

# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea Triennale in Fisica

Tesi di Laurea

Linking number e integrale di Gauss

per curve lineari a tratti

Relatore

Prof. Marco Baiesi

Laureando

Francesco Ferraro

Anno Accademico 2017/2018



## Sommario

Lo scopo della tesi è trovare un metodo per calcolare l'integrale di Gauss limitatamente al caso di curve lineari a tratti che sia computazionalmente efficiente. Sono inizialmente presentati, in maniera autoconsistente, il linking number e la sua rappresentazione integrale, con particolare interesse ad alcune applicazioni fisiche. È poi riportata e discussa la derivazione della formula che costituisce il fulcro della tesi. Infine, sono illustrate diverse applicazioni della formula, ed è anche presentato un preliminare studio del ruolo dell'integrale nelle curve lineari a tratti aperte.



# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
1.1	Definizioni e notazioni	2
1.2	Linking number	3
1.3	Integrale di Gauss	3
1.4	Una dimostrazione “magnetica”	4
<b>2</b>	<b>Formula per l’integrale</b>	<b>5</b>
2.1	Preliminari	5
2.2	Una primitiva	6
2.3	Regione di integrazione	7
<b>3</b>	<b>Applicazioni</b>	<b>9</b>
3.1	Modelli giocattolo	9
3.2	Confronto con una formula approssimata	10
3.3	Integrale di Gauss per curve aperte	12



# Capitolo 1

## Introduzione

Il concetto di *linking number* è stato introdotto da Gauss in una nota del suo diario del 1833. In questa è riportato, senza dimostrazione, un integrale per calcolare il numero di avvolgimenti di due curve chiuse [1]. Come calcolare o anche solo come definire questo numero era allora un problema aperto, e questo è considerato il primo risultato di quella che nei secoli successivi è divenuta la branca della topologia oggi conosciuta come *teoria dei nodi* [2]. Nonostante in questa nota non si faccia cenno ad alcuna situazione fisica o a un'applicazione, il linking number si è rivelato essere un concetto di rilievo in diversi ambiti della fisica e di altre scienze.

Il linking number è un parametro di due curve chiuse, che descrive sostanzialmente il numero di volte in cui ciascuna curva gira attorno all'altra. L'importanza del linking number è dovuta al fatto che esso non varia quando le curve sono deformate in maniera continua e senza intersezioni.

In Figura 1.1 sono mostrate come esempio delle curve aventi diverso linking number. Per le curve a sinistra, che possono essere separate senza farle intersecare, il linking number è nullo. Per tutte le curve che possono essere separate risulta nullo. Nelle curve a destra invece è 1, e in generale un linking number non nullo indica che non è possibile separare le curve senza spezzarle. Si noti però che esistono delle curve, anche relativamente semplici, che pur non essendo separabili, possiedono linking number nullo. Un esempio è il *Whitehead link*.

In fisica è un concetto che trova spazio in diversi contesti, anche molto distanti tra loro. Ad esempio esso è classificato tra i cosiddetti *numeri quantici topologici*. Questi sono numeri quantici che assumono solo valori interi da considerazioni topologiche invece che di simmetria [3]. Esso riveste un ruolo importante in vari ambiti della fisica matematica. È stato anche analizzato il suo ruolo nelle teorie di *quantum gravity* [4].

Nella descrizione del DNA il linking number risulta essere un parametro fondamentale. Una tipica molecola di DNA consiste di due catene polinucleotidiche intrecciate, che formano una doppia elica. Le estremità di tutti i DNA naturali non possono ruotare liberamente, perché ad esempio la molecola è circolare oppure è collegata a delle proteine [5]. Risulta quindi chiaro che una caratterizzazione topologica delle due catene di una molecola di DNA è pertinente.

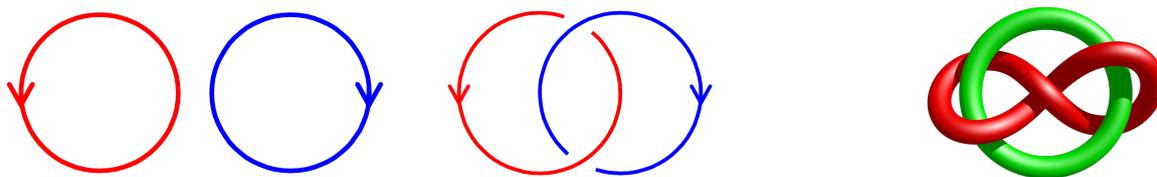


Figura 1.1: Esempi di curve con linking number nullo, a sinistra, e pari a 1, al centro. Sulla destra è mostrato il Whitehead link, un link che ha linking number nullo nonostante non sia possibile scioglierlo.

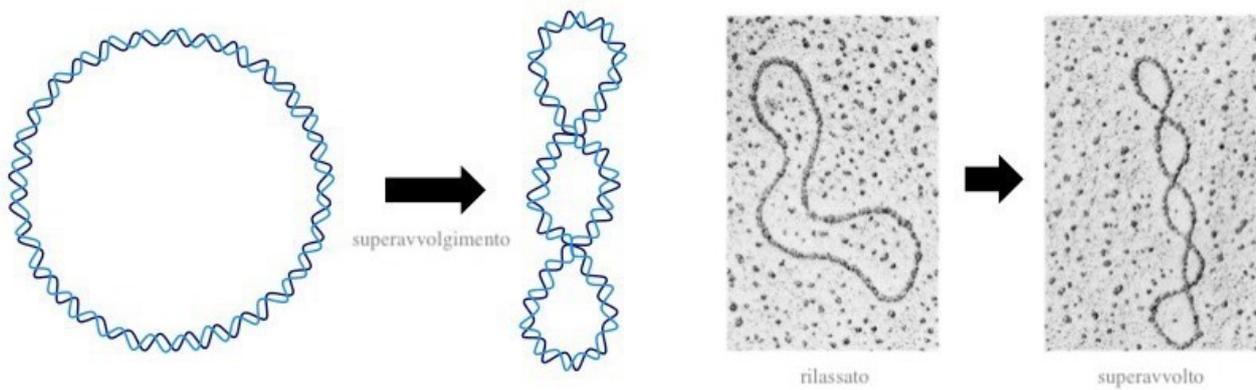


Figura 1.2: Una rappresentazione schematica e un'immagine acquisita con un microscopio elettronico di una molecola circolare di DNA in condizioni di rilassamento e in presenza di superavvolgimenti.

