, por tanto, cortaremos primero en horizontal y después en vertical.

Al cortar en horizontal llegamos a:

$$\langle \times \rangle = \langle \times \rangle = \langle \times \rangle = \langle \times \rangle .$$

Al cortar en vertical llegamos a:

$$\langle \times \rangle = \langle \times \rangle = \langle \times \rangle = \langle \times \rangle .$$

Es decir, tendríamos que:

$$\langle \times \rangle = A \langle \smile \rangle + B \langle \times \rangle$$

El segundo diagrama de esta igualdad ya lo sabemos descomponer, pues es la primera ecuación de la relación de madeja. Ahora, nos centraremos en cómo se descompone el diagrama $\langle \smile \rangle$. En este caso el cruce tiene pendiente positiva, así que lo que haremos será cortar primero en vertical y después en horizontal.

Al cortar en vertical llegamos a:

$$\langle \smile \rangle = \langle \smile \rangle = \langle \smile \rangle = \langle \smile \rangle .$$

Al cortar en horizontal llegamos a:

$$\langle \smile \rangle = \langle \smile \rangle = \langle \smile \rangle = \langle \smile \rangle .$$

Es decir, tendríamos que:

$$\langle \smile \rangle = A \langle \smile \rangle + B \langle \times \rangle .$$

En esta relación, el primer diagrama ya no se puede descomponer más, y para el segundo utilizaremos la segunda condición, es decir, la unión de un diagrama con el nudo trivial. Tendríamos entonces que:

$$\langle \times \rangle = C \langle \smile \rangle$$

Ya no podemos descomponer ningún otro diagrama, así que vamos a unir toda la información que acabamos de obtener de los diagramas en una ecuación:

$$\langle \check{X} \rangle = A\langle \check{Y} \rangle + B\langle \check{Z} \rangle = A[A\langle \check{W} \rangle + B\langle \check{V} \rangle] + B[A\langle \check{U} \rangle + B\langle \check{W} \rangle] = AA\langle \check{W} \rangle + ABC\langle \check{W} \rangle + BA\langle \check{U} \rangle + BB\langle \check{W} \rangle = [A^2 + ABC + B^2]\langle \check{W} \rangle + BA\langle \check{U} \rangle$$

Recordemos que lo que estamos estudiando es el comportamiento que tiene este polinomio respecto a los movimientos de Reidemeister de tipo II. Esto significa que a lo que queremos llegar es a $\langle \check{X} \rangle = \langle \check{U} \rangle$ para que no afecten estos movimientos. Para que esto ocurra, se tiene que verificar el siguiente sistema:

$$\begin{cases} A^2 + ABC + B^2 = 0 \\ BA = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C = -A^2 - A^{-2} \\ B = A^{-1} \end{cases}$$

Por tanto, teniendo en cuenta que $B = A^{-1}$ y $C = -A^2 - A^{-2}$ podemos reescribir las condiciones de la siguiente forma:

- $\langle \bigcirc \rangle = 1$ **Condición de normalización**
- $\langle K \cup \bigcirc \rangle = [-A^2 - A^{-2}]\langle K \rangle$
- $\begin{cases} \langle \check{X} \rangle = A\langle \check{U} \rangle + A^{-1}\langle \check{W} \rangle \\ \langle \check{X} \rangle = A\langle \check{W} \rangle + A^{-1}\langle \check{U} \rangle \end{cases}$ **Relación de madeja**

Como podemos ver, ahora los movimientos de Reidemeister de tipo II ya no afectan, sin embargo, también debemos estudiar qué ocurre con los de tipo III y tipo I.

Reidemeister de tipo III

$$\langle \check{X} \rangle = A\langle \check{U} \rangle + A^{-1}\langle \check{W} \rangle = A\langle \check{U} \rangle + A^{-1}\langle \check{W} \rangle = \langle \check{U} \rangle$$

Podemos observar que no hay ninguna incógnita, por tanto, el polinomio acepta los movimientos de Tipo III

Reidemeister Tipo I

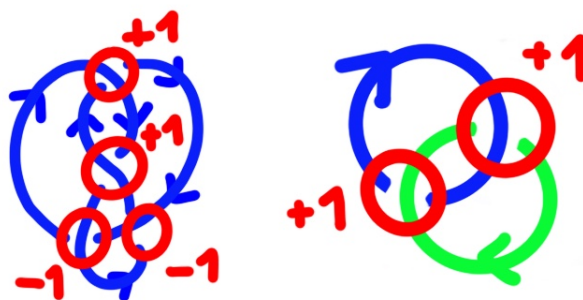
$$\langle \check{X} \rangle = A\langle \check{U} \rangle + A^{-1}\langle \check{W} \rangle = A\langle \check{U} \rangle + A^{-1}[-A^2 - A^{-2}]\langle \check{U} \rangle = -A^{-3}\langle \check{U} \rangle$$

Vemos que no se obtiene la igualdad porque depende de A^{-3} , sin embargo, no podemos hacer nada para solucionarlo. Por este motivo podemos afirmar que este polinomio no distingue entre los movimientos de Reidemeister de Tipo I, que como ya sabemos, no cambia la isotopía ambiental (y consecuentemente tampoco el tipo de nudo). Por tanto, el polinomio corchete de Kauffman no es un invariante puro, pues depende del diagrama.

Observación 1.30. Cuando estudiamos si dos nudos o enlaces son regularmente equivalentes, podríamos usar este polinomio, pero si son equivalentes, no nos servirá en muchas ocasiones.

Para solucionar este problema, vamos a definir el número de Writhe

Definición 1.31 (Writhe). Dado un diagrama K de un enlace orientado, definimos el número de Writhe $w(K)$ como la suma de los cruces positivos y negativos de todo el diagrama.



Como podemos observar en la imagen, los $+1$ y -1 se calculan igual que el *linking number*, con la diferencia de que no es la mitad de la suma, sino la suma, y que en el *linking number* sólo se cuentan los cruces entre componentes, mientras que aquí se consideran todos los cruces.

Deberemos notar que:

- En un nudo, el valor $w(K)$ no cambia si variamos la orientación.
- En un enlace, el valor $w(K)$ cambia si variamos la orientación de una de las componentes.

Como el número de Writhe tiene en cuenta los cruces consigo mismo, va a tener en cuenta los movimientos de Reidemeister de Tipo I. Con este nuevo concepto se crea un nuevo polinomio, el polinomio de Kauffman.

Definición 1.32 (Polinomio de Kauffman). Dado un diagrama K de un nudo o enlace, definimos el polinomio de Kauffman X como $X(K) = (-A^3)^{-w(K)}\langle K \rangle$.

Observación 1.33. En el caso de trabajar con nudos orientados habría una diferencia mínima que afecta a los movimientos de Reidemeister de Tipo I, que sería $\langle \mathcal{L} \rangle = -A^{\pm 3}\langle \text{---} \rangle$ en función de la orientación.

Teorema 1.34. *El polinomio de Kauffman es un invariante para nudos (independientemente de su orientación) y para enlaces orientados*

Demostración. Para demostrar que es un invariante tenemos que ver que no le afectan los movimientos de Reidemeister.

Recordemos que $X(K) = (-A^3)^{-w(K)}\langle K \rangle$. Nos va a interesar estudiar qué ocurre con $\langle K \rangle$ y con $-w(K)$.

