

結び目理論を通してみるDNA

6年B組 土佐 悠生

6年C組 山岡 俊弥

指導教官 佐藤 大典

指導教官 川口 慎二

1. 要約

サイエンス研究会数学班6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、ライデマイスター移動、不変量、3彩色可能性、ブラケット多項式、絡み数、ねじれ数、ライジング数、DNA、二重螺旋構造、超螺旋、トポイソメラーゼII型(topo II)、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。つまり、1次元球面(即ち円周) S^1 から3次元球面 S^3 への単射連続写像 $K:S^1 \rightarrow S^3$ あるいは K の像のことを結び目という。
- (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。つまり、いくつかの1次元球面の(集合としての)直和 $S^1 \cup S^1 \cup \dots \cup S^1$ から3次元球面 S^3 への単射連続写像 $L:S^1 \cup S^1 \cup \dots \cup S^1 \rightarrow S^3$ 或いは L の像のことを絡み目という。また、絡み目を構成する個々の連結部分のことを成分という。

- (3)2つの絡み目が3次元空間内で同位となる(つまり、結び目を切ることなく、一方を縮めたり、伸ばしたり、ひねったりすることによって、もう一方に移ることができる)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。

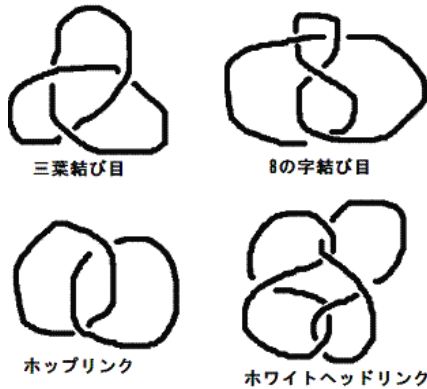


図1 結び目・絡み目の例

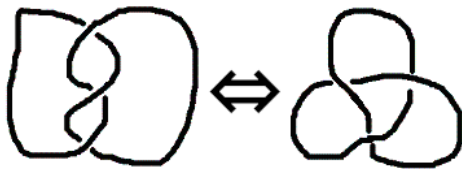


図2 同値な結び目の例

■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。

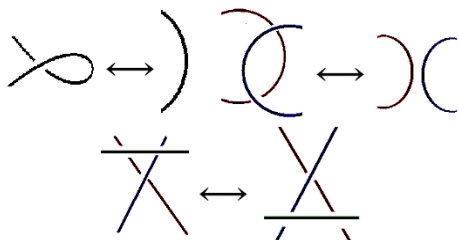


図3 ライデマイスター移動

■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。根気があれば、上述のライデマイスター移動により全ての結び目を解き明かすのは可能に思われるが、実際にするのは困難である。そこで登場するのが不変量であり、結び目・絡み目に対して、何度ライデマイスター移動を行っても変わらないように数値化された指標が不変量であるともいえる。例としては、次の3彩色可能性という簡単な不変量があるものの、あまり有効とはいえない(次節参照)。

■3彩色可能性

簡単な不変量の一例として、例えば3彩色可能性(tricolorability)というものがある。3彩色可能性は、結び目を図示したときに切れている部分を一本の線と仮定して、それぞれに色をつけていくことを考えていく。結び目は、2つの条件