Per esempio, estensive analisi teoriche e sperimentali hanno mostrato che l'energia libera di un filamento di DNA *superavvolto*, descritto schematicamente in Figura 1.2, è data in condizioni fisiologiche da [5]

$$\Delta G = 10 RTN\sigma^2 \quad \text{dove} \quad \sigma = \frac{Lk}{Lk_0} - 1.$$

Le costanti sono quella dei gas  $R$ , la temperatura  $T$  e il numero  $N$  di coppie di basi che compongono il DNA. I parametri rilevanti invece sono  $Lk_0$ , che rappresenta il linking number tra le due catene quando si trovano in condizioni di massimo rilassamento, e  $Lk$ , che rappresenta il linking number reale dei filamenti, che sarà maggiore in presenza di super-avvolgimenti della doppia elica. È interessante osservare come questo parametro topologico abbia un'influenza preponderante sulla fisica di questo sistema, e in particolare dia informazioni su quali configurazioni siano energeticamente favorite e quindi più rilevanti in natura.

Il linking number è anche utilizzato nel calcolo della misura del grado di *entanglement* di strutture proteiche. Grazie a questo ad esempio è stato possibile esplorare la correlazione tra l'attorcigliamento di una proteina e il suo tasso di ripiegamento, ovvero il tempo caratteristico in cui raggiunge il suo *stato nativo* [6].

Il DNA e le proteine presentano la caratteristica comune che le catene che li compongono possono essere ben approssimate da curve lineari a tratti. Se si vogliono quindi effettuare delle analisi di questi sistemi è chiaro che un metodo computazionalmente efficiente per il calcolo del linking number nel caso di spezzate risulta essenziale.

Nel seguito sono introdotti in maniera sintetica, rimandando le dimostrazioni a testi e articoli specifici, il linking number e l'integrale di Gauss.

## 1.1 Definizioni e notazioni

In tutto il seguito con  $\gamma$ ,  $\eta$  (e lettere simili) si indicano curve compatte in  $\mathbb{R}^3$  di classe  $C^1$  a tratti, e con  $\gamma(s)$ ,  $\eta(t)$  delle loro parametrizzazioni. Senza perdita di generalità si può supporre che il dominio delle parametrizzazioni sia  $[0, 1]$ .

Una classe importante di curve è costituita dalle curve chiuse, dette *nodi*. Più nodi insieme formano un *link*. Il *diagramma* di un link è una buona proiezione delle curve su un piano arbitrario, che inoltre contenga informazioni sull'orientazione dei nodi e, nel caso di incroci, quali punti dei nodi componenti l'incrocio si trovino a distanza maggiore dal piano [1]. Un incrocio è un punto del diagramma che corrisponde a due diversi punti dei nodi. Una buona proiezione è tale se al massimo due punti dei

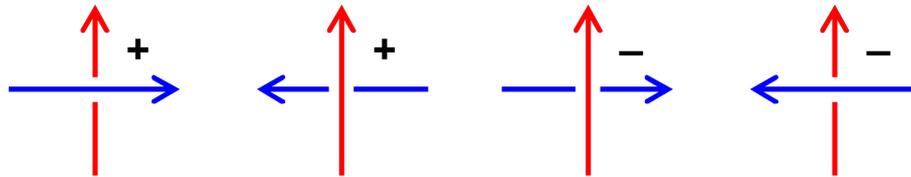


Figura 1.3: Una delle due possibili scelte per il segno degli incroci per il calcolo del linking number, essendo l'altra l'opposto di questa. I linking number che si ottengono dalle due scelte sono opposti.

nodi vengono mandati in uno stesso punto del piano e se in ogni incrocio le proiezioni dei nodi non sono tangenti.

Un'altra classe rilevante di curve è data dalle curve lineari a tratti. Iniziamo col definire il segmento orientato in  $\mathbb{R}^3$  di vertici  $A$  e  $B$ , ovvero la curva  $S_{AB} = \{A + s(B - A) : s \in [0, 1]\}$ . Data una successione finita di punti  $(A_1, A_2, \dots, A_n)$  una curva lineare a tratti orientata  $\gamma_A$  è l'unione dei segmenti orientati congiungenti i punti consecutivi.

Nel seguito tutte le curve saranno assunte omotope ad una qualche curva lineare a tratti.

## 1.2 Linking number

Consideriamo ora il diagramma del link composto dall'unione di due nodi disgiunti  $\gamma$  ed  $\eta$ . Ad ogni incrocio  $k$  del diagramma viene assegnato un numero  $\varepsilon(k) = \pm 1$ , secondo una convenzione standard. Una delle due possibili scelte è riportata in Figura 1.3. Si definisce il *linking number* di  $\gamma$  ed  $\eta$  come [1,7]

$$Lk(\gamma, \eta) = \frac{1}{2} \sum_k \varepsilon(k).$$

Alcune importanti proprietà del linking number sono [1,7,8]

- $Lk(\gamma, \eta)$  è un numero intero.  
Questo è dato dal fatto che il numero di incroci in un diagramma è sempre pari.
- $Lk(\gamma, \eta) = Lk(\eta, \gamma)$ .
- È sensibile all'orientazione delle curve, nel senso che  $Lk(-\gamma, \eta) = -Lk(\gamma, \eta)$ .  
Infatti, invertendo l'orientazione di una delle due curve si cambia il segno di tutti gli incroci.
- È invariante per omotopie, ovvero deformazioni continue delle curve che non comportino intersezioni tra le due. Si noti che risulta invariante anche sotto deformazioni che prevedono delle autointersezioni.

