

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 19 日現在

機関番号：12401
 研究種目：基盤研究（C）
 研究期間：2010～2012
 課題番号：22540066
 研究課題名（和文） 結び目理論の生物学への応用

研究課題名（英文） Application of knot theory to biology

研究代表者 下川 航也
 (SHIMOKAWA KOYA)
 埼玉大学・理工学研究科・准教授
 研究者番号：60312633

研究成果の概要（和文）：

結び目理論のバンド手術、デーン手術等の研究を行い、それを DNA に働く酵素の研究等に応用を行った。

今回の主な研究成果は次の通りである。(1)交点数が 7 交点以下の結び目とトーラス絡み目の間のバンド手術の特徴付け。(2) +交差から-交差への符号付き交差交換と、-交差から+交差への交差交換の両方で結び目解消される結び目の特徴付け。(3)2 平面間のある格子結び目の最少ステップ数の研究。(4)組み換え酵素 Xer による絡み目への作用で結び目が得られる場合の研究。(5)A-polynomial が因数を持つ背景の研究。これらの結果は論文として発表している。さらに、これらに関する結果を国際会議での招待講演で発表し、論説を執筆した。

研究成果の概要（英文）：

We studied band surgery and Dehn surgery and applied the results to studies of enzyme acting on DNA.

The results we obtained are the followings: (1) Characterization of band surgeries between knots with at most 7 crossing and torus links. (2) Characterization of knots with a +- unknotting operation and a -+ unknotting operation. (3) Study of minimum step number of knots in a slab region in the simple cubic lattice. (4) Study of Xer site-specific recombination on a catenane yielding a knot. (5) Study of A-polynomials of knots with non-trivial factors. These results have been published in papers, invited talks in international conferences, and review papers.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2011 年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2012 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学・幾何学

キーワード：位相幾何

1. 研究開始当初の背景

DNA は 2 重螺旋構造を持っており、その

平行な 2 本の鎖を 1 本の紐とみなすと、トポロジーを考えることが出来る。例えば、環

状DNAを考えると、DNA結び目またはDNA絡み目が現れる。タンパク質は、紐状の構造を持っているが、高次構造を取る際に、結び目や絡み目が現れる。近年、結び目理論で得られた結果が、DNA やタンパク質の研究に応用され、活発に研究が行われている。具体的には、結び目のデーン手術の結果が DNA 組み換え酵素の作用のメカニズムの特徴付けに応用され、結び目の長さに関する研究が酵素内の DNA のトポロジーやタンパク質の構造の研究に応用されている。今回の研究も上記の 2 つの要素に注目し、純粋数学の結び目理論の研究と、コンピュータを用いたシミュレーションを行い、その結果を DNA、タンパク質の研究に応用する。

2. 研究の目的

結び目理論の研究を行い、その結果を DNA やタンパク質の研究へ応用する。特に、(A) 結び目、絡み目において有理タングル手術、デーン手術の特徴付けの研究を行い、その結果を用いて DNA 組み換え酵素の作用の位相幾何学的な特徴付けへと応用する。

(B) 格子結び目の最小ステップ数、結び目の長さの研究を行い、その結果を用いてタンパク質のフォールディングや酵素の作用を受けている DNA の幾何的構造の研究へと応用する。

3. 研究の方法

酵素の働きとしたバンド手術に関しては、その特徴付けをバンドをザイフェルト曲面上に乗せることにより行った。非存在の証明には、結び目や絡み目の不変量を用いて証明した。また同様の議論を他の局所変形にも拡張した。

格子結び目については、限られた領域における最少ステップ数の特徴付けを行った。主な議論は、射影図として得られる重み付きグラフの特徴付けである。

4. 研究成果

(1) DNA に作用する酵素の働きは、バンド手術を用いてモデル化することが出来る。結び目と絡み目の間のバンド手術について、交点数が7交点以下の結び目とトーラス絡み目の間のバンド手術の特徴付けを行った。バンドの非存在の証明には、絡み目の指数、Jones 多項式、Alexander 多項式等を用いて議論を行った。バンドが一意であることの証明は、これまで得られた結果を応用している。(Progress of Theoretical Physics Supplement に発表)