- (a) 少なくとも2色は使われている
- (b) 2色以上が現れる交点では、3色が必ず使われている

が満たされているとき、この結び目は「3彩色可能(tricolorable)である」という。

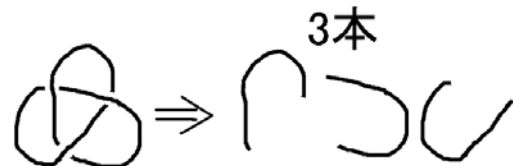


図4 3彩色可能な例

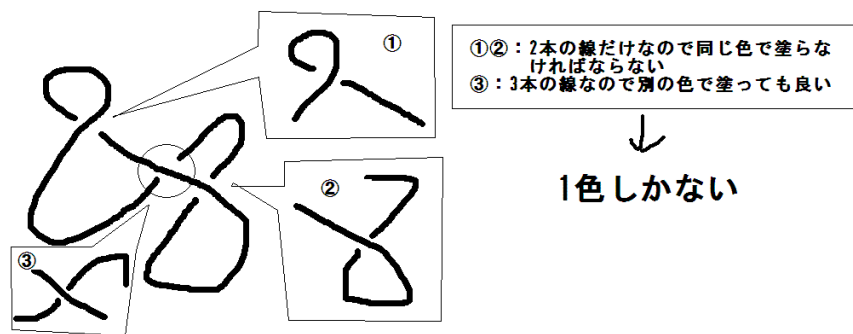


図5 3彩色不可能な例

図4の例では、いずれの条件も満たされるため、3彩色可能であり、図5の例では、条件(a)が満たされていないのでこれは3彩色可能ではない(図6参照)。

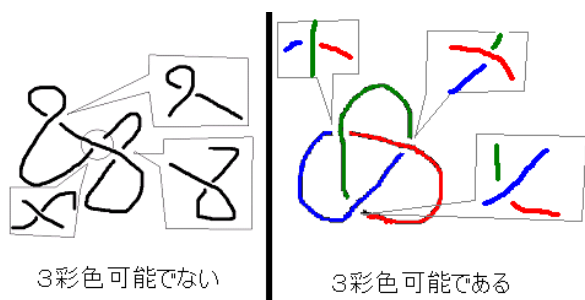


図6

3彩色可能性はライデマイスター変形でも変わらないため不変量ではあるが「可能である」「可能でない」の2種類しか起こりえない。つまり3彩色可能性だけで「2つの結び目が同じである」とは判断することはできない。「2つの結び目が同じものであるとき、この2つはどちらも3彩色可能であるか、あるいはどちらも可能でないかである」ということがいえる程度である。

そこで有効な不変量として考え出されたのが、ブラケット多項式である。

■ブラケット多項式

1984年、新しい不変量としてある**多項式 (polynomial)**が発見され、結び目理論だけでなく、統計力学や量子場の理論、量子不変量、量子群など他の分野との関連した膨大な研究を生むことになった。この多項式(ジョーンズ多項式という)の初等的な定義のために、1987年に**ブラケット多項式 (bracket polynomial)**が考案された。

以下、ブラケット多項式について、図7の三葉結び目Tを使って説明しよう。



T

図7 三葉結び目T



図8 交叉でのラベルのつけ方

図8において、各交叉の近傍は2本の線分によって4つの領域に分割されている。そこでこれらの領域に対し、交叉の上側にある線分の反時計周り方向の領域にラベルAを、時計回り方向の領域にラベルBを付ける(図8参照)。

ある結び目の図Dに対して、そのすべての交叉を図9のどちらかのやり方で解消して得られる図を、結び目Dの**状態(state)**と呼ぶことにする。

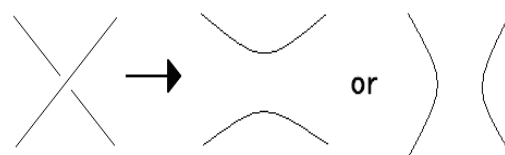


図9 交叉の解消

例えば、図7の三葉結び目Tは、次の図10にある8種類の「状態」を持つことになる(後々のために、ラベルA、Bを付けておく)。

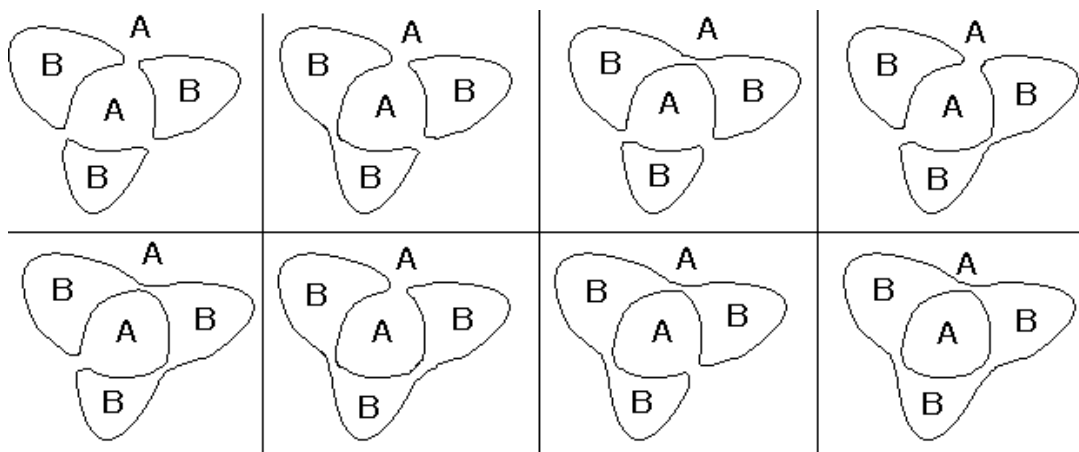


図10 三葉結び目Tの「状態」

さて、一つの「状態」をSと書くことにする。このときa(S)は「A領域をつなげる交叉点の数」を、b(S)は「B領域をつなげる交叉点の数」を、また|S|は図Sの中に含まれる「輪」の数をそれぞれ表している。このとき、dを変数として、

$$A^{a(S)} B^{b(S)} d^{|S|-1}$$

を状態Sのエネルギー(energy)ということにする。

例えば、図11の「状態S」について、

$a(S) = 2$, $b(S) = 1$, $|S| = 2$ となる。



図11 「状態」S

したがって、この「状態」Sのエネルギーは、

$$A^2 B d$$

となる。

さらに、ある結び目の図 D について、すべての状態のエネルギーを足し合わせたものを、 $\langle D \rangle$ と書くことにすると、図 7 の三葉結び目 T の状態については、

$$\langle T \rangle = A^3 d^2 + 3A^2 B d + 3AB^2 + B^3 d$$

となる。このような (d を変数とする) 多項式が結び目の不変量であり、これを **ブラケット多項式** と呼ぶ (正確には、結び目のもつ「ひねり」を考慮すべきである)。

しかし実はこの場合、結び目のひねりを取る操作に関しては正確な不変量とはいえない。そこで、結び目 D に一定方向の向きを与える。

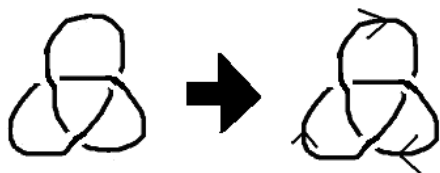


図 12 向きのつけ方(例)

このとき、それぞれの交叉に対して、図 13 のように数値 ± 1 を与える。結び目 D について、

$$(\text{正交叉の数}) - (\text{負交叉の数})$$

を、 D の **ひねり数(writhe number)** と呼び、 $w(D)$ で表す。

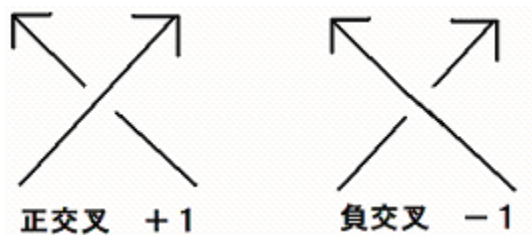


図 13 交叉の正負の定め方

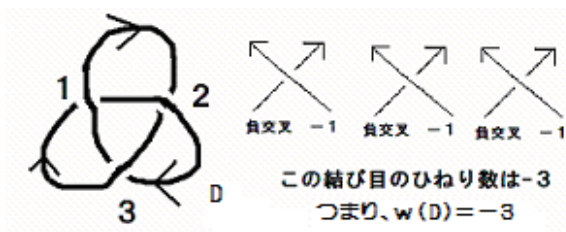


図 14 ひねり数の計算例

このひねり数 $w(D)$ を次のように用いて、不変量 $f(D)$ を次のように定義することができる。

$$f(D) = (-A)^{-3w(D)} \langle D \rangle$$

ここで、 $B = A^{-1}$, $d = -(A^2 + A^{-2})$ という変数変換を行っている。よって、三葉結び目 T の不変量は次のようになる。

$$\begin{aligned} f(T) &= (-A)^{-3w(T)} \langle T \rangle \\ &= (-A)^{-3 \times (-3)} (A^3 d^2 + 3A^2 B d + 3AB^2 + B^3 d) \\ &= -A^{16} + A^{12} + A^4 \end{aligned}$$

実際に、図 15 の 2 つの結び目で考えてみる。

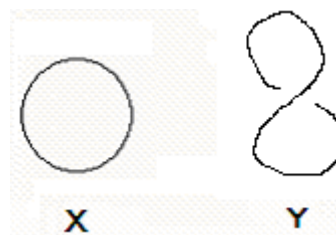
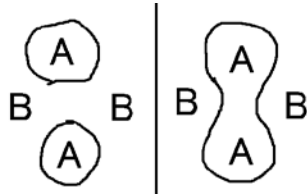


図 15 2 つの結び目

この 2 つはどちらも自明な結び目である (つまり同値である) ことは明らかである。まず、ブラケット多項式を用いて、それぞれの総エネルギーを計算する。結び目 X については、

$$\langle X \rangle = A^0 B^0 d^{1-1} = 1$$

となる。これに対して、結び目 Y は



と分けられ、総エネルギーは

$$\langle Y \rangle = A^0 B^1 d^{2-1} + A^1 B^0 d^{1-1} = A + Bd$$

となる。つまり、ブラケット多項式は

$$\langle X \rangle \neq \langle Y \rangle$$

となり、一致しない。

では、ひねり数を導入してみたらどうなるだろうか。X はひねりがない(交叉をもたない)ため、 $w(X) = 0$ であることは直ちにわかる。一方、Y に図 16 のように向きを入れる。



図 16 Y に入れる向き

このとき、(向きをどちらに決めても結局同じになるのだが) ひねり数は $w(Y) = +1$ となる。そこで、それを

$$f(Y) = (-A)^{-3w(Y)} \langle Y \rangle$$

へ代入すると、

$$f(D) = (-A)^{-3 \times 1} (A + Bd) = (-A)^{-3} (A + Bd)$$

となる。ここへ $B = A^{-1}$, $d = -(A^2 + A^{-2})$ を代入すると、

$$f(Y) = -A^{-3} \{A - A^{-1}(A^2 + A^{-2})\}$$

より、 $f(Y) = 1$ であるため、 $f(X) = f(Y)$ が成り立つ。

■ 絡み数・ねじれ数・ライジング数

以下、今回のテーマ(結び目と DNA の関係の一端を考察すること)に必要な不変量を紹介する。

(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、ライゲ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差点において当てはめる。
- ※ここでいう交差点とは、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 各交差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。

※絡み目の交差点数は必ず偶数個なので 2 で割っても整数となる。

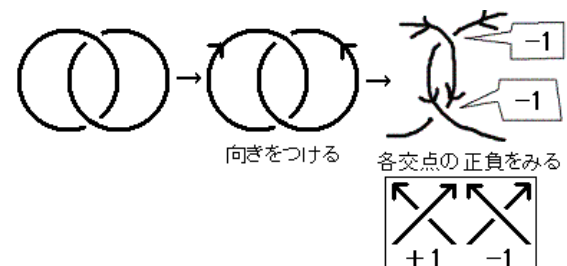


図 17 交差点での数字のつけ方

上図においては、絡み数は

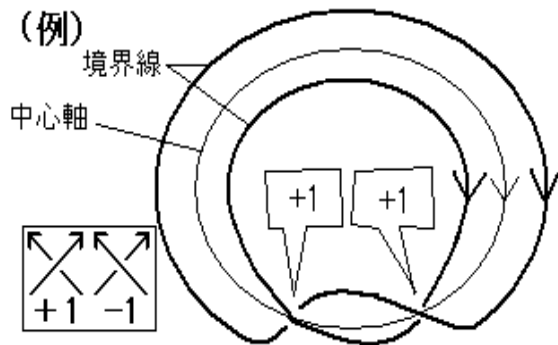
$$\frac{(-1)+(-1)}{2} = -1$$

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。



$$\Rightarrow \text{ねじれ数 } Tw(R) = \frac{1+1}{2} = +1$$

図 18 ねじれ数の計算例

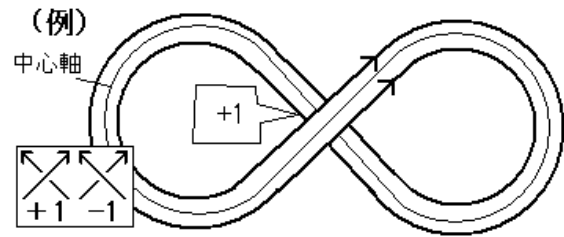
(3) ライジング数

ライジング数(writhing number)は、リボンがどれくらい重なっているかを計る量である。リボンの不変量であり、リボンが空

間内を占める位置に依存し、リボンを動かすと変化する。

この数は、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。

ここでは、リボン R のライジング数を、 $Wr(R)$ で表す。



$$\Rightarrow \text{ライジング数 } Wr(R) = +1$$

図 19 ライジング数の計算例

■ 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に思われる絡み数、ねじれ数、ライジング数の間に、

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

という関係が発見された。実際に、図 20 のようなリボン R で考えると、 $Lk(R) = +7$ 、 $Tw(R) = +8$ 、 $Wr(R) = -1$ であるので、上の関係式が成立している。

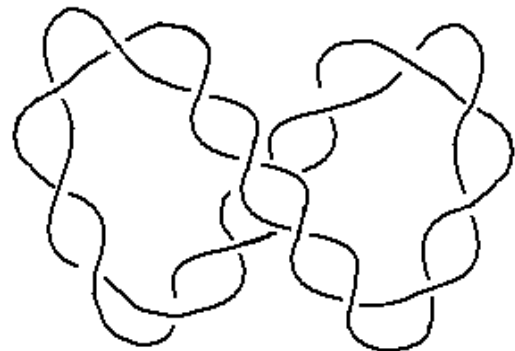


図 20 リボン R

■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(double helix)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 (topo II) 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。例えば、DNA の一部分に topo II が作用して、そこに+1のねじれを作る。

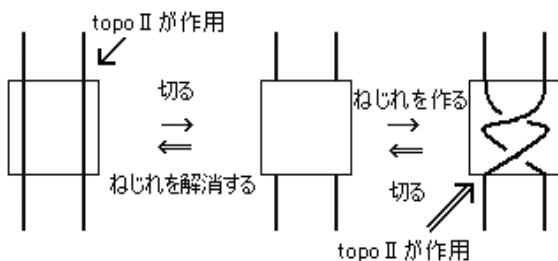


図 21 トポイソメラーゼ II (topo II) の作用

これを繰り返すと、その DNA は長さのわりにはねじれが多くなりすぎ、これを自

ら逆にねじれて、解消しようとする。つまり、 $Tw(R)$ が減るわけである。ここで、

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

であり、 $Lk(R)$ はねじれの解消によって変動しないので、上の式が成り立つようにするために、 $Wr(R)$ 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ることを意味する。このようなよじれのことを超螺旋(supercoiling)という(次頁図 23 参照)。このような超螺旋はわれわれの身近なところでも目にすることができる。例えば、絡み合った電話のコード(図 22)やドライヤーのコードなどである。



図 22 電話のコードにできる超螺旋

螺旋状態にあった DNA は超螺旋構造になってしまうが、実際には、酵素 topo II が作用して、密になった螺旋構造を解消する。この解消を繰り返しながら、mRNA は DNA を読み進める。これによって、DNA のねじれの数が増えすぎることなく、安定した状態を保って遺伝子情報を伝えることができ

る。

したがって、この考え方を使得、メッセージRNA (以下 mRNA) が DNA から遺伝子情報をどうやって読み取るのかを説明することができる。

- ① mRNA が DNA の二重螺旋のどこかに割り込み、そこから螺旋構造を押しやりながら徐々に情報を読み取っていく。
- ② DNA は押しやられることで二重螺旋構造が密になって (詰まって) いき、ついにこれ以上密になれないほど圧縮されてしまう。
- ③ これをさらに mRNA が読み取ろうとして前進すると、螺旋構造がほどけて、代わりに超螺旋が作られていく。こうなると、この螺旋構造や超螺旋構造を解消するとき、DNA は大きな被害を受けることになる。摩擦で発火する可能性すらあるといわれている。

