

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 25 日現在

機関番号：16201

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2015～2016

課題番号：15H06453

研究課題名(和文)量子場の理論の数理と応用

研究課題名(英文)Mathematical aspects of the quantum field theory and its applications

研究代表者

藤 博之(Fuji, Hiroyuki)

香川大学・教育学部・准教授

研究者番号：50391719

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、量子場の理論の数理的側面の分子生物学への応用に関する研究に取り組んだ。より具体的には、ファットグラフやランダム行列模型といった数理物理学で研究が進んだ手法をRNAの幾何学的構造の特徴づけに応用する研究を行った。

ファットグラフは1次元の向きづけられたグラフであり、数学の諸分野や行列模型の研究などに広く用いられてきた。このグラフはRNAやタンパク質といった生体高分子の幾何的かつトポロジカルな特徴づけに役立てられる。本研究では、RNAの特徴づけに有用な"boundary length and point spectrum"を提唱し、トイモデルとしてRNA行列模型を構築した。

研究成果の概要(英文)：Mathematical aspects of the quantum field theory and its applications to the molecular biology has been studied in this research project. We applied fatgraphs and random matrix model techniques to the geometric study of Ribonucleic Acid (RNA).

The fatgraph is the one dimensional oriented graph utilized widely in geometry, topology, representation theory and quantum field theory. The fatgraph is also useful to describe geometric and topological characterizations of the biopolymers such as proteins and RNAs. In this research, we introduced a novel kind of combinatorial parameters referred to "boundary length and point spectrum" which enables us to characterize the secondary structure of RNAs including pseudoknot structures.

We constructed a matrix model for RNAs. Using this model, one can enumerate the number of fatgraphs with the fixed type of the boundary length and point spectrum, and this enumerative model would be useful to understand statistical behaviors in RNA databases.

研究分野：数理物理学

キーワード：行列模型 RNA 位相的漸化式

1. 研究開始当初の背景

(1) 量子場の理論の数理的側面は、超弦理論をはじめとする理論物理学の諸分野の研究において、多様な形で研究が進められてきた。これらの理論的進展は、物理学のみならず数学の諸分野においても新たな研究分野の開拓に影響をもたらしてきた。こうした数学-物理間の学際研究は発展しているものの、まだ限られた分野間での研究に留まっており、横断的研究の幅を広げるチャンスが、潜在的数多くあるといえる。特に、生物学と数学の学際研究はまだ限られたものであり、今後より大きな発展が見込まれる分野であると考えられる。

(2) 生体高分子である RNA やタンパク質は細胞内では折り畳まれ、特定の「形」を有する。この形を予測する問題は構造予測問題として知られており、特に RNA の二次構造予測問題は、生物情報理論における有名な問題であり、数多くの優れた進展が報告されている。RNA の二次構造はステム構造とループ構造からなるが、これに擬ノット構造を加えると、構造予測計算が困難になる。こうした困難を克服し、構造予測を向上させるためには、RNA の「形」を表現するための数学（幾何学やトポロジー）が役立てられる可能性が大いに見込まれており、応用数理研究が活発におこなわれている研究分野の一つとなっている。

2. 研究の目的

(1) 本研究は、量子場の理論の手法を応用して、ファットグラフを用いて生体高分子の RNA やタンパク質の「形」を表現し、二次構造の統計的分布を調べる数理モデルの構築を目的とする。特に本研究では 0 次元量子場の理論である行列模型を用いて RNA やタンパク質のファットグラフモデルを構築し、行列模型の物理量の解析を通じて、生体高分子の折り畳まれた数理構造を調べる。

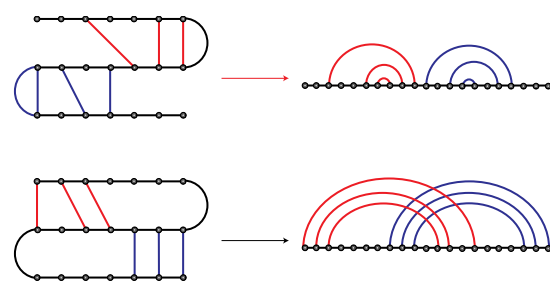
(2) 上述の RNA やタンパク質を調べるための数理モデルとして行列模型を用いるものの、従来の幾何学や理論物理学の研究で着目してきた物理量とは若干異なるため、行列模型の新たな解析手法を開発することが必要となる。このような形で新たな観点から行列模型にアプローチし、これまでの数理的研究において気づかれていなかった行列模型の諸性質を明らかにすることも目的とする。