(2) DNA に作用するトポイソメラーゼは交差交換により DNA 結び目を解消している。2 橋結び目について、+交差から-交差への符号付き交差交換と、-交差から+交差への交差交換

の両方で結び目解消される場合の特徴付けを行った。特に、結び目解消数が1である非もろて型2橋結び目で、+交差から-交差への符号付き交差交換と、-交差から+交差への交差交換を持つものを決定した。もっとも簡単な例は8交点であり、次に簡単な例は15交点のものである。(Progress of Theoretical Physics Supplement に発表)

(3) これまでの研究で3次元空間内の格子結び目のステップ数の研究を行ってきたが、今回 slab と呼ばれる2平面間にある格子結び目の最少ステップ数の特徴付けを行った。特に、1-slab 内の三葉結び目の最少ステップ数は26であることを示し、10交点以下の結び目の最少ステップ数についてシミュレーションによりその上限を求めた。また、1-slab 内では、同じ型の格子結び目であるが、1-slab 内の BFACF 変形では移りあえないものの存在を証明した。また、一般の n-slab (n は2以上) ではこのようなことは起こらず、同じ型の格子結び目は有限回の BFACF 変形で移りあうことを示した。(J. Phys A: Math. Theor. に発表)

(4) Xer による絡み目への作用で結び目が得られる場合の研究を行い、1997年、2007年の実験結果の数学的特徴付けに成功した。ここで得られた結果は、種数1の2橋結び目からトーラス絡み目 $T(2, 2k)$ へのバンド手術の特徴付けである。この場合、バンド手術を種数1の2橋結び目からトーラス絡み目 $T(2, 2k)$ へのバンド手術と考えることにより、そのバンドは種数1のザイフェルト曲面上に載せることが出来、そのようなバンドの特徴付けを行った。この結果を用いると、トーラス絡み目 $T(2, 6)$ から7交点の結び目 τ_2 および τ_4 へのバンド手術を特徴付けることが出来、DNA 絡み目酵素 Xer のメカニズムの特徴付けに応用を行った。(Algebr. Geom. Topol. に発表)

(5) A-多項式が因数分解出来る結び目の例の構成をタングル分解を用いて構成した。特にその結果を用いて、結び目の例外デーン手術の研究を行った。2つの結び目群の間に全射写像が存在するとき、A-多項式では一方が他方の因数となるという関係がある。この研究では、そのような全射写像が存在しない場合にも、結び目のA-多項式がもう一つの結び目のA-多項式の因数になる場合を考察した。この研究に関し2つの論文“Tangle sums and factorization of A-polynomials”、“Tangle sums, norm curves and cyclic surgeries”を書き、前者は現在投稿中であり、後者は数理解析研究所講究録に掲載が決定している。

(6) バンド手術に関する研究と、そのDNA組み換え酵素 Xer の研究への応用を行った。この研究は論文にまとめ現在投稿中である。さらに国際会議のプロシーディングに掲載が

決定している (“Site-specific recombination modeled as a band surgery: Applications to Xer recombination”).