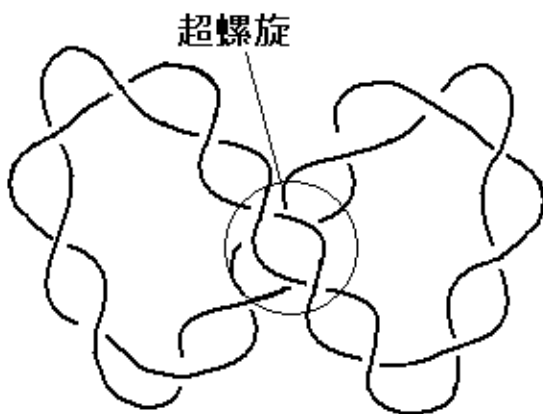


図 23 超螺旋

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。

以上のように、結び目理論の考え方によって、DNA の変化を表し、考察することができるのである。

■ 細胞の視点から考える

DNA は自身のねじれを解消しようとして、超螺旋状態になるが、細胞の視点からみると、超螺旋状態が必ずしも悪いというわけでもない。例えば、図 24 において、P の部分が、A,B の遺伝子を働かせる指示を出しているとするとき、遺伝子 B は P の部分から離れすぎている。

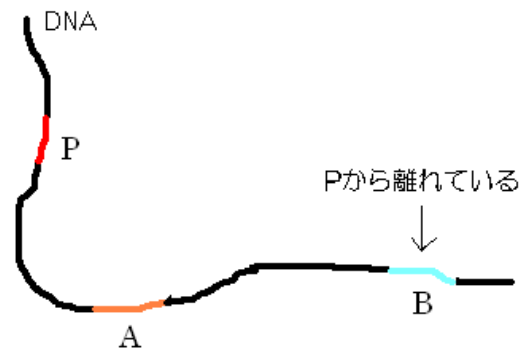


図 24 超螺旋ではない場合

しかし、DNA が超螺旋状態になると、DNA がねじれて絡まってくるため、図 25 にあるように、P の部分と A,B の部分の距離が縮まってくる。したがって、細胞からすると、遺伝子に指示を出しやすいという利点がある。したがって、DNA が超螺旋状態になっているほうがよい場合もある。

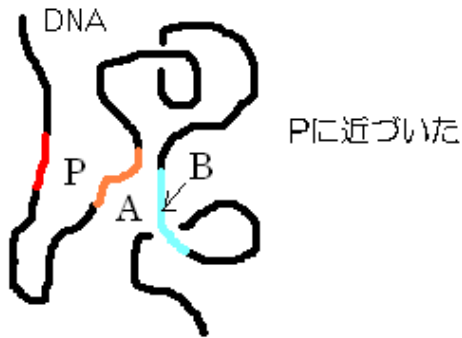


図 25 超螺旋である場合

■タングル

DNA の結び目問題に関して考える際、タングルを理解しておく都合が良い。

タングル(**tangle**)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。尚、結び目や絡み目が円と交わる4点はいつも磁石の4方向NW(北西), NE(北東), SW(南西), SE(南東)にあるとする。

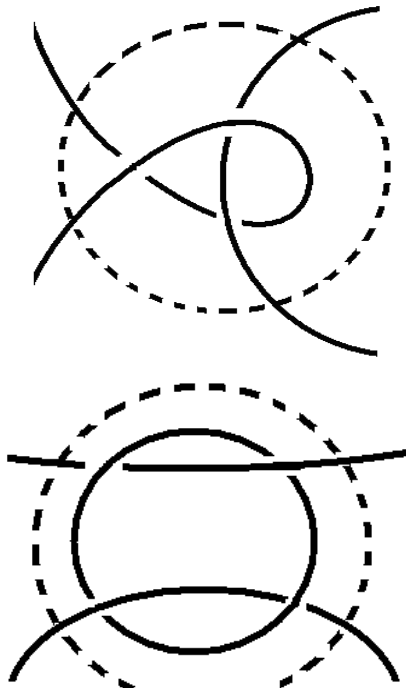


図 26 タングルの例

■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ながら、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 (equivalent)**であるという。