3. 研究の方法

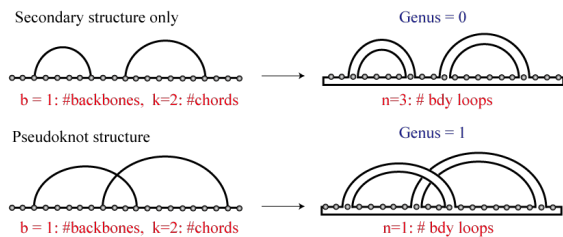
(1) ファットグラフを用いた RNA の幾何学的表現については、Orland-Zee や Andersen-Penner らによる一連の先行研究によって、優れた数理的表現法を与えることが明らかにされてきた。ファットグラフモデルは、RNA の二次構造と擬ノット構造をトポロジカルに判別し、両者をまとめて取り扱うことができる点が特徴であると言える。

この点は、次の図の例を通じて理解するこ

とができる。



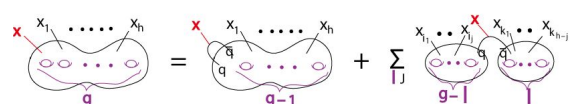
左側に描かれた塩基対を含む RNA の模式図であり、上は擬ノットを含まず、下は擬ノットを含む。これらは右図のように部分コード図形として描くと、擬ノットの有無は弧状に描かれたコードの交差の有無によって明確にすることができる。



さらに部分コード図形を植えずのように太らせてリボン状の 2 次元グラフ（ファットグラフ）として描くと、擬ノットの有無は種数の違いとしてトポロジカルに判定できる。このような形でファットグラフを RNA の幾何学的表現に用いることで、擬ノット構造を含む RNA の「形」をより明確にできる。本研究では、こうした形でファットグラフを利用して、RNA やタンパク質の数理モデルを構築する。

(2) ファットグラフは量子場の理論においてはファインマングラフとして登場する。ファインマングラフは粒子の生成・消滅を伴う反応過程を表すものであり、量子場の理論の摂動論では中心的役割を果たしている。特に行列模型のファインマングラフはファットグラフとなることが知られており、このアイデアを応用してリーマン面のモジュライ空間の幾何の研究の進展に役立てられてきた。本研究においてはそれらのアイデアを応用して、(1)で述べた RNA やタンパク質の幾何的配位の数え上げを行う数理モデルの構築する。

また、構築したモデルの解析においては、数理物理学の研究を通じて開発された種々の手法を用いる。中でも特に位相的漸化式（下図は漸化式の模式図）や量子曲線とい

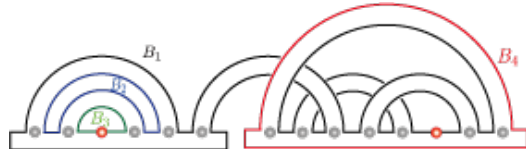


った現代的手法を応用すると同時に、Hurwitz 理論の研究で知られる cut-and-join 方程式を応用した新たな解析手法などを開発する。

4. 研究成果

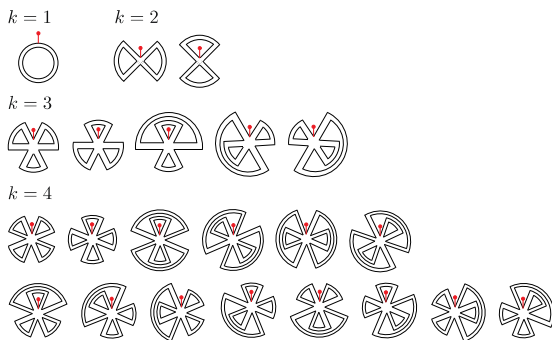
(1) RNA をファットグラフとして表した場合、主鎖や塩基対の数に加えて、種数が擬ノット構造を特徴づけるパラメータとして入るものの、「形」に応じた自由エネルギーを定めるには情報が不足している。この点を補うため、論文 では Boundary length and point spectrum (以下 BLP スペクトルと省略) と称する点付きファットグラフに対する新たな指標を導入した。この指標は、従来の構造予測研究で知られていたエネルギー関数を定めるのに十分な情報を保持しており、擬ノットを含む RNA を特徴づけるのに十分なパラメータを与えることとなる。

BLP スペクトルをはじめとするファットグラフの組み合わせデータ (タイプと呼ぶ) によって、RNA の折り畳み構造を特徴づけることができる。そこで本研究では、最も単純な可能な RNA の形の数え上げを行うトイモデルとして論文 では RNA 行列模型を構築した。(2) RNA 行列模型は、RNA のタイプ毎に発生頻度を与えるトイモデルとなっている。この頻度は行列模型の分配関数を計算することによって決定される。理論物理学においては、こうした行列模型の分配関数を計算する手法が数多く知られており、論文 ではその中から位相的漸化式と量子曲線の手法を応用



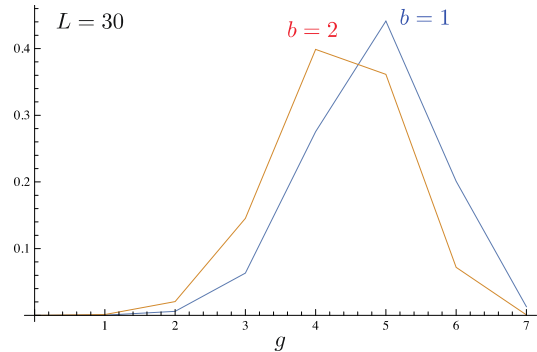
して、分配関数を解析した。

この解析の結果、分配関数の種数展開の低次の明示式が得られ、その結果を一部読み取ると、下図のようなグラフの数え上げが全て正しく再現できることが確認できた。



(3) さらに論文 および では、Hurwitz 理論の研究で用いられてきた、cut-and-join 方程式に相当する漸化式を RNA 行列模型に対して導出し、その解を求めることに成功した。Cut-and-join 方程式とは、部分コード図形のコードを一つ除いた時に、タイプ毎に出現するグラフの数を決定する漸化式であり、この方程式を解くことで、分配関数を逐次的に決定することができる。

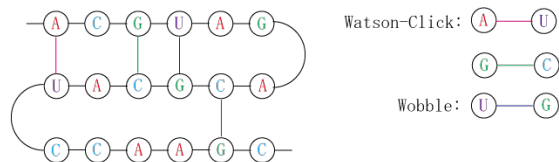
この方程式の解は位相的漸化式や量子曲線の解析結果と一致しており、これら一連の解



析結果の整合性が確かめられた。

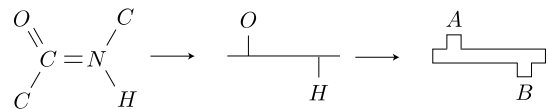
さらにこれらの解析結果を用いて、主鎖数やヌクレオチド数を固定した下での、種数に応じた出現率を求める解析なども行ない、RNA 行列模型が RNA の構造を記述するトイモデルとしての有効性などを吟味した。

(4) RNA 行列模型を自然な形で拡張したトイモデルもいくつか考案した。一つ目の拡張モデルは、RNA ヌクレオチドに含まれる 4 種の塩基 (ACGU) を区別した 4 色モデルは、ランダム行列を 4 つ用いることで実現した。また、タンパク質をファットグラフで表し、それを 2 つのランダム行列を用いて行列模型として実現することにも成功した。



4-matrix integral

これら 2 つのモデルに対しては、cut-and-join 方程式を RNA 行列模型と同様に導出し、これらのモデルの可解性についても明らかにした。さらにランダム行列の数を一般化した統一模型 (センテンスモデルと称する) も構築し、今後の解析を見越してより広い枠組みを準備する段階に至った。



5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

Jørgen Ellegaard Andersen, Hiroyuki Fuji, Masahide Manabe, Robert C. Penner, and Piotr Sułkowski, “Enumeration of chord diagrams via topological recursion and quantum curve techniques,” *Trav. Math.* **25** (2017) 285-323, arXiv: 1612.05839 [math-ph].

Jørgen Ellegaard Andersen, Hiroyuki Fuji, Masahide Manabe, Robert C.

Penner, and Piotr Sułkowski, "Partial chord diagrams and matrix models," *Trav. Math.* **25** (2017) 233-283, arXiv: 1612.05840 [math-ph].

Jørgen Ellegaard Andersen, Hiroyuki Fuji, Robert C. Penner, and Christian M. Reidys, "The boundary length and point spectrum enumeration of partial chord diagrams using cut and join recursion," *Trav. Math.* **25** (2017) 213-232, arXiv: 1612.06482 [math-ph].

〔学会発表〕(計 5 件)

H.Fuji, "Fatgraph models for RNA molecules," iTHEMS seminar, March 2017, 理化学研究所(和光市).

H.Fuji, "Partial chord diagrams and matrix models," Colloquium "The Algebra and Geometry of Modern Physics" at Department of Physics, University of Warsaw, March 2017, ワルシャワ(ポーランド).

H.Fuji, "Enumerating chord diagrams via matrix models," RMT2015: "Random matrix theory from fundamental mathematics to biological applications", OIST, November 2015, 沖縄科学技術大学院大学(恩納村).

H.Fuji, "On the enumeration of chord diagrams and the BPZ equation via the matrix model," Workshop "Quantization of Spectral Curves" Osaka City University, November 2015, 大阪市立大学(大阪市).

H.Fuji, "Enumerating chord diagrams via matrix models," 96e rencontre entre mathématiciens et physiciens théoriciens : Géométrie et biophysique, University of Strasbourg, September 2015, ストラスブール(フランス).

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況(計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
なし

6. 研究組織
(1) 研究代表者
藤 博之 (Fuji Hiroyuki)
香川大学・教育学部・准教授
研究者番号：50391719

(2) 研究分担者 ()

研究者番号：

(3) 連携研究者 ()

研究者番号：

(4) 研究協力者
Jørgen Ellegaard Andersen
Robert C. Penner
Piotr Sułkowski
Christian M. Reidys
真鍋征秀 (Masahide Manabe)