- Reidemeister Tipo I Para ver qué ocurre en este caso, empezaremos calculando el número de Writhe asociado a las dos posibilidades que hay



Como podemos observar en la imagen, sea $w(K) = 1$ o $w(K) = -1$, al deshacer el movimiento de Reidemeister obtenemos $w(K) = 0$, es decir, el número de Writhe cambia cuando pasamos de un diagrama a otro. No obstante, sabemos que el polinomio corchete de Kauffman en este caso es $\langle K \rangle = \langle \mathcal{L} \rangle = -A^{\pm 3} \langle \text{---} \rangle$. El polinomio de Kauffman sería:

Si $w(K) = -1$

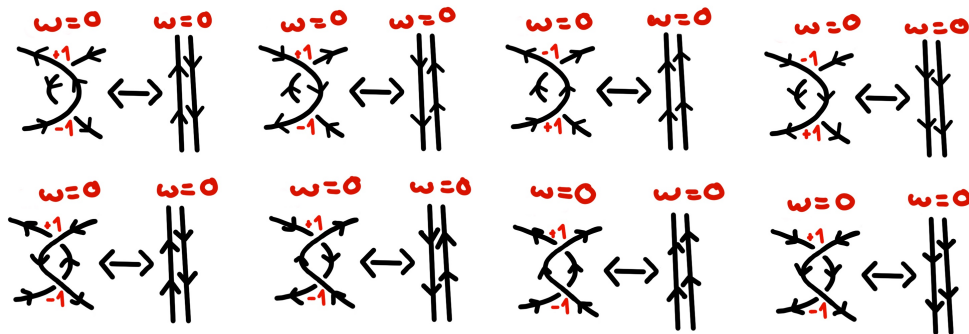
$$X(K) = (-A^3)^{-w(K)} \langle K \rangle = (-A^3)^1 (-A^{-3}) \langle \text{---} \rangle = \langle \text{---} \rangle .$$

Si $w(K) = 1$

$$X(K) = (-A^3)^{-w(K)} \langle K \rangle = (-A^3)^{-1} (-A^3) \langle \text{---} \rangle = \langle \text{---} \rangle .$$

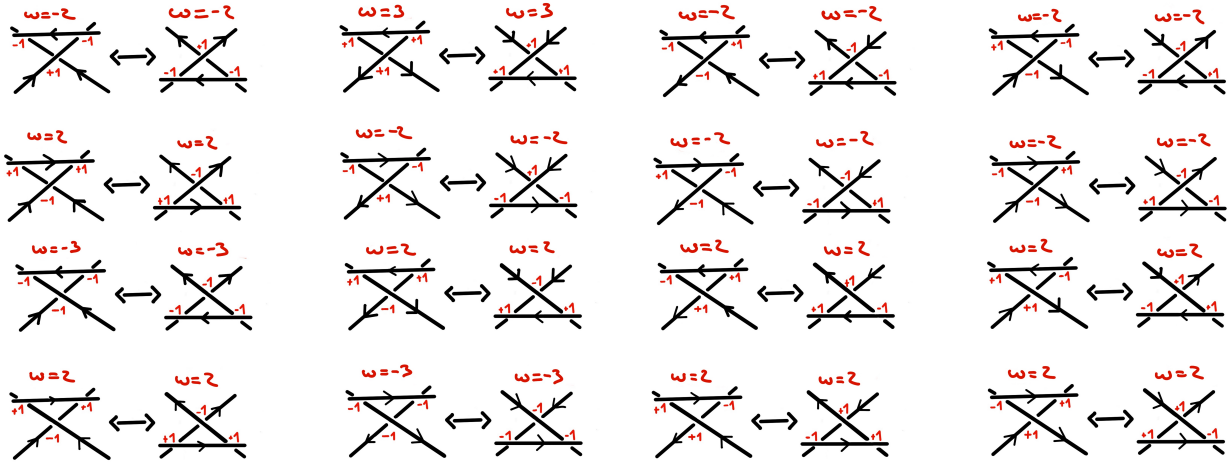
Por tanto, este polinomio es un invariante para los movimientos de tipo I.

- Reidemeister Tipo II Sabemos que al polinomio corchete no le afectan este tipo de movimientos. Veremos qué ocurre con el número de Writhe en estos casos:



El número de Writhe tampoco varía, por lo tanto, es un invariante para los movimientos de tipo II.

- Reidemeister Tipo III Sabemos que al polinomio corchete no le afectan este tipo de movimientos. Veremos qué ocurre con el número de Writhe en estos casos:



El número de Writhe tampoco varía, por lo tanto, es un invariante para los movimientos de tipo III.

El polinomio de Kauffman distingue los tres movimientos de Reidemeister, por tanto, sí es un invariante. □

Observación 1.35. El polinomio de Kauffman permite distinguir entre todos los nudos de 6 cruces o menos.

Como mencionamos antes, el origen del polinomio de Kauffman es una aproximación del polinomio de Jones. Como cabe esperar, se puede pasar de uno a otro de forma muy sencilla. Para obtener el polinomio de Jones nos bastará con sustituir $A = t^{-1/4}$.

Para terminar veremos algunos ejemplos del polinomio corchete de Kauffman:

Ejemplo 1.36.

$$\langle \bigcirc \cup \bigcirc \rangle = [-A^2 - A^{-2}] \langle \bigcirc \rangle = [-A^2 - A^{-2}]$$

Ejemplo 1.37.

$$\langle \infty \rangle = A \langle \bigcirc \cup \bigcirc \rangle + A^{-1} \langle \bigcirc \rangle = A[-A^2 - A^{-2}] + A^{-1} = -A^3 - A^{-1} + A^{-1} = -A^3$$

Ejemplo 1.38.

$$\langle \odot \rangle = A \langle \bigcirc \rangle + A^{-1} \langle \bigcirc \cup \bigcirc \rangle = A + A^{-1}[-A^2 - A^{-2}] = A - A - A^{-3} = -A^{-3}$$

Una vez visto cómo se calcularía el polinomio corchete de algunos nudos básicos, vamos a ver un último ejemplo en el que se comparan el polinomio corchete de Kauffman con el polinomio de Kauffman

Ejemplo 1.39 (Nudo de Trébol).

- Polinomio corchete de Kauffman

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{G} \rangle &= A \langle \mathcal{U} \rangle + A^{-1} \langle \mathcal{D} \rangle = A[A \langle \mathcal{S} \rangle + A^{-1} \langle \mathcal{V} \rangle] + A^{-1}[A \langle \mathcal{D} \rangle + \\ &A^{-1} \langle \mathcal{D} \rangle] = A^2[-A^2 - A^{-2}] \langle \infty \rangle + 2 \langle \infty \rangle + A^{-2} \langle \mathcal{C} \rangle = \langle \mathcal{G} \rangle = -A^3 A^2[-A^2 - \\ &A^{-2}] - 2A^3 - A^{-2} A^3 = A^7 + A^3 - 2A^3 - A^{-5} = A^7 - A^3 - A^{-5} \end{aligned}$$

- Polinomio de Kauffman

$$X \langle \mathcal{G} \rangle = (-A^3)^3 (A^{-3} - A^{-5}) = -A^{16} + A^{12} + A^4$$

Capítulo 2

Teoría de Enredos

La teoría de enredos es una forma muy útil de aplicar la teoría de nudos a la vida real. Lo que haremos será considerar una porción de un nudo y, en una zona concreta, introducir una esfera, \mathbb{S}^2 , de forma que el nudo quede cortado por 4 puntos distintos y proyectarlos sobre un plano.

Definición 2.1 (Enredo). Un enredo es la proyección de dos cuerdas enredadas sobre un plano. Se representan en el interior de una bola, de forma que, los extremos de las dos cuerdas se encuentran dirigidos en las direcciones $\{NO, NE, SO, SE\}$.



Observación 2.2. En algunos contextos, en lugar de usar la palabra enredo se usa la palabra ovillo, aunque no sea lo más habitual.

Podemos observar que, como se mencionaba anteriormente, un enredo se podría considerar un trozo de un nudo al que le hemos cortado una sección de él mismo a través de una esfera, quedando fijos sus extremos. Para visualizar el nudo asociado a dicho enredo, bastaría con unir los extremos dos a dos.



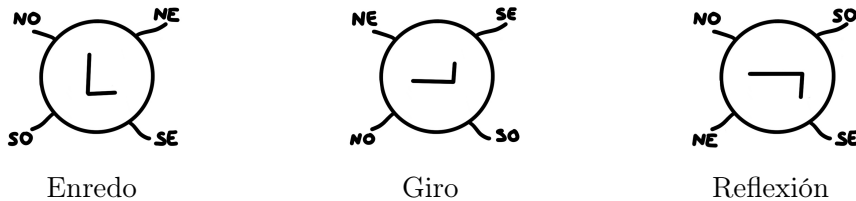
Al igual que en teoría de nudos, diremos que dos enredos son equivalentes cuando se puede pasar de uno al otro utilizando los conocidos movimientos de Reidemeister, de forma que los extremos estén fijos en todo momento. Es decir, sólo se podrá mover lo que haya en el interior de la esfera, dejando fija la frontera.

A continuación, tenemos un ejemplo de dos enredos que son equivalentes



Como podemos observar, al aplicar tres movimientos de Reidemeister de tipo I en determinados puntos, llegaremos a obtener dos enredos exactamente iguales.

Una forma muy útil de representar un enredo es denotando por L a todo lo que hay en el interior de la esfera, y dibujando los extremos como cuatro segmentos de cuerda que salen de ella. Por facilidad de interpretación, se escribirán en los extremos $\{NO, NE, SO, SE\}$, según su orientación, sin embargo, esto no sería necesario.



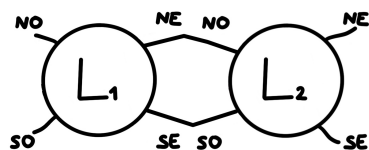
En la primera imagen podemos observar un enredo con la representación que acabamos de mencionar. En la segunda imagen, podemos ver el enredo rotado, y en la tercera, una reflexión sobre el eje $NO - SE$. Esta última va a ser necesaria para la explicación de una de las operaciones matemáticas que vamos a ver a continuación.

Teniendo en cuenta esta notación, vamos a definir las cuatro operaciones más importantes que se pueden hacer con los enredos. Destacando la importancia del numerador para la parte de Biología.

- Suma de enredos

Tenemos dos enredos L_1 y L_2 , y unimos los extremos del este de L_1 con los del oeste de L_2 , es decir:

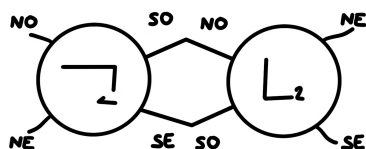
1. Unir el extremo NE de L_1 con el extremo NO de L_2 .
2. Unir el extremo SE de L_1 con el extremo SO de L_2 .



■ Multiplicación de enredos

Tenemos dos enredos L_1 y L_2 y hacemos una reflexión del primer enredo con respecto a $NO - SE$. Una vez hecho esto, sumamos los dos enredos, es decir:

1. Unir el extremo SO de L_1 con el extremo NO de L_2 .
2. Unir el extremo SE de L_1 con el extremo SO de L_2 .



■ Numerador de un enredo

Tenemos un enredo L y unimos los extremos del norte por un lado, y los del sur por el otro, es decir:

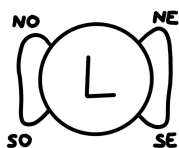
1. Unir sus extremos NO y NE .
2. Unir sus extremos SO y SE .



■ Denominador de un enredo

Tenemos un enredo L y unimos los extremos del este por un lado, y los del oeste por el otro, es decir:

1. Unir sus extremos NO y SO .
2. Unir sus extremos NE y SE .



Vamos a ver estas dos últimas operaciones con un ejemplo de un enredo sin simplificar, como sería:



Al realizar el numerador y el denominador, vemos que el resultado no es necesariamente un nudo, sino que puede ser un enlace:



Ahora que ya sabemos lo básico de los enredos, vamos a mencionar los tipos que existen:

- Enredo racional: Enredo equivalente al enredo trivial cuando las cuerdas se desplazan sobre toda la frontera (por tanto, los extremos no están fijos, pero nunca se pueden mover por el interior). Este tipo concreto de enredos es muy importante, por tanto se explicará con detalle a continuación.
- Enredo localmente anudado: Son enredos que presentan una hebra anudada y la otra libre.
- Enredos primos: Son aquellos que no son ni localmente anudados ni racionales.



Enredo racional

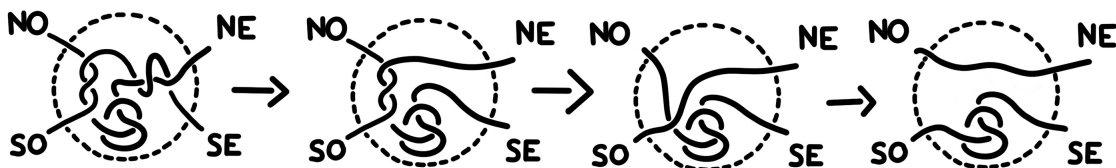


Enredo Loc. Anudado



Enredo Primo

Vamos a comprobar que el último ejemplo es precisamente un enredo primo. Para ello, vamos a analizarlo y ver que no es ni un enredo racional ni un enredo localmente anudado.



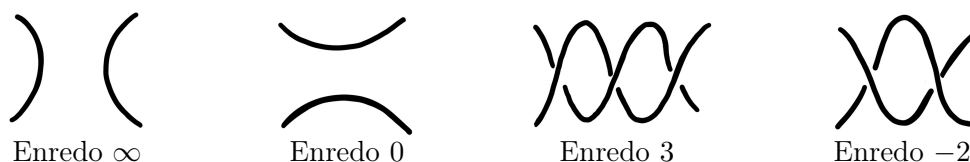
En la imagen podemos ver que si nos desplazamos por la frontera, no llegamos a dos cuerdas libres, sino a un nudo localmente anudado, y por ello no es un enredo racional. Tampoco se trata de un enredo localmente anudado, pues el enredo de partida no lo es. Por tanto, es un enredo primo.

Como se dijo antes, los enredos racionales son especiales y por ello, vamos a explicarlos con detalle. Lo que haremos será ver cómo se puede construir un enredo de este tipo.

Vamos a suponer ahora una esfera en donde los extremos pueden moverse por la superficie de ésta, mientras que, el resto del enredo permanece siempre en el interior.

Definición 2.3. Llamamos enredo racional a un enredo que, mediante movimientos sobre la superficie de la esfera, se deforma en dos líneas rectas.

Un enredo racional se construye a base de ir concatenando series de torsiones.



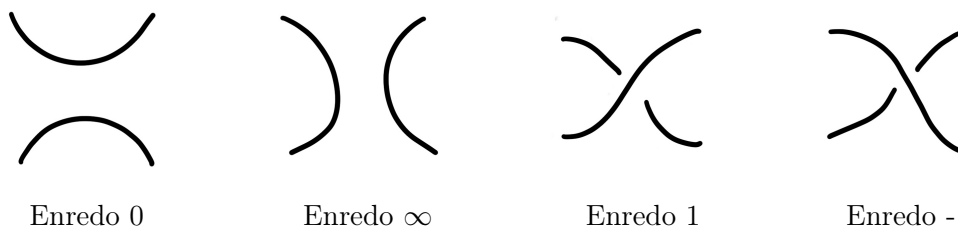
El número que llevan asociado representa el número de cruces que tiene el diagrama. Este tipo de cruces reciben el nombre de torsión.

El signo representa la pendiente. Cuando la hebra que pasa por delante tiene pendiente positiva, lleva un más. Y cuando la pendiente es negativa, lleva un menos.

Teorema 2.4. A todo enredo racional se le puede asociar un vector $(a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{R}^n$ de forma que se cumplan las siguientes tres condiciones:

- $|a_1| > 1$
- El vector tiene que estar constituido al menos por dos valores, es decir, $n \geq 2$.
- $a_1, \dots, a_n \neq 0$

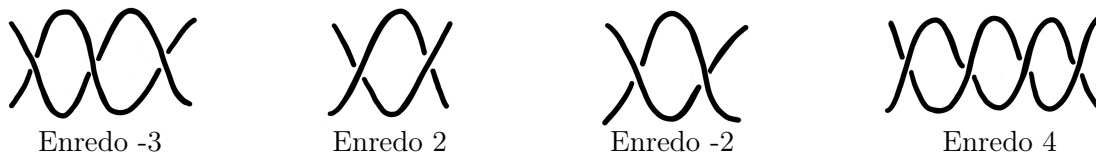
Este teorema se debe verificar siempre, con la excepción de 4 casos, que son los siguientes:



Para ver cómo se debe hacer la construcción de un enredo racional, vamos a construir un vector y explicarlo paso a paso. El vector que construiremos será el $(-3, 2, -2, 4)$. En

donde tendremos en cuenta que si hay un número par de enredos se parte del enredo ∞ y si hay un número impar, se parte del enredo 0. En este caso es un número par:

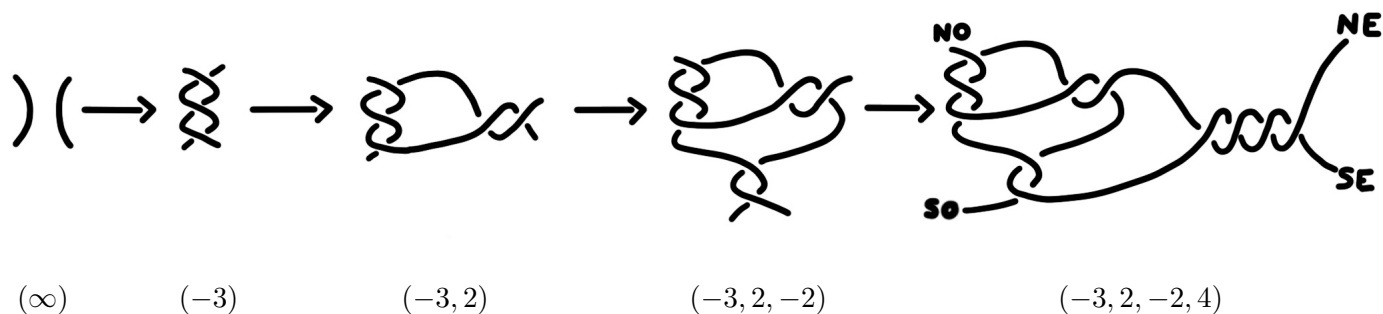
Consideraremos las torsiones que necesitamos para nuestro enredo,



Ahora pondremos en vertical el Enredo -3 y el Enredo -2.



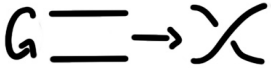
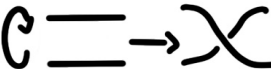
Lo que haremos será formar el enredo -3V a partir del enredo ∞ . Luego añadimos a la derecha en horizontal el enredo 2. Seguidamente, por debajo, unimos el enredo -2 en vertical, es decir, el -2V y para terminar, añadimos el enredo 4 a la derecha en horizontal.



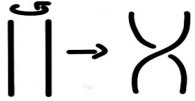
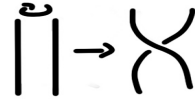
Teorema 2.5. *Dos enredos racionales son iguales si tienen el mismo vector asociado.*

Vamos a ver ahora esto de forma más técnica. Lo primero que haremos será definir dos nuevos términos, basándonos en la idea de que un enredo entero es una torsión:

Definición 2.6 (Enredo entero horizontal). Un enredo entero horizontal (t_a) es la torsión de las hebras a veces en posición horizontal.

- a positivo:  Pendiente positiva
- a negativo:  Pendiente negativa

Definición 2.7 (Enredo entero vertical). Un enredo entero vertical (t'_a) es la torsión de las hebras a veces en posición vertical

- a positivo:  Pendiente positiva
- a negativo:  Pendiente negativa

Como ya sabemos, hemos definido un tipo de suma. Sin embargo, podemos dividir la suma en dos operaciones distintas en función de si el enredo lo vamos a sumar a la derecha o debajo, en donde $+$ indica la suma a la derecha y $+'$ la suma debajo. Teniendo esto en cuenta, se verifica el siguiente resultado:

$$t_a + t_b := t_{a+b}$$

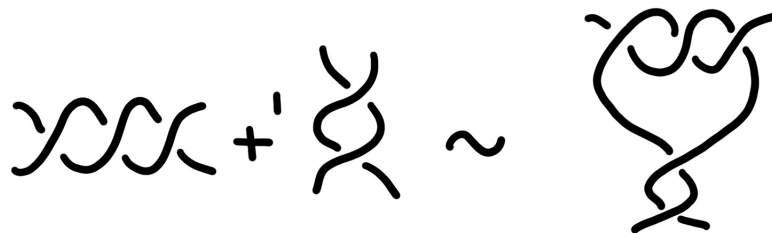
$$t'_a +' t'_b := t'_{a+b}$$

Vamos a formalizar el concepto de enredo racional. Para hacer esto, tenemos que tener mucho cuidado con estas operaciones, pues $t_a + t'_b$ es una cosa y $t_a +' t'_b$ es otra muy distinta. Para que quede clara la diferencia, vamos a ver un ejemplo:

Si hacemos $t_3 + t'_2$ tendríamos:



Si hacemos $t_3 +' t'_2$ tendríamos:



Teorema 2.8. *Un enredo racional es aquel que se puede construir con n enredos enteros. Es decir, es un enredo que se construye a base de hacer torsiones. Denotaremos por B_i al enredo que vamos obteniendo en cada paso hasta llegar a B_n en donde Ta_i, \dots, Ta_n son todas las torsiones de forma que para cada i , $Ta_i = t a_i$ o $Ta_i = t' a_i$.*

- *Paso 1:* $Ta_1 = B_1$.
- *Paso 2:* $k < n$.
 - $Ta_{k+1} = ta_{k+1}$

$$B_{k+1} = ta_{k+1} + B_k$$

$$B_{k+1} = B_k + ta_{k+1}$$
 - $Ta_{k+1} = t'a_{k+1}$

$$B_{k+1} = t'a_{k+1} + B_k$$

$$B_{k+a} = B_k + t'a_{k+1}$$

Sabemos que dos enredos racionales son equivalentes si tienen el mismo vector asociado, aunque hay casos en los que son equivalentes pero al aplicar alguna isotopía ambiental no tienen el mismo vector. Para solucionar este problema se define un nuevo invariante basado en las coordenadas de los vectores.