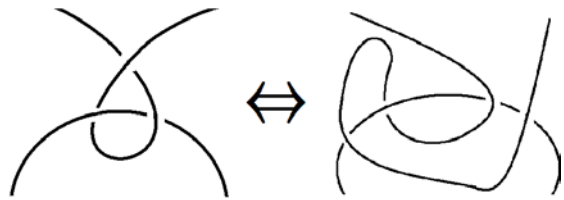


図 27 同値なタングルの例

■有理タングル

有理タングル(**rational tangle**)とは、タングルを数字に変えたものであり、以下の法則に従って構成されるタングルのことを表す。図 28,29 を参照されたい。

- 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 右の2本の線を撚り合わせる。
- ④ ②~③の繰り返し。
- ⑤



図 28 有理タングルの構成(1)

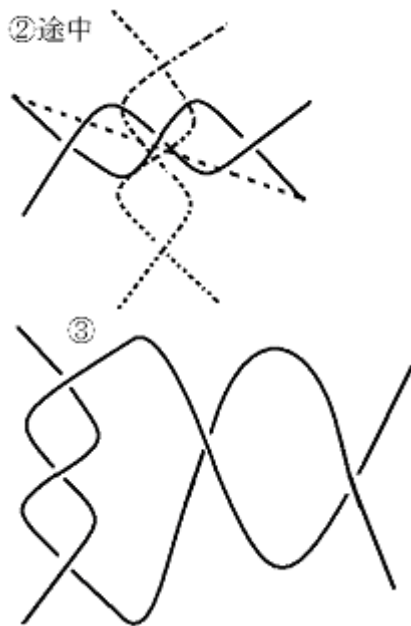


図 29 有理タングルの構成(2)

このとき、螺旋の回転方向を数値化するのだが、交点の上を通る結び目の部分(上道)が正の傾き(左下から右上の傾き)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」である。次に作った右の螺旋は上道が負の傾きでねじれている回数は2回なので「-2」となり、③は「3 -2」である。

有理タングルが同値であるかを調べ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」があるとして、この数列に対応するいわゆる連分数(continued fraction)を計算する。例えば「-2 3 2」なら、

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

として、「3 -2 3」なら、

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

と計算する。このような計算によって、2つのタングル「-2 3 2」と「3 -2 3」は同値であることがわかる。

4. 考察・感想

本研究を通して、結び目理論が DNA の話と密接につながっていることがわかった。また、酵素の働きや mRNA が遺伝子情報を読み取る仕組みが数学を使ってモデル化できることを知った。

超螺旋状態になっている DNA 程早く移動することが可能となり、電極に置くと長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事で酵素がどれだけ 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、数学的な側面としては、結び目という幾何の対象が、不変量を通して、多項式という代数の対象で語られていることに興味をおぼえた。

5. 今後の課題

ブラケット多項式以外によく知られている、ジョーンズ多項式やアレキサンダー多項式、コンウェイ多項式などの不変量を理解するとともに、ブラケット多項式がライデマイスター変形をしても不変である理由の裏づけを行いたい。

また、結び目理論を DNA と関係付けることはできたが、細胞の視点を加えて考察したい。そして、細胞の他にどのような視

点から結び目理論と DNA が関わっていくかを調べたい。

さらに、DNAだけではなく、他の分野にも応用できないか、さらなる研究を行いたい。

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] 「結び目と量子群」、村上順著、朝倉書店(2000)
- [3] 「曲面・結び目・多様体のトポロジー」、S.C.カールソン著、金信泰造訳、培風館(2002)
- [4] 「結び目のお話」、小林毅著、講義資料(2006)
- [5] 「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

今回の研究にご指導して下さった佐藤先生、川口先生に深く感謝します。また、本研究に際し、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。さらに、助言を下さいました河合先生、近藤先生にも感謝いたします。