## 1.3 Integrale di Gauss

Un altro parametro importante di due curve, non necessariamente chiuse ma sempre disgiunte, è il loro integrale di Gauss. Questo è definito come

$$\begin{aligned} G(\gamma, \eta) &= \frac{1}{4\pi} \int_{\gamma} \int_{\eta} \frac{\det(\gamma', \eta', \gamma - \eta)}{|\gamma - \eta|^3} \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\det(\gamma'(s), \eta'(t), \gamma(s) - \eta(t))}{|\gamma(s) - \eta(t)|^3} ds dt \end{aligned}$$

e possiede le seguenti proprietà

- È invariante per riparametrazioni con la stessa orientazione, come assunto implicitamente nella definizione.

Infatti, siano  $\Gamma(s) = \gamma(\sigma(s))$  e  $H(t) = \eta(\tau(t))$  altre due parametrizzazioni di  $\gamma$  e  $\eta$ . Allora

$$\begin{aligned} G(\gamma, \eta) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\det(\Gamma'(s), H'(t), \Gamma(s) - H(t))}{|\Gamma(s) - H(t)|^3} ds dt \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\det(\gamma'(\sigma(s))\sigma'(s), \eta'(\tau(t))\tau'(t), \gamma(\sigma(s)) - \eta(\tau(t)))}{|\gamma(\sigma(s)) - \eta(\tau(t))|^3} ds dt \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\det(\gamma'(\sigma(s)), \eta'(\tau(t)), \gamma(\sigma(s)) - \eta(\tau(t)))}{|\gamma(\sigma(s)) - \eta(\tau(t))|^3} \sigma'(s) ds \tau'(t) dt \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\det(\gamma'(s), \eta'(t), \gamma(s) - \eta(t))}{|\gamma(s) - \eta(t)|^3} ds dt. \end{aligned}$$

- È invariante per rototraslazioni.  
La definizione coinvolge solo derivate di curve e differenze tra punti, che risultano invarianti.
- $G(\gamma, \eta) = G(\eta, \gamma)$ .
- È sensibile all'orientazione delle curve.

In particolare, dalle prime due proprietà si deduce che l'integrale di Gauss riflette una proprietà geometrica delle due curve.

Il risultato fondamentale che lega i due oggetti introdotti è che per curve chiuse [\[1\]](#)

$$Lk(\gamma, \eta) = G(\gamma, \eta)$$

## 1.4 Una dimostrazione “magnetica”

Un argomento euristico del fatto appena citato che l'integrale di Gauss coincide con il linking number quando le curve in considerazione sono chiuse proviene dall'elettromagnetismo, e si pensa possa essere stato d'ispirazione per la misteriosa formula del diario di Gauss [\[1,2\]](#)

Consideriamo un filo  $\gamma$  percorso da una corrente  $I$ . Il campo magnetico generato nello spazio ad esso circostante è dato dalla legge di Biot-Savart

$$\mathbf{B}(\mathbf{y}) = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \oint_{\gamma} d\mathbf{x} \times \frac{\mathbf{y} - \mathbf{x}}{|\mathbf{y} - \mathbf{x}|^3}.$$

Consideriamo ora una curva  $\eta$ , e calcoliamo la circuitazione di  $\mathbf{B}$  su questa. Risulta

$$\begin{aligned} \oint_{\eta} \mathbf{B}(\mathbf{y}) \cdot d\mathbf{y} &= \oint_{\eta} \oint_{\gamma} \frac{\mu_0 I}{4\pi} \frac{d\mathbf{x} \times (\mathbf{y} - \mathbf{x})}{|\mathbf{y} - \mathbf{x}|^3} \cdot d\mathbf{y} \\ &= \mu_0 I \cdot \frac{1}{4\pi} \oint_{\eta} \oint_{\gamma} \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot (d\mathbf{y} \times d\mathbf{x})}{|\mathbf{y} - \mathbf{x}|^3} \end{aligned}$$

ma anche

$$\oint_{\eta} \mathbf{B}(\mathbf{y}) \cdot d\mathbf{y} = \int_{\Sigma} \nabla \times \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\Sigma} = \mu_0 \int_{\Sigma} \mathbf{j} \cdot d\boldsymbol{\Sigma} = \mu_0 I \cdot n$$

dove  $n$  è il numero di volte che la corrente  $I$  attraversa qualunque superficie  $\Sigma$  avente come bordo  $\eta$ .

Mettendo insieme le ultime due relazioni si vede subito che  $n$  è pari proprio all'integrale di Gauss, e risulta effettivamente un numero intero. Questo numero ha lo stesso significato del linking number, ovvero è pari al numero di avvolgimenti di una curva sull'altra.

## Capitolo 2

# Una formula per l'integrale di Gauss

### 2.1 Preliminari

Date due curve lineari a tratti orientate  $\gamma_A$  e  $\gamma_B$  si vuole valutare il loro integrale di Gauss  $G$ . Dalla definizione si ha che

$$G = \frac{1}{4\pi} \int_{\gamma_A} \int_{\gamma_B} \frac{\det(\gamma'_A, \gamma'_B, \gamma_A - \gamma_B)}{|\gamma_A - \gamma_B|^3}.$$

Siccome  $\gamma_A = \gamma_{A_1} \cup \dots \cup \gamma_{A_m}$  e  $\gamma_B = \gamma_{B_1} \cup \dots \cup \gamma_{B_n}$ , dove

$$\gamma_{A_i} = S_{A_i A_{i+1}} = \{A_i + s(A_{i+1} - A_i) : s \in [0, 1]\}$$

e similmente per  $\gamma_{B_j}$ , allora

$$G = \frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} \int_{\gamma_{A_i}} \int_{\gamma_{B_j}} \frac{\det(\gamma'_{A_i}, \gamma'_{B_j}, \gamma_{A_i} - \gamma_{B_j})}{|\gamma_{A_i} - \gamma_{B_j}|^3} = \frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} G_{ij}.$$

Per ogni termine della sommatoria, definendo

$$\mathbf{u} = A_{i+1} - A_i$$

$$\mathbf{v} = B_{i+1} - B_i$$

$$\mathbf{w} = B_i - A_i$$

si trova che

$$\det(\gamma'_{A_i}(s), \gamma'_{B_j}(t), \gamma_{A_i}(s) - \gamma_{B_j}(t)) = \det(\mathbf{u}, \mathbf{v}, s\mathbf{u} - t\mathbf{v} - \mathbf{w}) = -\det(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})$$

$$|\gamma_{A_i}(s) - \gamma_{B_j}(t)|^3 = (|\mathbf{u}|^2 s^2 + |\mathbf{v}|^2 t^2 + |\mathbf{w}|^2 - 2\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} st - 2\mathbf{u} \cdot \mathbf{w} s + 2\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} t)^{3/2}$$

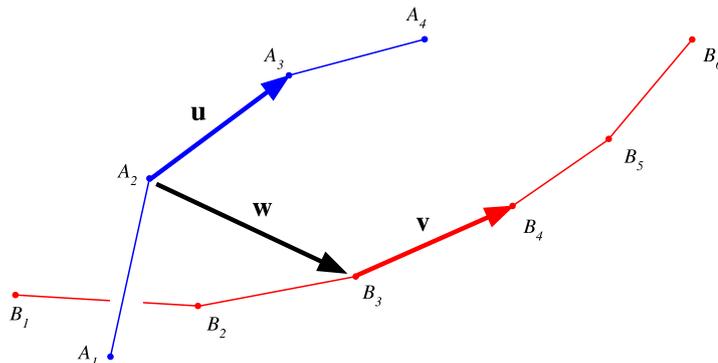


Figura 2.1: Rappresentazione schematica del procedimento adottato per il calcolo dell'integrale di Gauss.

da cui

$$G_{ij} = -\det(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) \int_0^1 \int_0^1 \frac{ds dt}{(|\mathbf{u}|^2 s^2 + |\mathbf{v}|^2 t^2 + |\mathbf{w}|^2 - 2\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} st - 2\mathbf{u} \cdot \mathbf{w} s + 2\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} t)^{3/2}}. \quad (2.1)$$

Il calcolo di  $G$  è quindi ricondotto al calcolo di  $m \times n$  integrali di questo tipo.

Nel caso in cui i tre segmenti in considerazione sono complanari, dalla presenza del determinante si può subito concludere che  $G_{ij}$  risulta nullo.

## 2.2 Una primitiva

Una possibile metodologia di risoluzione è ricorrere alla relazione, valida per generici  $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ ,

$$\int_0^1 \frac{dt}{|t\mathbf{a} - \mathbf{b}|^3} = \frac{1}{|\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2} \left( \frac{\mathbf{b}}{|\mathbf{b}|} + \frac{\mathbf{a} - \mathbf{b}}{|\mathbf{a} - \mathbf{b}|} \right) \cdot \mathbf{a},$$

valida in virtù delle seguenti

$$|t\mathbf{a} - \mathbf{b}| = (|\mathbf{a}|^2 t^2 + 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} t + |\mathbf{b}|^2)^{1/2}$$

$$\int_0^1 \frac{dt}{(at^2 + 2bt + c)^{3/2}} = \frac{1}{b^2 - ac} \left( \frac{b}{\sqrt{c}} - \frac{a+b}{\sqrt{a+2b+c}} \right).$$

Da questa si trova che

$$G_{ij} = -\det(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})(I_1 - I_2)$$

dove  $I_1$  e  $I_2$  sono due integrali della forma

$$\int_0^1 \frac{as + b}{(cs^2 + ds + e)\sqrt{fs^2 + gs + h}} ds, \quad (2.2)$$

dove rispettivamente per  $I_1$  e  $I_2$

$a = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$	$a = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$
$b = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}$	$b = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} -  \mathbf{v} ^2$
$c =  \mathbf{v} ^2  \mathbf{u} ^2 - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2$	$c =  \mathbf{v} ^2  \mathbf{u} ^2 - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2$
$d = 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}) - 2 \mathbf{v} ^2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})$	$d = 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}) - 2 \mathbf{v} ^2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})$
$e =  \mathbf{v} ^2  \mathbf{w} ^2 - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w})^2$	$e =  \mathbf{v} ^2  \mathbf{w} ^2 - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{w})^2$
$f =  \mathbf{u} ^2$	$f =  \mathbf{u} ^2$
$g = -2\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}$	$g = -2\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} - 2\mathbf{u} \cdot \mathbf{w}$
$h =  \mathbf{w} ^2$	$h =  \mathbf{v} ^2 + 2\mathbf{v} \cdot \mathbf{w} +  \mathbf{w} ^2.$

Un procedimento per trovare una primitiva dell'ultimo integrando è discusso di seguito, ed è un adattamento di un metodo noto in letteratura [\[9\]](#).

Si consideri la sostituzione

$$s \rightarrow \mu \frac{x-1}{x+1} + \nu \quad ds \rightarrow \frac{2\mu}{(x+1)^2} dx \quad (2.3)$$

con

$$\mu = \frac{y}{df - cg} \quad \nu = \frac{ch - ef}{df - cg}$$

$$y = \sqrt{(ch - ef)^2 + (df - cg)(dh - eg)}.$$

Si noti che il radicando nell'ultima espressione è sempre positivo, dato che risulta pari a

$$(|\mathbf{u}|^2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w})^2 + |\mathbf{w}|^2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})^2 - 2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})(\mathbf{u} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}))^2.$$

La sostituzione può risultare singolare nel caso in cui  $df - cg$  sia nullo. Questo può avvenire anche nel caso in cui i segmenti in considerazione non sono complanari. A rigore, sarebbe necessario considerare un altro procedimento per questa situazione. Tuttavia, a livello pratico, dato che l'insieme delle coppie di segmenti che presentano questa problematica è di misura nulla, è improbabile imbattersene. Se ciò avviene è comunque possibile integrare numericamente la singola espressione (2.1) problematica senza un significativo aumento del costo computazionale.

Nel caso in cui non sia singolare, con questa sostituzione è possibile porre l'integrale nella forma

$$\int \frac{r \operatorname{sign}(x+1)}{(x^2+p)\sqrt{x^2+q}} dx \quad (2.4)$$

dove

$$\begin{aligned} r &= -\frac{4ay^2}{cp_+\sqrt{fq_+}} |df - cg| & p &= \frac{p_-}{p_+} & q &= \frac{q_-}{q_+} \\ p_{\pm} &= 2y^2 \pm y \left( 2ch - dg - 2ef + \frac{d^2f}{c} \right) \\ q_{\pm} &= 2y^2 \pm y \left( 2ch + dg - 2ef - \frac{cg^2}{f} \right). \end{aligned}$$

Questo integrando, a meno della funzione segno, ammette come primitiva

$$F(x) = \frac{r}{\sqrt{p(q-p)}} \arctan \left( \frac{\sqrt{q-p}x}{\sqrt{p(x^2+q)}} \right)$$

come si può facilmente verificare derivando  $F(x)$ .

## 2.3 Regione di integrazione

Rimane solo da considerare come viene modificata la regione di integrazione dalla sostituzione. Si inferisce dalla sua inversa

$$x \rightarrow \frac{\mu - \nu + s}{\mu + \nu - s}$$

che la sostituzione risulta singolare nella regione di integrazione di  $s$  se  $\mu + \nu \in [0, 1]$ .

Se questo non succede l'integrale cercato è dato da

$$F \left( \frac{\mu - \nu + 1}{\mu + \nu - 1} \right) - F \left( \frac{\mu - \nu}{\mu + \nu} \right)$$

se  $(\mu + \nu - 1)\mu > 0$ , o altrimenti dal suo opposto. Questa scelta è data sia dal segno della derivata della sostituzione (2.3), che è concorde a quello di  $\mu$ , che a quello di  $\operatorname{sign}(x+1)$  nell'integrando, che è lo stesso di  $\mu + \nu - 1$ .

Nel caso in cui la sostituzione sia singolare, si divide l'integrale (2.2) come

$$\int_0^1 \phi(s) ds = \int_0^{\mu+\nu} \phi(s) ds + \int_{\mu+\nu}^1 \phi(s) ds. \quad (2.5)$$

Se  $\mu > 0$  la sostituzione porta a

$$\int_0^1 \phi(s) ds = \int_{\frac{\mu-\nu}{\mu+\nu}}^{\infty} \phi(x) \frac{ds}{dx} dx + \int_{-\infty}^{\frac{\mu-\nu+1}{\mu+\nu-1}} \phi(x) \frac{ds}{dx} dx.$$

La funzione è integrabile all'infinito dato che l'integrando (2.4) ha un andamento  $\sim x^{-5/2}$ . Per la presenza della funzione  $\text{sign}(x+1)$  il segno del secondo integrale risulta opposto a quello del primo, e la loro somma risulta

$$\left[ F(\infty) - F\left(\frac{\mu-\nu}{\mu+\nu}\right) \right] - \left[ F\left(\frac{\mu-\nu+1}{\mu+\nu-1}\right) - F(-\infty) \right].$$

I contributi all'infinito si elidono dato che

$$F(+\infty) = -F(-\infty) = \frac{r}{\sqrt{p(q-p)}} \arctan(\sqrt{q/p-1})$$

e l'integrale risulta

$$-F\left(\frac{\mu-\nu+1}{\mu+\nu-1}\right) - F\left(\frac{\mu-\nu}{\mu+\nu}\right).$$

Nel caso  $\mu < 0$  in modo analogo si trova che l'integrale è dato da

$$F\left(\frac{\mu-\nu+1}{\mu+\nu-1}\right) + F\left(\frac{\mu-\nu}{\mu+\nu}\right).$$

Infine nel caso in cui  $\mu + \nu = 0$  oppure 1 si vede da (2.5) che l'integrale è dato dalla differenza tra la primitiva  $F(x)$  calcolata in  $\pm\infty$  e nell'estremo corrispondente.

# Capitolo 3

## Applicazioni

La formula ricavata è stata implementata utilizzando *Mathematica 11.3*, in particolare impiegando la funzione *Compile*. Tutte le computazioni sono state eseguite su un computer con sistema operativo *macOS* e un processore *i5 dual-core 2.7 GHz*.

### 3.1 Modelli giocattolo

Per verificare la corretta implementazione della formula sono stati studiati dei modelli in cui il risultato è noto. Questi sono i modelli in cui le curve sono nodi, ovvero quando l'integrale di Gauss risulta un numero intero.

Nel primo modello, sono stati considerati due quadrati della stessa grandezza disposti perpendicolarmente, ed è stato calcolato il loro integrale di Gauss al variare della distanza, come mostrato in Figura 3.1. Il risultato, sulla destra della figura, è quello atteso, a conferma della correttezza dell'implementazione.

Per il secondo modello sono state generate delle poligoni a coordinate casuali. Le coordinate sono estratte da una distribuzione uniforme in  $[0, 1]$ , e alcuni esempi sono riportati in Figura 3.2. Di queste sono stati calcolati gli integrali di Gauss con la formula sviluppata. Oltre ad essere un'ulteriore verifica della corretta implementazione della formula, questo modello permette di stimare il guadagno, in termini di tempo di esecuzione, rispetto all'integrazione numerica degli integrali (2.1). L'integrazione numerica è stata fatta attraverso la funzione *NIntegrate* di *Mathematica*. Senza troppe sorprese, si trova che la formula sviluppata in queste pagine è molto più efficiente, tra i due e i tre ordini di

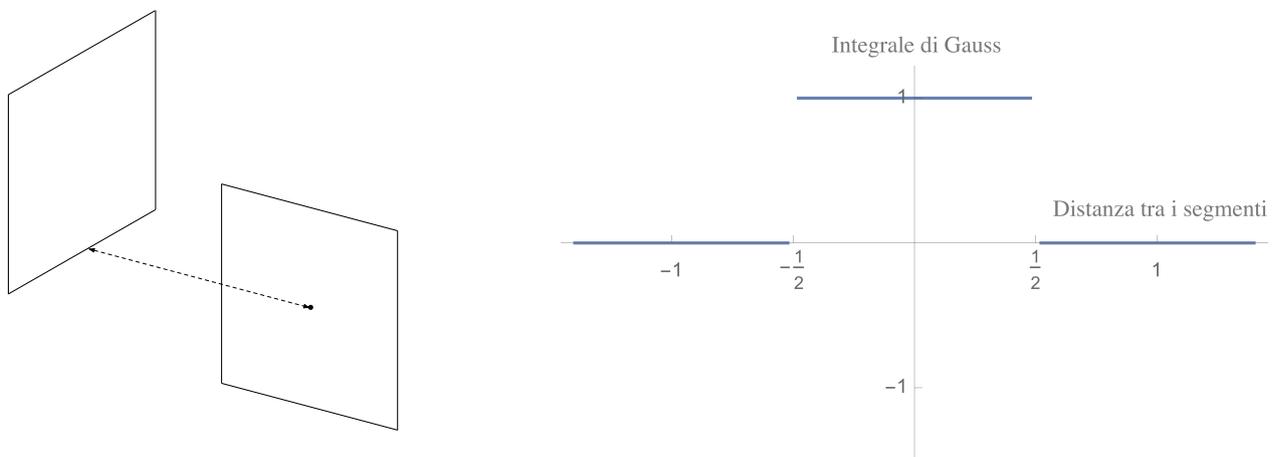


Figura 3.1: Risultato del calcolo dell'integrale di Gauss nel primo modello giocattolo. Il grafico sulla destra è in unità di lunghezze dei lati dei quadrati.

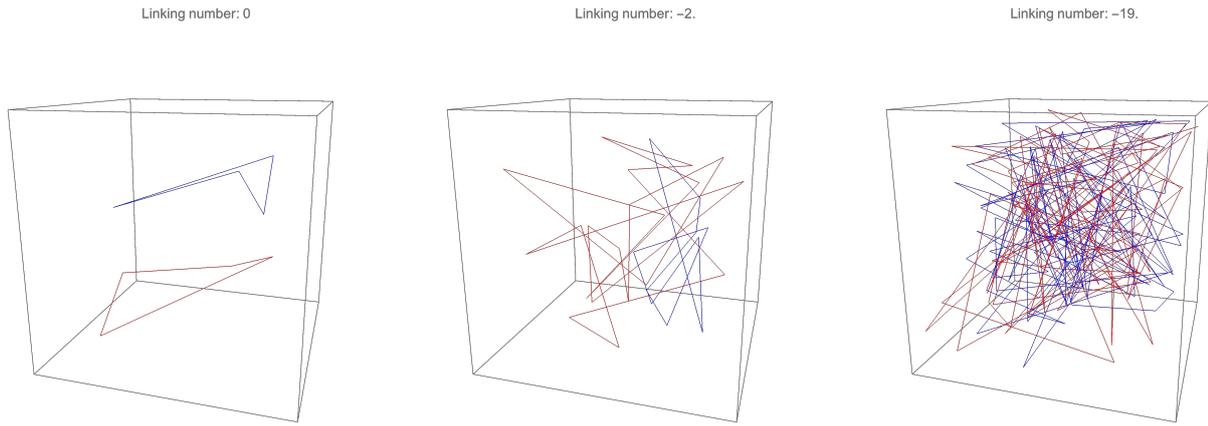


Figura 3.2: Alcuni tra i nodi poligonali generati casualmente, di lunghezza tra 4 e 100 segmenti.

grandezza. I risultati di quest’analisi sono riportati di seguito. Sono stati ottenuti mediando il tempo di esecuzione per un grande numero di nodi casuali, e sono comunque da ritenersi indicativi.

Numero di segmenti dei due nodi	4	10	20	50	100
Formula della tesi (ms)	1	5	30	175	750
Integrazione numerica (ms)	200	1000	5000	30000	>60000

Si tenga presente che nell’ambito in cui questa formula è stata inizialmente pensata, ovvero nei sistemi proteici, i link possono raggiungere anche la lunghezza di 1000 segmenti per nodo. Questo spiega l’iniziale interesse per la formula di questa tesi.

### 3.2 Confronto con una formula approssimata

Una formula utilizzata in letteratura come approssimazione dell’integrale di Gauss di due curve spezzate è la seguente [6,10]

$$g(\gamma_A, \gamma_B) = -\frac{2}{\pi} \sum_{i,j} \frac{\det(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})}{|A_i + A_{i+1} - B_j - B_{j+1}|^3}$$

ed è stata usata per la sua facilità di implementazione e il suo ridotto costo computazionale.

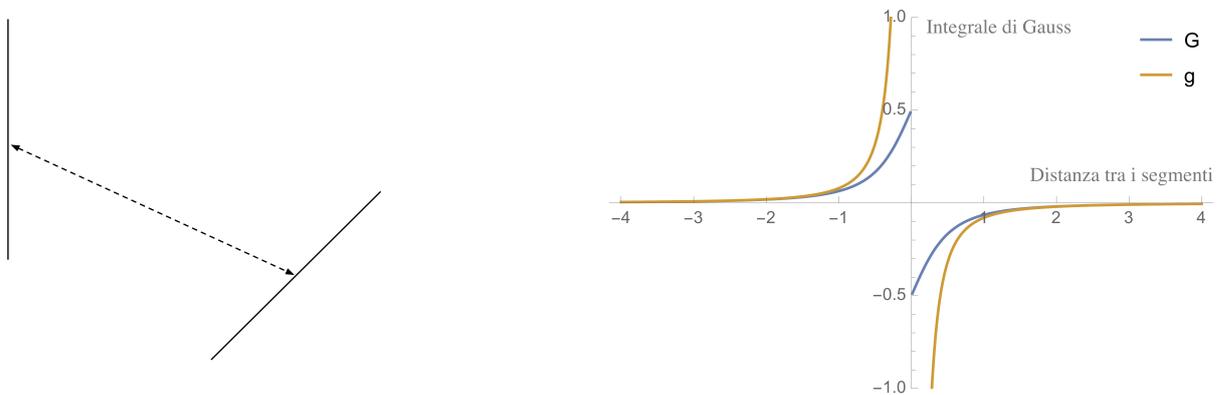


Figura 3.3: Confronto tra l’integrale di Gauss  $G$  e la sua approssimazione  $g$ , nel caso di due segmenti. Il grafico è in funzione della distanza tra i punti medi e in unità di lunghezza dei segmenti.

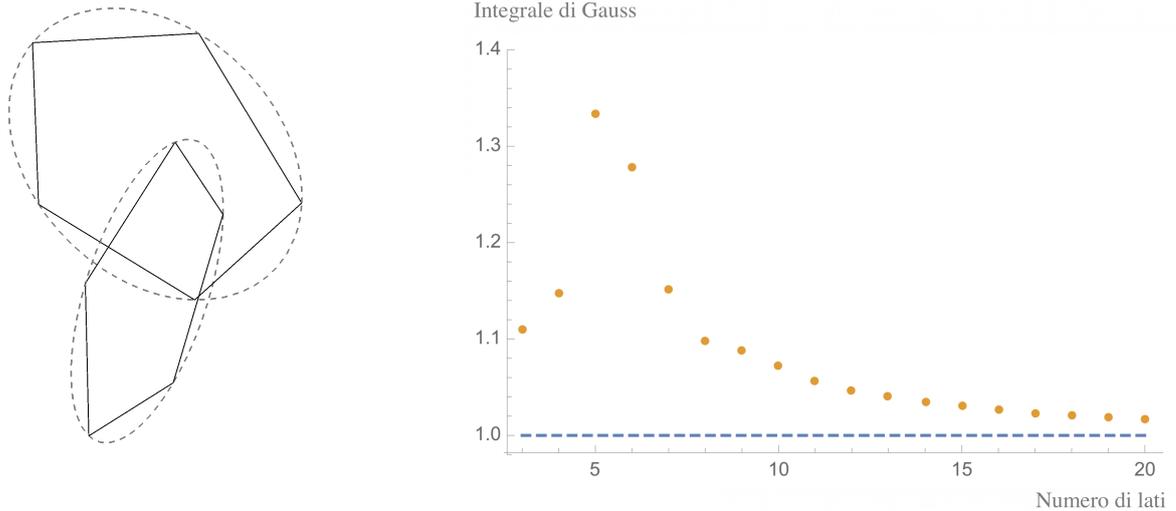


Figura 3.4: Confronto tra l'integrale di Gauss e la sua approssimazione  $g$  nel caso di poligoni intrecciati come sulla sinistra.

Questa formula è motivata dal fatto che se l'integrando varia poco si può sostituire ad esso il suo valore nel centro della regione di integrazione per l'area di quest'ultima, e quindi

$$\begin{aligned}
 G(\gamma_A, \gamma_B) &= -\frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} \int_0^1 \int_0^1 \frac{\det(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})}{|\gamma_{A_i} - \gamma_{B_j}|^3} \\
 &\approx -\frac{1}{4\pi} \sum_{i,j} \frac{\det(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})}{|\gamma_{A_i}(1/2) - \gamma_{B_j}(1/2)|^3} \\
 &= g(\gamma_A, \gamma_B).
 \end{aligned}$$

Quello che ci si aspetta è che l'approssimazione migliori all'aumentare della distanza tra le curve e al diminuire della lunghezza dei segmenti che le compongono. Essendo in possesso di una formula esatta per l'integrale è possibile un'analisi più precisa di questo asserto.

Come primo caso consideriamo due segmenti perpendicolari sghembi, come in Figura 3.3. Se si costruisce il grafico in funzione della distanza si nota quanto predetto. Qualitativamente si osserva che si possono confondere le due stime per distanze superiori alla lunghezza dei segmenti.

Per distanze minori della lunghezza dei segmenti l'integrale di Gauss si avvicina a 1/2, mentre la sua approssimazione addirittura diverge. Questo fatto pone serie limitazioni all'ambito di utilizzo della formula approssimata. Infatti, nel caso in cui le spezzate in considerazione presentino dei punti molto ravvicinati, è possibile che la stima dell'integrale di Gauss risulti non accurata.

Un altro caso analizzato è quello di due poligoni intrecciati approssimanti un cerchio con un numero variabile di lati. Una schematizzazione è riportata in Figura 3.4. L'integrale di Gauss del modello non approssimato, composto dai due cerchi intrecciati, è evidentemente 1. Come atteso, all'aumentare della precisione con cui vengono approssimati, ovvero all'aumentare del numero di lati dei poligoni, si vede che la stima  $g$  diventa sempre più precisa.

Analizzando l'andamento dei dati, ed escludendo le prime due stime, falsate da effetti di bordo, si arriva alla stessa conclusione del caso precedente. Per piccole distanze tra i segmenti la stima approssimata restituisce un valore maggiore di quello effettivo. Qui si ha un'ulteriore riprova di quanto già concluso, ovvero che quando le curve sono molto vicine si ha una stima errata dell'integrale di Gauss.

### 3.3 Integrale di Gauss per curve aperte

Nonostante il linking number sia definito solamente per curve chiuse, la sua rappresentazione integrale può risultare utile per valutare quanto due curve aperte siano intrecciate.

L'origine di questo fatto non è difficile da intuire. Se si considerano due curve chiuse, il loro linking number è intero. Rimuovendo una piccola porzione da una delle due, di fatto aprendola, l'integrale di Gauss, anche se non risulterà più un numero intero, varierà di poco. Quindi un integrale significativamente diverso da zero indicherà in maniera quantitativa l'intrecciamento delle due curve.

Chiaramente l'integrale nel caso di curve aperte non risulta invariante per deformazioni.

Il primo modello analizzato è quello già introdotto nella sezione precedente di due segmenti perpendicolari, riportato in Figura 3.3. In questa configurazione si nota che l'integrale di Gauss è nullo a grandi distanze e tende al valore  $1/2$  all'avvicinarsi dei segmenti. Questo è in linea con quanto ipotizzato.

Il valore  $1/2$  può essere dedotto da considerazioni generali. Innanzitutto, qualunque sia l'espressione dell'integrale di Gauss, deve essere antisimmetrica nel passaggio da distanze positive e negative. Detto altrimenti, il grafico in Figura 3.3 deve essere dispari. Questo è immediato data la simmetria del modello, e ricordando che l'integrale di Gauss cambia di segno quando viene invertita l'orientazione di uno dei due segmenti. Dopodiché, non è difficile convincersi del fatto che, per qualunque coppia di curve chiuse, nel momento in cui avviene un'intersezione, il linking number, se non rimane invariato, varia di un'unità. Questo è perché si aggiungono o tolgono due incroci nel diagramma del link. Conseguentemente, anche l'integrale di Gauss, nel momento in cui avviene un'intersezione come quella tra i due segmenti, se varia lo fa di un'unità. Per tutte queste considerazioni, osservando anche che all'infinito deve annullarsi e che è monotono in funzione della distanza data la sua espressione, il valore dell'integrale di Gauss non può che tendere al valore  $1/2$ .