Definición 2.9 (Fracción continua). Dado un enredo racional (a_1, \dots, a_n) definimos la fracción continua como:

$$a_n + \frac{1}{a_{n-1} + \frac{1}{\ddots + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_1}}}}$$

Teorema 2.10 (Conway 1970). *Dos enredos racionales son equivalentes si y solo si sus fracciones continuas asociadas coinciden.*

Demostración. Ver [17].

□

Ejemplo 2.11.

La fracción continua de $(-3, 2, -2, 4)$ sería $4 + \frac{1}{-2 + \frac{1}{2 + \frac{1}{-3}}} = 4 - \frac{5}{7} = \frac{23}{7}$

La fracción continua de $(3, -2, 2, -4)$ sería $-4 + \frac{1}{2 + \frac{1}{-2 + \frac{1}{3}}} = -4 + \frac{5}{7} = -\frac{23}{7}$

Las dos fracciones continuas son distintas, por tanto estos dos enredos no son equivalentes.

Capítulo 3

Teoría de Nudos y Biología

El ADN es una molécula que se encuentra en las células y contiene la información genética necesaria para su desarrollo y funcionamiento. Está formada por dos cadenas de nucleótidos complementarias y antiparalelas unidas una a la otra. Estas dos cadenas se enrollan, formando una estructura de doble hélice, que se puede encontrar de forma lineal o circular.

En este capítulo nos centraremos en la relación que existe entre la teoría de nudos y enredos con el ADN de los virus, bacterias y mitocondrias de las células humanas, en las cuales el ADN suele ser circular.

El comienzo del estudio geométrico-topológico del ADN quedó marcado por el descubrimiento de que el virus de Polioma, virus que provoca cáncer en ratones, tiene ADN con estructura circular. En 1963, se vio que si se centrifugaba su ADN, éste se separaba en 3 componentes en función de la velocidad de sedimentación. Dado que estas moléculas tenían el mismo peso molecular, se llegó a la conclusión de que debería existir alguna diferencia estructural que justificase esta separación debido a la centrifugación. Además, se descubrió también que se presentaba de dos formas: superenrollada y relajada.

Al ver que ocurría esto último, se buscó una forma de medir el superenrollamiento que presentaba el ADN. Para hacerlo, se tenía en cuenta que las dos cadenas del ADN, son, en realidad, dos curvas en \mathbb{R}^3 que no se intersecan entre ellas. Además, cuando el ADN es circular, tendremos que dichas curvas son cerradas. De esta forma, se acabó llegando a la Fórmula de Calugareanu-White:

$$Lk = Tw + Wr$$

Esta fórmula está formada por tres elementos, que se calculan utilizando teoría de curvas sobre las que no entraremos en detalle, simplemente las describiremos de la siguiente forma utilizando la notación de la asignatura *Curvas y Superficies*:

- Lk es el número de enlace, que nos da el valor asociado al superenrollamiento de las hebras.

$$Lk(C_1, C_2) = \frac{1}{4\pi} \int_{C_1} \int_{C_2} \frac{(y(\sigma) - x(s)) \cdot (y'(\sigma) \times x'(s))}{|y(\sigma) - x(s)|^3} d\sigma ds$$

Esta integral apareció por primera vez gracias a un estudio que realizó Gauss entre la órbita de la Tierra y de un asteroide.

- Tw es el *twist*, que mide el número de giros completos que da una hebra de ADN alrededor del eje central.

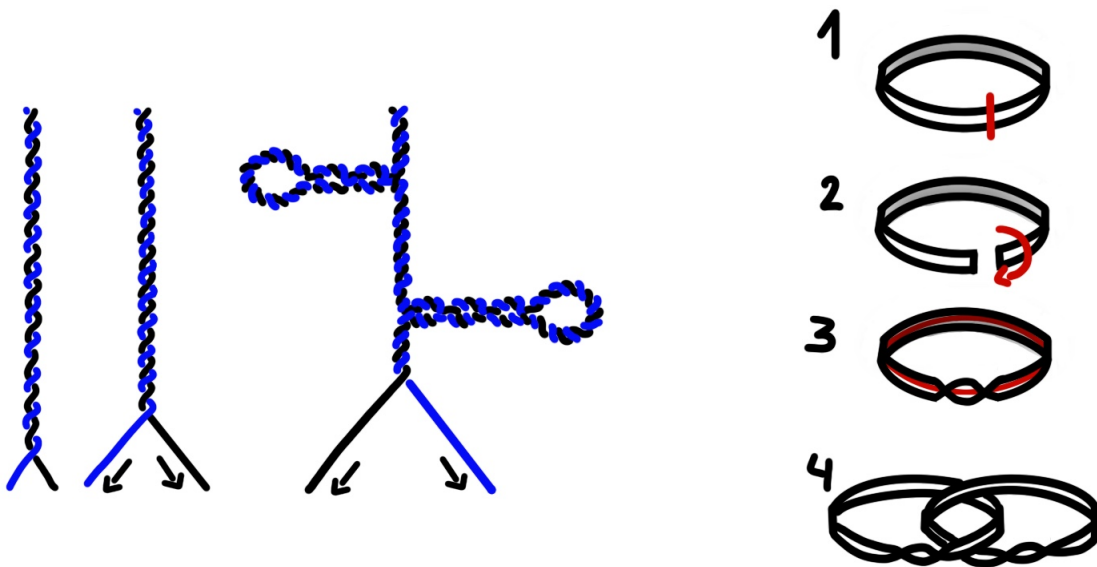
$$Tw = \frac{1}{2\pi} \int_0^L u_3(s) ds$$

- Wr es la integral de Writhe, que nos da el número de retorcimiento de una de las curvas, es decir, mide cómo se enrolla el eje central alrededor de sí mismo.

$$Wr(C_1) = \frac{1}{4\pi} \int_{C_1} \int_{C_1} \frac{(x(\sigma) - x(s)) \cdot (x'(\sigma) \times x'(s))}{|x(\sigma) - x(s)|^3} d\sigma ds$$

Como se pudo ver en el primer capítulo, Lk y Wr se pueden calcular con los diagramas planos también, simplemente se trata de dos técnicas distintas.

El proceso de replicación del ADN se podría considerar el proceso más importante de toda la división celular porque se trata del momento en el que se produce la duplicación del material genético. Para poder realizarlo, las dos cadenas se van separando imitando el movimiento que sigue una cremallera. Durante este proceso, puede haber obstrucciones:



Podemos ver en la imagen dos tipos de obstrucciones:

- Al realizar el movimiento de abrir como una cremallera podemos llegar a unos bucles en donde puede haber problemas para leer la información. En concreto, en la imagen se representa un superenrollamiento negativo, $Lk < 0$, pues si nos fijamos podemos observar que la molécula se retuerce sobre sí misma en una superhélice hacia la derecha (si fuese hacia la izquierda diríamos que sigue un superenrollamiento positivo, $Lk > 0$). En la mayoría de seres vivos predomina el negativo.
- Cuando se corta el ADN circular para poder empezar a leer la información, éste puede rotarse y, al separar las dos cadenas, en lugar de obtener dos cadenas disjuntas, se obtendría un enlace.

TOPOISOMERASAS:

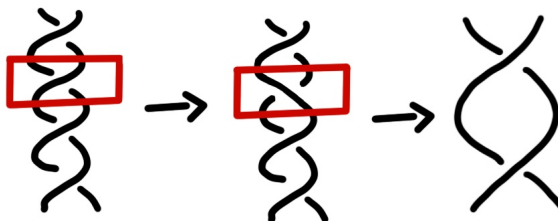
Para solucionar estos problemas lo que se hace es, en el primer caso desenrollar la cadena antes de llegar al lugar de replicación. Y en el segundo, para evitar enlaces, hay unas enzimas encargadas de cortar y pegar. Estas enzimas se llaman topoisomerasas, y son las encargadas de simplificar la topología del ADN de las moléculas con el fin de facilitar el proceso de reproducción celular.

Cuando actúan las Topoisomerasas se cambia la estructura del ADN haciendo que pase de un forma superenrollada a una relajada. Al hacer esto, como se puede intuir, cambia el

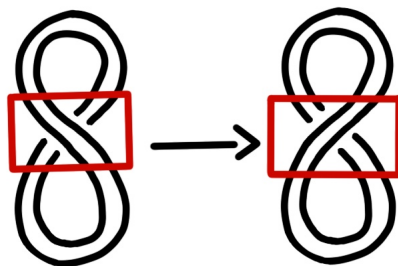
Lk correspondiente.

Existen dos tipos de Topoisomerasas:

- Topoisomerasa de tipo I: Cortan una cadena de la doble hélice y hacen que la otra pase a través de ésta para, finalmente, volver a unir los extremos. Al hacer esto, se deshace una vuelta completa, por tanto cambia el valor de Lk en ± 1 .



- Bacterianas: Son capaces de relajar el superenrollamiento negativo (+1)
 - Eucariotas: Son capaces de relajar el superenrollamiento positivo (-1) y negativo (+1)
- Topoisomerasa de tipo II: Cortan ambas cadenas de la doble hélice de ADN y pasan la otra doble hélice por el hueco para, finalmente, unir los extremos. Al hacer esto, cambia el valor de Lk en ± 2 .



- Bacterianas: Son capaces de relajar el superenrollamiento negativo (+2) e introducir el superenrollamiento negativo (-2)
- Eucariotas: Son capaces de relajar el superenrollamiento positivo (-2) y negativo (+2)

En 1976, Wang y sus colaboradores trabajaban en un experimento con una molécula circular de ADN sobre la que actuaba la topoisomerasa de tipo I. Se vio que daba lugar a una molécula que sedimentaba más rápido. Cuando analizaron las fotografías, descubrieron

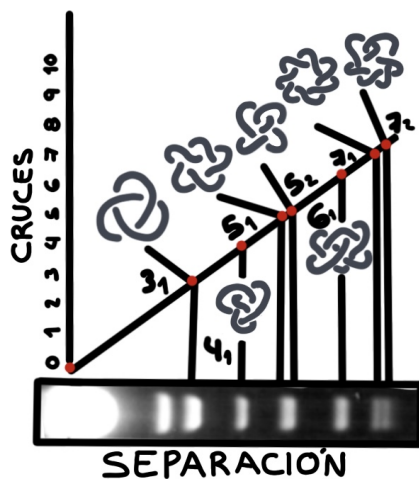
que el ADN estaba anudado.

A día de hoy todavía no existen métodos para poder observar las enzimas en acción, y lo que se hace es analizar la molécula antes (sustrato) y después (producto) de que actúe la enzima para poder deducir el comportamiento de ésta.

Los nudos son tan pequeños que, generalmente, aunque usemos microscopía electrónica, no somos capaces de aislar una molécula individual de ADN porque hay demasiadas moléculas como para poder usar este método de forma eficaz. Al no ser capaces de aislarla, tampoco podremos analizarla.

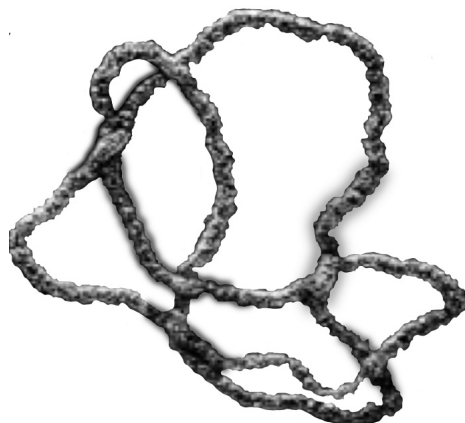
Para detectar los cambios que se producen por la enzima, usamos una molécula de ADN circular (pues si fuese lineal, podría desanudarse con el movimiento de la célula). Se crean *in vitro* moléculas sustrato de ADN con la forma deseada y dejamos actuar a la enzima. Una vez hecho esto, llevamos a cabo dos pasos:

- Electroforesis por gel de agarosa: El ADN circular (nudo trivial) se inyecta en un recipiente rectangular con un campo eléctrico cerca del polo negativo. Como el ADN tiene carga negativa, provoca que las moléculas se vayan alejando. El gel forma una barrera porosa a través de la cual, las moléculas de ADN más compactas viajan a más velocidad. En 1996, A. Stasiak demostró que la migración de un nudo en un gel de agarosa es casi lineal con el número de cruces de su configuración ideal. Esta migración da lugar a una banda en la que se van agrupando los nudos del mismo tipo.

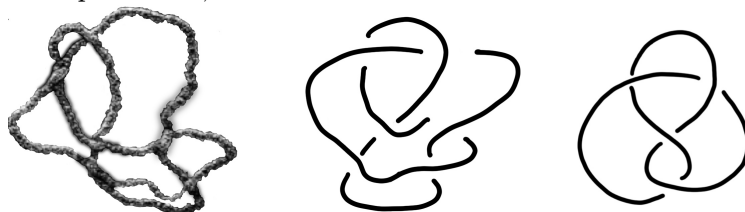


El número en grande representa los cruces mínimos de nudo, y el subíndice no tiene significado ninguno, simplemente es un índice que sirve para poder ordenar los distintos tipos de nudo. Se puede ver también en la banda antes mencionada que la mayoría de los nudos obtenidos al realizar el experimento son el nudo trivial, es decir, no han reaccionado.

- Microscopía electrónica: Al ADN se le añade una proteína conocida como proteína REC A y se observa con microscopio. Esta proteína se une al ADN haciendo que éste se expanda, endurezca y estire, facilitándonos así una proyección del nudo que nos permite analizar el producto obtenido.

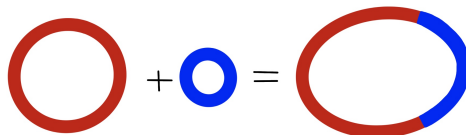


En esta imagen podemos ver un ejemplo de cómo sería una imagen obtenida por microscopía. Cuando vemos esta imagen, nos damos cuenta de que realmente tiene la forma de un nudo, más en particular, la forma del nudo 6_2 .



Recombinasas

La recombinación específica *in situ* es una forma que presenta la naturaleza de poder cambiar el código genético de un organismo moviendo un fragmento de ADN a otra posición o insertando un nuevo fragmento de ADN ajeno (esto último es vital en los virus puesto que es la forma que tienen de poder infectar a las células).



Para llevar a cabo el proceso de recombinación específica *in situ* se necesita una secuencia única y corta de ADN y una enzima que recibe el nombre de recombinasa. La enzima recombinasa se encarga de reorganizar la secuencia de bases de ADN que se encuentran expuestas a la acción de las enzimas.

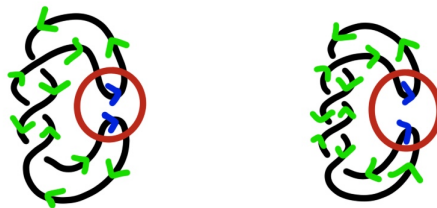
Existen dos tipos de recombinación:

- Recombinación procesiva: El proceso anterior solo ocurre una vez.
- Recombinación distributiva: Nada más liberar el producto, la enzima se une de nuevo y vuelve a reaccionar.

Por norma general, las enzimas sólo son capaces de seguir uno de estos dos tipos de recombinación. Sin embargo, las enzimas que participan en la recombinación específica in situ suelen realizar tanto la procesiva como la distributiva.

Otra característica muy importante de las enzimas recombinasas es el tipo de repetición, que puede ser de dos formas. Para ver esto vamos a dotar con una orientación al nudo:

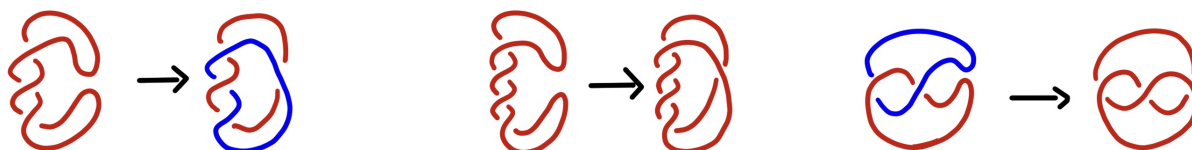
- Repetición directa: La orientación del nudo coincide con la orientación local dentro de la región en la que se produce la recombinación.
- Repetición invertida: Las orientaciones local y la del nudo son opuestas



En las imágenes anteriores, representamos la enzima como una circunferencia roja. La orientación local es la que existe dentro de la región en la que actúa la enzima, que está representada en color azul. En verde está la orientación del nudo. Como podemos ver en la imagen de la izquierda, estas dos orientaciones coinciden, por tanto se trata de una repetición directa. Sin embargo, en la imagen de la derecha las orientaciones no coinciden, se trata entonces de una repetición invertida.

Cuando trabajamos en recombinaciones procesivas se pueden dar las siguientes situaciones:

- Si ocurre sobre sustrato circular con repetición directa. Pasamos de un nudo a un enlace.
- Si ocurre sobre sustrato circular con repetición invertida. Pasamos de un nudo a otro nudo
- Si ocurre sobre un enlace. Pasamos de un enlace a un nudo



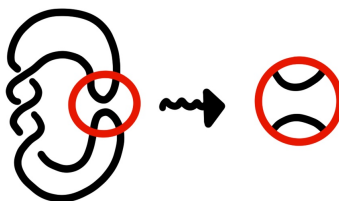
Cuando trabajamos en recombinaciones distributivas (el proceso ocurre varias veces) hay un resultado que debemos tener en cuenta, y es que si trabajamos sobre sustrato circular que presenta repetición directa, se pueden dar dos situaciones:

1. Cuando tenemos un número impar de recombinaciones, el nudo pasa a ser un enlace.
2. Cuando tenemos un número par de recombinaciones, el nudo sigue siendo un nudo

Si en lugar de trabajar sobre sustrato circular, lo hacemos sobre un enlace, al igual que en el caso de recombinación procesiva, nuestro producto será un nudo.

La TN3 Resolvasa es un tipo de recombinasa. Se trata de una enzima catalizadora para la recombinación específica in situ en sustratos de ADN circular (es decir, en un nudo), que presenta repetición directa. Aquí aplicaremos el resultado anteriormente mencionado.

Cuando hacemos la representación de la unión de un fragmento de ADN con la Resolvasa, podemos observar que existe una analogía con un enredo. La enzima hace la función de S^2 , y corta el ADN (nudo) por cuatro extremos. Esto se puede ver gráficamente en la siguiente ilustración:



Llamaremos complejo sináptico al conjunto resultante del fragmento de ADN con la enzima, y sinaptosoma a la parte que queda dentro de nuestra enzima (parte que más nos interesa y con la que trabajaremos puesto que es un enredo). En la imagen anterior, el dibujo de la izquierda sería el complejo sináptico, y el de la derecha el sinaptosoma, que siempre se representará a partir de ahora como un enredo dentro de una circunferencia de color rojo.

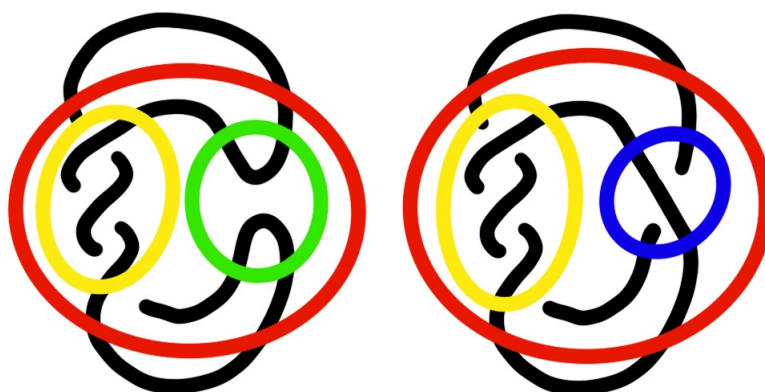
3.1. Modelo de Ovillos

Para el estudio de la acción de la TN3- Resolvasa, Ernst y Sumners crearon un nuevo modelo matemático que tendría una equivalencia en el laboratorio. En laboratorio, ésta

consistía en fijar un sustrato circular no anudado creado *in vitro* con la forma deseada y dejar que la enzima actuase varias veces. El modelo hace predicciones del tipo de nudo que debería salir, algo que se comprueba posteriormente en laboratorio. Este modelo recibe el nombre de *Modelo de Ovillos* y, explica la acción de la TN3-Resolvasa basándose en la idea de que se puede deducir el funcionamiento de una enzima si se conocen el sustrato y el producto.

A partir de ahora se va a suponer que la enzima actúa sobre "todo" el nudo, de forma que lo único que no quede dentro del sinaptosoma sean porciones de cuerda que sólo unen los extremos del enredo. Es decir, si se unen los extremos de arriba por un lado y los de abajo por el otro (si hacemos el numerador) del enredo, obtendríamos el nudo en su totalidad.

Para poder estudiar esto, dividiremos el sinaptosoma en dos partes, una parte invariante (sobre la que no realiza cambios la enzima) y otra variante (antes de que actúe la enzima tiene una forma, y después otra). En este modelo, como hemos dicho, vamos a demostrar el funcionamiento de la TN3-Resolvasa, observando el sustrato y el producto. Por este motivo, estudiaremos un sinaptosoma inicial, y el sinaptosoma de su producto y consideraremos 3 partes dentro del sinaptosoma:



1. Parte invariante del sinaptosoma (Ob), representada en amarillo
2. Parte que varía con la enzima antes de que actúe (Op), representada en verde
3. Parte que varía con la enzima después de que actúe (OR), representada en azul

Podemos comprobar que de una molécula de sustrato circular obtenemos dos ecuaciones de recombinación con tres incógnitas. Para ello, nos basamos en la idea de que para obtener el sustrato o producto, lo único que necesitaremos es hacer el numerador del sinaptosoma correspondiente a cada uno de los casos.

Resolveremos por tanto el siguiente sistema:

- Sustrato = $N(O_b + O_p)$.
- Producto = $N(O_b + O_R)$.

Una vez conocido esto, vamos a presentar el modelo de Ernst y Summers. Como mencionamos antes, vamos a partir de un sustrato circular, es decir, partimos de un nudo trivial sobre el que actuará la enzima. Para poder realizar este experimento, vamos a hacer tres suposiciones:

1. El comportamiento de las enzimas es constante.
2. Actúan independientemente de la topología del sustrato.
3. La recombinación ocurre en su totalidad en el sinaptosoma.

Como ya sabemos, la TN3-Resolvasa tiene repetición directa, por tanto partiremos del nudo trivial y obtendremos un enlace en la primera recombinación. En la segunda, obtendremos un nudo y así hasta la cuarta. El resultado de que actúe esta enzima etapa a etapa es el siguiente:



Nudo Trivial

Enlace Hopf

Nudo de 8

Enl. Whitehead

Nudo 6₂

Los siguientes resultados están comprobados experimentalmente en laboratorio, aunque después de enunciarlos, veremos gráficamente que es cierto que sí se obtienen esos diagramas:

Teorema 3.1. *Si O_p , O_b y O_R satisfacen*

- $N(O_b + O_p) = \text{Nudo Trivial}$;
- $N(O_b + O_R) = \text{Enlace de Hopf}$
- $N(O_b + O_R + O_R) = N(O_b + 2O_R) = \text{Nudo de Ocho}$,

se verifica que

$$\{O_b, O_R\} \in \{ \{(-3, 0), (1)\}, \{(3, 0), (-1)\}, \{(2, 3, 1), (-1)\}, \{(-2, -3, -1), (1)\} \}.$$

Teorema 3.2. Si además, $N(Ob + 3OR) = \text{Enlace de Whitehead}$, entonces:

1. $N(Ob + 4OR) = \text{Imagen especular del nudo } 6_2, 6_2^*$;
2. $\{Ob, OR\} = \{(-3, 0), (1)\}$.

Veamos la construcción cuando se hace el numerador de las 3 primeras recombinaciones si $\{Ob, OR\} = \{(-3, 0), (1)\}$

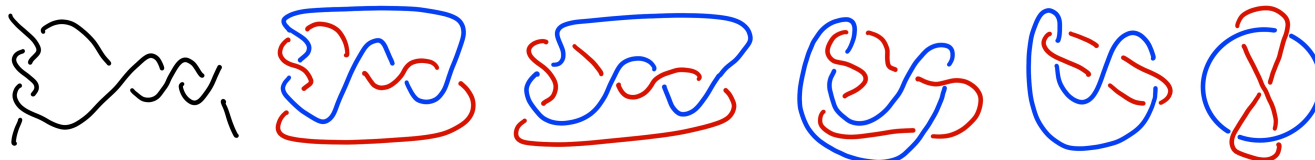
■ Primera Recombinación



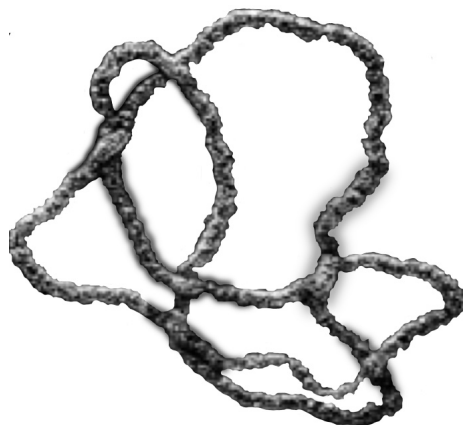
■ Segunda Recombinación



■ Tercera Recombinación



La cuarta, sería una mera predicción, sin embargo, como hemos dicho, esto está probado experimentalmente, y por tanto, podemos asegurar que es así. Ya hemos visto un ejemplo de esto, pero para visualizar el resultado final al que se llega cuando actúa la TN3-Resolvasa, lo pondremos aquí también:



Hemos comprobado que si conocemos el sustrato y el producto, gracias a un resultado matemático podemos deducir cómo funciona una enzima.

Queda así demostrada la relación que existe entre la teoría de nudos y enredos y el ADN circular. Además hemos visto que las teorías de nudos y enredos nos ayudan a explicar y entender el funcionamiento de las dos enzimas mencionadas, que era el objetivo que teníamos con este trabajo.

Bibliografía

- [1] Sumners, D. (1995). *Lifting the Curtain: Using Topology to Probe the Hidden Action of Enzymes*.
- [2] Silver, D. (2006). *Knot theory's odd origins*.
- [3] Murasugi, K. (1996). *Knot theory and its applications*.
- [4] Livingston, C. (1993). *Knot Theory: A CENTURY OF KNOT THEORY*.
- [5] Gongopadhyay, K., Mishra, R. (2016). *Knot Theory and Its Applications*.
- [6] Goldman, J., Kauffman, L. (1997). *Rational Tangles*.
- [7] Boege, M., Hinojosa, G. (2006). *Nudos para explicar enzimas*.
- [8] Brown, H., Leech, J. (1971). *Computational Problems in Abstract Algebra. Mathematics of Computation*.
- [9] Ardanza Trevijano, S. *Excursiones matemáticas en biología*.
<https://matematicasentumundo.es/NATURALEZA/PG-05-06-Ardanza.pdf>
- [10] Cebrián Castillo, J. (2015). *Superenrollamiento, encadenamiento y anudamiento del DNA en procariotas y eucariotas*.
- [11] Adams, C., Franzosa, R. (2007). *Introduction to Topology: Pure and Applied*.
- [12] Xiao, L. (2012). *Introducción a la teoría de nudos*.
- [13] Raymond Lickorish, W.B. (1997). *An introduction to knot theory*, Graduate Texts in Mathematics.
- [14] Gómez Larrañaga, J.C., Cabrera Ibarra, H. *Nudos en Biología*
<https://acortar.link/dWbA2>
- [15] Soto Contreras, J. (2019). *Invariantes polinomiales de nudos*

- [16] Kauffman, L. H.(2003).*From Tangle Fractions to DNA*
- [17] Kauffman, L. H. (2004). *On the classification of rational tangles*
- [18] Stoimenow,A. (2008). *Tait's conjectures and odd crossing number amphiquiral knots*