(7) 「DNA と結び目理論」というタイトルで論説記事を書き、雑誌「数学」に発表した。

これらの研究に基づき、国際会議「Statistical Physics and Topology of Polymers with Ramifications to Structure and Function of DNA and Proteins」を京都大学において2010年8月に開催した。その会議において招待講演「On bounds for the minimum step number of knots in the simple cubic lattice」を行った。この国際会議の報告集は Progress of Theoretical Physics Supplement より2011年11月に発行されている。さらに、国際会議の基調講演を行った(9th East Asian School of Knots and Related topics)。また、医学系の国内研究集会で講演を行った。日本数学会では、2012年度秋季総合分科会トポロジー分科会において特別講演を行った

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計5件)

- ① Isabel K. Darcy, Kai Ishihara, Ram Medikonduri and Koya Shimokawa, Rational tangle surgery and Xer recombination on catenanes, *Algebr. Geom. Topol.* **12** 1183-1210 (2012). (査読有り)
- ② K. Ishihara, R. Scharein, Y. Diao, J. Arsuaga, M. Vazquez and K. Shimokawa, Bounds for the minimum step number of knots confined to slabs in the simple cubic lattice, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45** 065003 (2012). (査読有り)
- ③ Chris Soteros, Kai Ishihara, Koya Shimokawa, Michael Szafron and Mariel Vazquez, Signed unknotting number and knot chirality discrimination via strand passage, *Progress of Theoretical Physics Supplement* **191** 78-95 (2011). (査読有り)
- ④ Kai Ishihara and Koya Shimokawa, Band surgeries between knots and links with small crossing numbers, *Progress of Theoretical Physics Supplement* **191** 245-255 (2011). (査読有り)
- ⑤ Koya Shimokawa and Mariel Vazquez, DNA と結び目理論, *数学* **63** 237-242 (2011). (査読有り)

[学会発表] (計19件)

- ① 下川 航也, 結び目理論の分子生物学への応用 -部位特異的組み換えのタングル解析-, 研究集会「応用トポロジーとシス

テムバイオロジー: 数理医学の新たな挑戦」, 2013年2月22日, 大阪大学. (招待講演)

- ② Koya Shimokawa, Application of knot theory to molecular biology -Band surgery and site-specific recombination-, The 9-th East Asian School of Knots and Related Topics, 2013年1月17日, 東京大学. (招待講演)
- ③ 下川 航也, Tangle analysis of site-specific recombination -Unlinking pathways of Xer-*dif*-FtsK-, 日本数学会2012年度秋季総合分科会トポロジー分科会特別講演, 2012年9月20日, 九州大学. (招待講演)
- ④ Koya Shimokawa, Tangle analysis of unlinking by Xer-*dif*-FtsK system, International conference “Discrete and Topological Models in Molecular Biology” 2012年3月13日, University of South Florida. (招待講演)
- ⑤ Koya Shimokawa, On shortest pathways of unlinking by XerCD-*dif*-FtsK, AMS 2012 Spring Western Section Meeting “Special Session on Knotting in Linear and Ring Polymer Models” 2012年3月3日, University of Hawaii. (招待講演)
- ⑥ 下川 航也, The XerCD-FtsK system unlinks replication catenanes in a stepwise manner, 研究集会「結び目の数学 III」2010年12月22日, 日本大学.
- ⑦ Koya Shimokawa, On bounds for the minimum step number of knots in the simple cubic lattice, 国際会議「Statistical Physics and Topology of Polymers with Ramifications to Structure and Function of DNA and Proteins」, 2010年8月3日, 京都大学. (招待講演)

[図書] (計1件)

Proceeding of the international conference “Statistical physics and topology of polymers with ramifications to structure and function of DNA and proteins”, *Progress of Theoretical Physics Supplement* **191** (2011), Edited by Tetsuo Deguchi, Hisao Hayakawa, Koya Shimokawa, Andrzej Stasiak and Kyoichi Tsurusaki.

[その他]

国際会議「Statistical Physics and Topology of Polymers with Ramifications to Structure and Function of DNA and Proteins」 Kyoto, Aug 2--6, 2010,

Organizers: T. Deguchi, A. Stasiak, H. Hayakawa and K. Shimokawa,
YITP, Kyoto University, Japan を開催。

ホームページ

<http://www.rimath.saitama-u.ac.jp/lab.jp/KoyaShimokawa.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

下川 航也 (SHIMOKAWA KOYA)

埼玉大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：60312633

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし