結び目理論とＤＮＡ

５年Ａ組　浜渦　俊弥
５年Ｂ組　土佐　悠生
指導教官　河合　士郎
指導教官　川口　慎二

1　要約

　サイエンス研究会数学班５年生は、結び目について研究している。今回は、結び目の定義、ライデマイスター移動、不変量など、結び目理論の基礎事項に加え、応用として、DNA との関連性を考察し、更に今後の研究のためにタングルの考え方について述べてみたい。

キーワード　結び目、絡み目、不変量、DNA、超螺旋、タングル

2　研究の背景と目的

　塾の先生に雑学として多少教えていただいたのがきっかけで、数学にしては何か雰囲気が違う分野だと感じ、結び目理論に興味を抱いた。結び目理論とは、紐の絡みや結びつきを数学的に表す学問であり、「結び目が解けるか否か」や、「2 つの結び目は同じものか」などを考えるもので、生物学（分子生物学）、化学（高分子合成物）、物理学（量子力学・統計力学）への応用も期待できる理論である。今回は応用として、細胞のＤＮＡとの関連性を考察した。

3　研究内容

■結び目・絡み目の定義

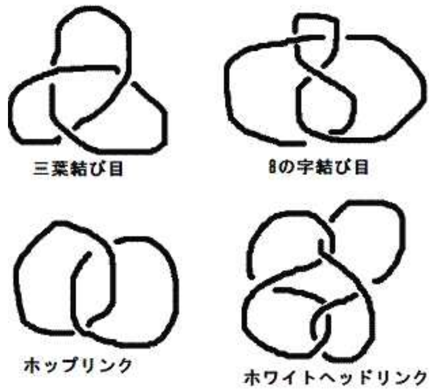
(1)3 次元空間内の、1 個の絡まった輪のことを、**結び目(knot)**という。

(2)3 次元空間内の、複数の絡まった輪のことを、**絡み目(link)**と呼ぶ。また、絡み目を構成する個々を**成分(component)**と呼ぶ。

(3)2 つの絡み目が 3 次元空間内で同位となるとき、2 つの結び目は**同値(equivalent)**であるという。

(4)単位円周（半径が 1 の円）と同値な結び目を**自明な結び目(trivial knot)**と呼ぶ。

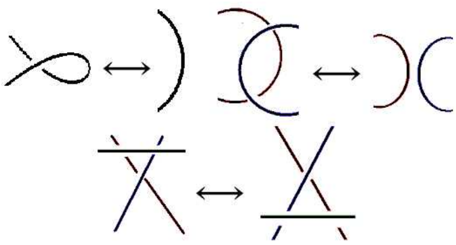
例　結び目・絡み目の例



■ライデマイスター移動

　ある 2 つの結び目が同値であるかを調べるために、結び目の一部分を変形することを**ライデマイスター移動(Reidemeister moves)**という。具体的には以下の３つの操作である。同値な２つの結び目は、一方の図から他方の図へ、以下の単純移動を繰り

返すことで必ず移すことができる。



■不変量

不変量(invariant)とは、結び目、絡み目を数値化して表したもので、実に多くの種類がある。それぞれの不変量は、結び目、絡み目をさまざまな方法・観点で分類する。ここでは、今回のテーマ（結び目と DNA の関係の一端を考察すること）に必要となる不変量のみを紹介する。

（1）絡み数

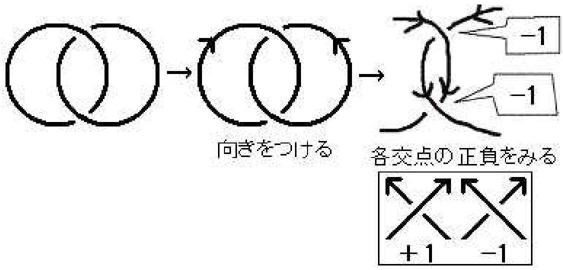
絡み数(linking number)は、絡み目の 2 成分が、どれくらい絡み合っているかを示す数値であり、ライデマイスター移動に関して不変である。以下にその定義を示す。

①絡み目の個々の成分に向きをつける。
②下図のように、片方の交差点を＋1、もう一方を－1 とし、これを絡み目の各々の交叉点において当てはめる。

※　ここでいう交叉点とは、異なる結び目同士の交差点だけを指す。同じ 1 つの結び目の中での交差点は、ここでは含まない。

③各交叉点に付けられた数の総和を求め、2 で割る。これが絡み数となる。

※絡み目の交叉点数は必ず偶数個なので 2 で割っても整数となる。



上図においては、絡み数は

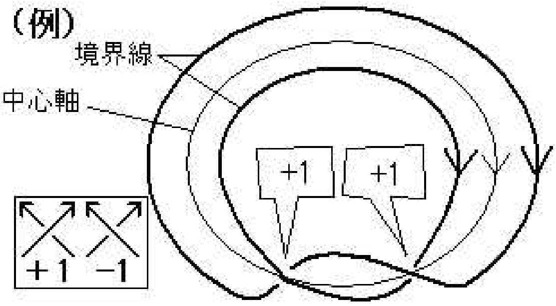
$$\frac{(-1)+(-1)}{2}=-1$$

となる。以下、絡み目 R の絡み数を、$Lk(R)$ で表すことにする。

（2）ねじれ数

ねじれ数(twist number)は、リボンがどれくらい螺旋を描いているかを示す数値である。絡み目の一種であるリボンに対する不変量で、リボンが空間内を占める位置に依存し、リボンを動かすと、それに伴い変化する。この不変量は、リボンの中心軸と、リボンの境界線の 1 本とが成す交叉点で定められる＋1 と－1 の、総和の半分である(このとき、境界線は 2 本のうちどちらを選んでも、必ず同じ値になる)。以下、リボン R のねじれ数を、$Tw(R)$ で表す。

（例）

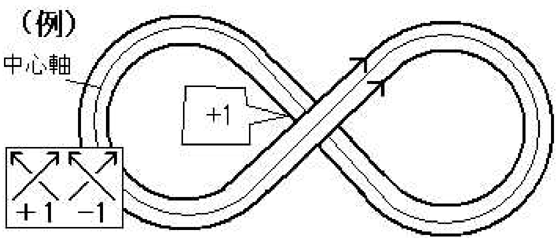


⇒ねじれ数 $Tw(R)=\frac{1+1}{2}=+1$

（3）ライジング数

ライジング数（writhing number）は、<u>リボンがどれくらい重なっているかを計る数値</u>である。リボンに対する不変量であり、リボンが空間内を占める位置に依存し、リボンを動かすとともに変化する。

この不変量は、リボンの中心軸同士が成す交叉点で定められる＋1 と－1 の総和である。以下、リボン R のライジング数を、$Wr(R)$ で表す。



⇒ライジング数 $Wr(R)=+1$

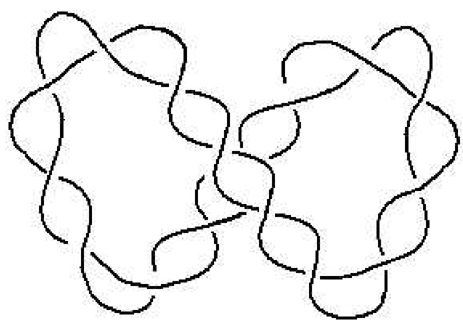
■3 つの不変量の関係式

まったく独立だったリボンに関する不変量の間には、

$$Lk(R)=Tw(R)+Wr(R)$$

という関係が成立する。

実際に、次の例で成り立っていることが確認できる。



$$Lk(R)=+7,\quad Tw(R)=+8$$

$$Wr(R)=-1$$

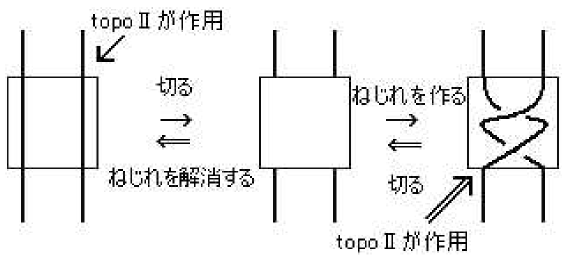
■DNA と 3 つの不変量

さて、以上の準備のもとで、結び目と DNA との関係について、考察してみたい。DNA は二重螺旋構造であるから、これを一つのリボンがねじれているものとして考えることができる。よって、前項のリボンに関する $Lk(R)=Tw(R)+Wr(R)$ という関係をもとに、DNA の変化を考えることができる。

ここで、**トポイソメラーゼ(topoisomerase, 略称 topo)**という酵素が DNA に及ぼす作用について考える。トポイソメラーゼは細菌からヒトに至るまで、すべての生物に広く分布しており、DNA の増殖に必須な、つまり生命維持に不可欠な酵素である。

トポイソメラーゼは、DNA 鎖を切断し、ねじれを作ったり解消したりした後、再結合する働きをもつ。

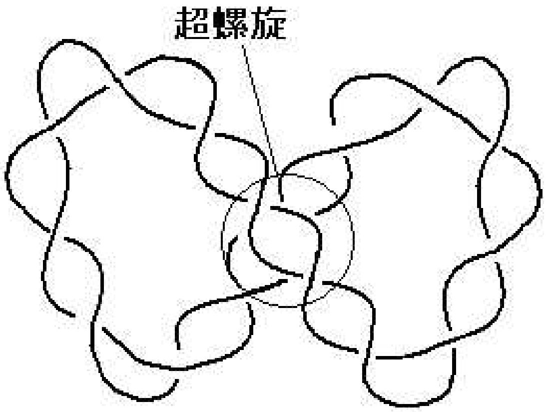
トポイソメラーゼⅡ型（topoⅡ）の働きを下図に示す。この型は、二重螺旋を描く 2 本の DNA 鎖を切断し、ねじれを作ったり解消したりしてから再結合する。



トポイソメラーゼⅡ（topoⅡ）の作用

この操作で、ねじれを繰り返し作り続けると、その DNA は長さの割にねじれが多くなりすぎ、これを自ら逆にねじれることにより、解消しようとする。つまり、$Tw(R)$ が減るわけである。ここで、先ほどの関係

式 $Lk(R)=Tw(R)+Wr(R)$ において、$Lk(R)$ はねじれの解消によって変動しないので、$Wr(R)$ が増えることになる。これは、もともと螺旋状だった DNA というリボンが、さらに空間内でよじれていることを意味する。このよじれのことを**超螺旋**(**supercoilling**)という。



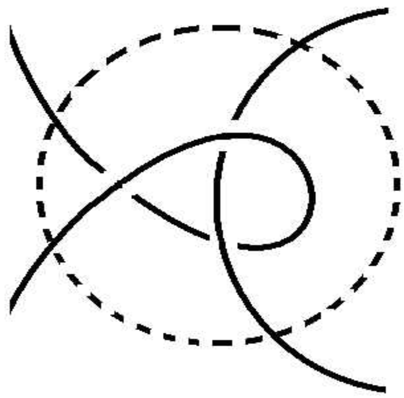
このように、トポイソメラーゼは超螺旋を作ったり、逆に解消したりするのである。実は、DNA を複製するには、先にその超螺旋構造を解く必要がある。トポイソメラーゼは、以上の働きによって DNA を複製できる状態にし、 複製終了後は、再び超螺旋を形成するという役割を持っている。もし、トポイソメラーゼなしに、DNA が自らねじれて超螺旋を解こうとすれば、摩擦で発火してしまう。これこそ、トポイソメラーゼが生物に必須の酵素であるとされる所以である。

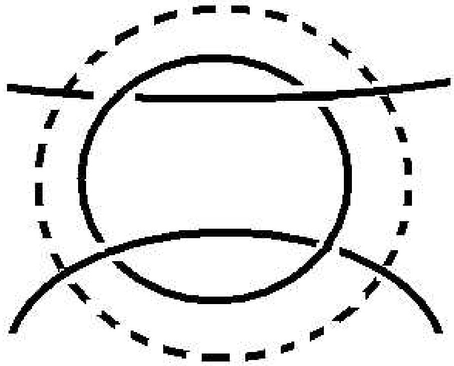
■タングル

DNA の結び目構造に関して考察する際、**タングル**(**tangle**)という概念を用いると、理解しやすい。

タングルとは結び目や絡み目が射影されている平面において、結び目や絡み目がちょうど 4 点で交わるような円で囲まれた領域をいう。なお、結び目や絡み目が円と交わる 4 点はいつも方位磁石の 4 方向 NW(北西)，NE(北東)，SW(南西)，SE(南東)の位置にあるとする。

タングルの例

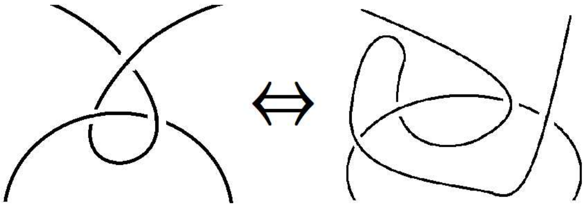




■タングルにおける同値

2 つのタングルがあって、タングルの 4 端点は止めたままで、タングル内の結び目の部分が円領域の外を出ないようにして、ライデマイスター移動により他方に移り変わるとき、2 つのタングルは同値であるという。

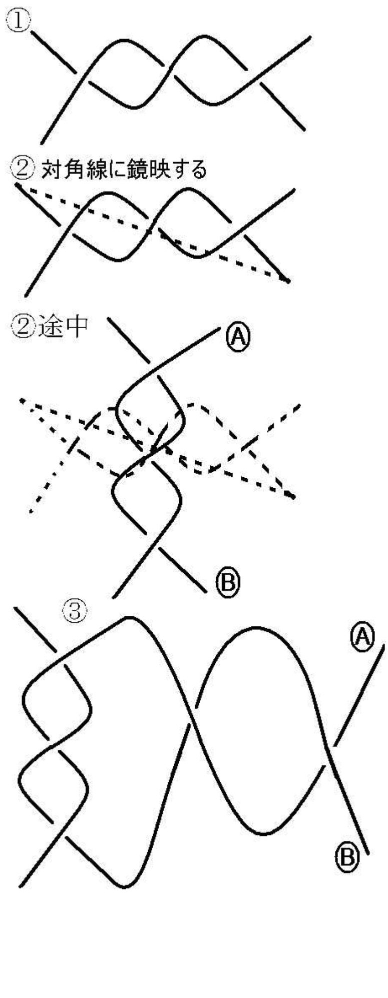
例　同値なタングル



■有理タングル

有理タングル(rational tangle)とは、タングルに数列を対応させたものであり、以下の法則に従って構成されるタングルの事を表している。

① 水平方向に 2 本の線を撚り合わせる。
② NWとＳＥの対角線に対して鏡映させる。
③ Ⓐ、Ⓑの部分から新たに線を擦り合せる。
④ ②～③を繰り返えす。



このとき、螺旋の回転方向を数値化するのだが、交叉点の上を通る結び目の部分(上道)が正の傾き(左下(SW)から右上(NE)の傾き)であるなら、それは正になる。例えば、①の図では上道が正の傾きであり、ねじれている回数は 3 回なので①は 3 と表す。

③では、最初に作った左の螺旋も上道が正の傾きでねじれている回数は 3 回なので、3。次に作った右の螺旋は上道が負の傾きで 2 回ねじれているので－2。したがって、③は「3　－2」である。

有理タングルが、同値性を判定するのに極めて単純な方法がある。2 つのタングル、「－2　3　2」と「3　－2　3」があるとしよう。そして、この数列に対応する連分数(continued fraction)を計算する。

実際に、－2　3　2なら、

$$2+\frac{1}{3+\frac{1}{-2}}=2+\frac{1}{\frac{5}{2}}=2+\frac{2}{5}=\frac{12}{5}$$

3　－2　3なら、

$$3+\frac{1}{-2+\frac{1}{3}}=3+\frac{1}{-\frac{5}{3}}=3-\frac{3}{5}=\frac{12}{5}$$

よって、「－2　3　2」と「3　－2　3」は同値である事がわかる。
この事実の証明は非常に複雑なので、今回は省略する。今後の課題の 1 つである。

4　考察

超螺旋状態になっている DNA ほど速く移動することが可能となり、電極に置くと超螺旋状態になっている DNA が＋に集まる。

超螺旋状態の DNA の割合や、ねじれ数を測定することにより、酵素がどれだけ

DNA に作用しているのかを理解する助けになるだろう。

また、DNA に作用する酵素(トポイソメラーゼ)の働きを、結び目理論で考えられることがわかった。

5　今後の課題

今回の研究をさらに深めるとともに、DNA の働きを、他の視点からも結び目理を通して考察してみたい。また、有理タングルの同値性を連分数で判定できるという事実の証明をする必要がある。

6　参考文献

[1]「結び目の数学」、C.C.アダムス著、金信泰造訳、培風館（1998）

[2]「DNA の冒険―二重螺旋から超螺旋へ―」、菊池韶彦著、岩波書店（1993）

7　謝辞

今回の研究をご指導して下さった河合先生、川口先生、近藤悠佳子先生に深く感謝します。また、研究に際し、助言と激励をいただきました奈良女子大学の小林毅先生にも深く感謝いたします。