Da un altro punto di vista, si può anche interpretare questo  $1/2$  come il valore che sarebbe assegnato ad un diagramma con un singolo incrocio, come si trova dalla definizione di linking number. Se i segmenti fossero prolungati a rette e si estendesse la nozione di linking number a questo caso, è esattamente il valore che si troverebbe. Nel limite di piccole distanze si ritrova questo numero poiché la distanza tra i segmenti in confronto alla lunghezza degli stessi diventa trascurabile, e i segmenti possono essere confusi con le rette.

Un altro modello analizzato è quello delle due curve in Figura 3.5. Le due curve sono formate da tre segmenti della stessa lunghezza, ed è stata studiata la dipendenza dell'integrale sia dalla distanza che dall'inclinazione dei lati. Nel caso in cui  $\theta = 30^\circ$  le due curve sono triangoli equilateri. La distanza è negativa quando le curve sono disposte come in figura.

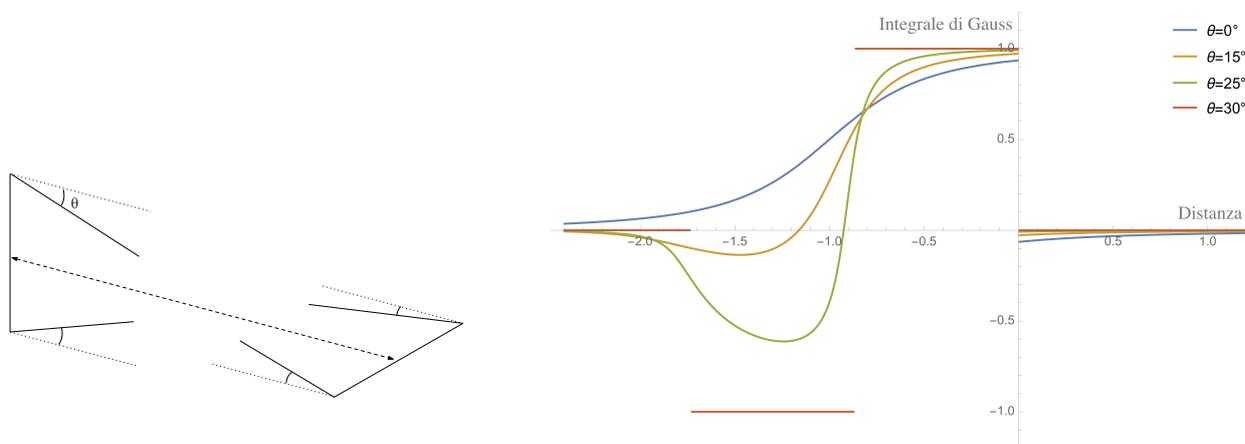


Figura 3.5: Analisi dell'integrale di Gauss per curve aperte. Il grafico è in funzione della distanza indicata e in unità di lunghezze dei segmenti.

Un'analisi del valore dell'integrale di Gauss di questo sistema rivela alcune interessanti caratteristiche. Innanzitutto, quando le due poligonali si trovano a grande distanza è praticamente nullo. Dopodiché si nota che al diminuire della distanza aumenta, in modulo, il valore dell'integrale di Gauss. Man mano che le curve si avvicinano si ha una più o meno brusca inversione del valore dell'integrale, in base a quanto le curve sono richiuse. Quando le due curve si superano l'integrale torna ad essere praticamente nullo.

Questo andamento deriva dalla situazione limite in cui le due curve sono chiuse, che al variare della distanza si intrecciano in maniera differente. Conseguentemente, vi è una discontinuità nel linking number. Nel caso di curve aperte questo andamento viene ricalcato in maniera liscia.

Un'altra proprietà che si nota dal grafico è che, nonostante il linking number sia nullo quando le curve chiuse non si intersecano, per distanze negative l'integrale di Gauss delle curve è maggiore, in modulo, di quando le curve sono a distanza positiva. Questo può essere intuitivamente spiegato osservando che a distanze negative i due segmenti inclinati delle curve sono rivolti gli uni di fronte agli altri, e ci si aspetta che le curve abbiano un intreccio maggiore.

Dall'analisi di questi due modelli si intuisce come l'integrale di Gauss sia un buon candidato per descrivere il grado di intrecciamento di due curve, che permette di dare una stima quantitativa di quanto le curve siano legate, o similmente quanto sia difficile separarle. Non è difficile immaginare quindi il motivo per cui è stata esplorata la correlazione tra questo parametro e altre caratteristiche di sistemi più complessi, quali proteine e DNA [6,10,11].



# Bibliografia

- [1] R.L. Ricca e B. Nipoti. Gauss' linking number revisited. *J. Knot Theory Ramifications* 20, 2011.
- [2] F. De Zela. Linking Maxwell, Helmholtz and Gauss through the linking integral. *arXiv:physics/0406037*, 2004.
- [3] D.J. Thouless. *Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics*. World Scientific, 1998.
- [4] R. Gambini e J. Pullin. The Gauss linking number in quantum gravity. *arXiv:gr-qc/9310025*, 1993.
- [5] S. M. Mirkin. DNA topology: Fundamentals. *American Cancer Society*, 2001.
- [6] M. Baiesi et al. Exploring the correlation between the folding rates of proteins and the entanglement of their native states. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 50, 2017.
- [7] E. W. Weisstein. Linking number. In *MathWorld—A Wolfram Web Resource*.
- [8] E.G. Sklyarenko. Intersection index (in homology). In *Encyclopedia of Mathematics*.
- [9] I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series, and Products*. Elsevier Science, 2014.
- [10] M. Baiesi et al. Linking in domain-swapped protein dimers. *Scientific Reports*, 6, 2016.
- [11] J. F. Marko. Linking topology of large dna molecules. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389, 2010.