

令和 5 年 6 月 8 日現在

機関番号：12611

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K21827

研究課題名（和文）立方格子内の空間グラフの研究とその高分子科学への応用

研究課題名（英文）Research on spatial graphs in the simple cubic lattice and its application to polymer science

研究代表者

下川 航也（Shimokawa, Koya）

お茶の水女子大学・基幹研究院・教授

研究者番号：60312633

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：頂点の次数が3である格子空間グラフについて、BFACF移動を分類した。また、格子空間グラフに対し、BFACF移動による同値類と、空間グラフの全同位変形による同値類が一致することを証明した。これは、適切にBFACF移動を定義することにより、格子結び目・絡み目の結果が格子空間グラフに拡張されたことを示している。

空間グラフのBFACF移動は平面的な移動であり、2次元平面内のグラフについても同様にBFACF移動を考察できるため、まず2次元平面内のグラフの場合についてシミュレーションを行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

この研究では、近年合成されている複雑な構造をもつ高分子のトポロジーの構造の数学的モデルを扱っている。今回の成果は、トポロジーの一分野である結び目理論の研究を行ったもので、立方格子内の空間グラフのトポロジーに関するものである。応用として多環状高分子、タンパク質の立体構造、DNAのR-ループへの応用が見込めるものとなっており、今後様々な分野にわたる発展が期待される。

研究成果の概要（英文）：We classified BFACF moves for lattice spatial graphs whose vertices have degree 3. We also proved that for lattice space graphs, the equivalence class by BFACF moves and the equivalence class by ambient isotopy of the space graphs coincide. This indicates that by properly defining BFACF moves, the lattice knot and entanglement results were extended to lattice space graphs.

Since the BFACF move for spatial graphs is a planar move and the BFACF move can be considered for graphs in the 2-D plane as well, we first simulated the case of graphs in the 2-D plane.

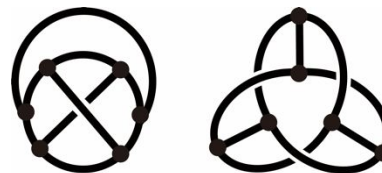
研究分野：トポロジーとその応用

キーワード：空間グラフ 格子モデル 多環状高分子

1. 研究開始当初の背景

これまでは DNA やタンパク質などの高分子は、立体格子内の結び目や絡み目を用いて研究されてきた。研究代表者もそのモデルを用いて、DNA のモデル化、DNA 組換え酵素の研究を行ってきた。

しかし近年では、右図のような分岐を持つような複雑な形状の多環状高分子が数多く合成されている。その立体形状は、空間グラフを用いて表される。また、これまで結び目を用いて研究されてきたタンパク質についても、フォールディングの研究の際に S-S 結合を考察することが必要となり、その形状は空間グラフを用いて研究すべきであることが最近明らかになった。よって、これまでの研究手法の拡張が必要な段階となっている。



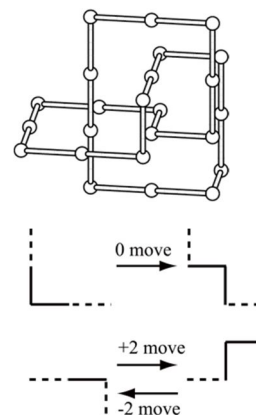
近年複雑な多環状高分子が合成されているが、その理論的側面の研究が立ち後れていた。研究代表者は多環状高分子の構造をグラフを用いて表現し、その合成方法を議論してきたが、実際多環状高分子の空間内でのトポロジーについては、まだ研究が進んでいなかった。

最近になり、出口哲生氏(お茶の水女子大)らにより、m カープと呼ばれる空間グラフについて、慣性半径の研究などが行われている。その研究では crankshaft 移動などを用いて形状を変化させるため、空間グラフのトポロジーは変わってしまう点が問題であった。そのためこれらの議論では、トポロジー(空間グラフ型)を固定して考えるべきである実際の多環状ポリマーの慣性半径を求めることが出来ない。そのため、トポロジーを保存するようなシミュレーションを行う数学的基礎付けの研究が必要であった。

その背景を踏まえ、格子モデルを用いた高分子研究の分野の権威である Whittington 氏、Soteros 氏らと議論したが、空間グラフのトポロジーを保つような立方格子上の空間グラフの変形は、これまで知られていないことが判明した。以上の背景の元に、立方格子上の空間グラフの変形の研究を行うこととした。

2. 研究の目的

格子結び目(右図参照)・絡み目は、理論的側面、シミュレーションの側面の両面からこれまで数多くの研究が行われ、その結果は高分子トポロジーの研究に応用され、顕著な成果を挙げてきた。この研究では、格子結び目・絡み目の研究を、格子空間グラフへの拡張し、その研究の基礎付けを行う。その成果を、これまで行われてこなかった、トポロジーを保つ多環状高分子シミュレーションへと応用を行う。特に、格子結び目・絡み目のトポロジーを保つ変形として、BFACF 移動が知られているが、格子空間グラフについてもトポロジーを保つ変形として BFACF 移動を定義し、その特徴付けを行う。



3. 研究の方法

グラフが各頂点で次数が 3 である場合を扱う。BFACF 移動は格子上の正方形を用いた格子結び目の変形として考えられることに着目し、その観点で空間グラフの BFACF 移動を考察する。まず格子空間グラフの BFACF 移動を分類する。そして、BFACF 移動による同値類と、空間グラフの全同位変形による同値類が一致することを示す。その結果をもちいて、2次元平面内に埋め込まれた次数 3 のグラフについてシミュレーションを行う。さらに、3次元空間内の格子空間グラフについてもシミュレーションを行う。

4. 研究成果

頂点の次数が 3 である格子空間グラフについて、BFACF 移動を分類した。また、格子空間グラフに対し、BFACF 移動による同値類と、空間グラフの全同位変形による同値類が一致することを証明した。これは、適切に BFACF 移動を定義することにより、格子結び目・絡み目の結果が格子空間グラフに拡張されたことを示している。

空間グラフの BFACF 移動は平面的な移動であり、2次元平面内のグラフについても同様に BFACF 移動を考察できるため、まず 2次元平面内のグラフの場合についてシミュレーションを行った。結び目の場合の BFACF 移動については、どの移動をどの確率で行うかというパラメータが重要な意味を持つが、これまでの初期的な実験ではパラメータをいくつか試すことにより、全同位である 2つのグラフが実際に BFACF 移動で移り合うことが実験により観察された。今後はこの成

果を 3 次元空間の格子空間グラフに拡張していく。特に、格子空間グラフの最小ステップ数の研究、エントロピーの研究を行う。これらの成果は、多環状高分子の機能へのトポロジーの寄与、DNA の R-loop の分類等への応用が見込まれている。

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 4件）

1 . 発表者名 Koya Shimokawa
2 . 発表標題 3-dimensional topology and poly-continuous pattern
3 . 学会等名 Osaka City University International Academic Symposium Mathematical Science of Visualization, and Deepening of Symmetry and Moduli" (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 Koya Shimokawa
2 . 発表標題 3-dimensional topology and poly-continuous pattern
3 . 学会等名 Special Session on Applied Knot Theory, AMS Sectional Meeting AMS Special Session, Fall Southeastern Sectional Meeting (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 Koya Shimokawa
2 . 発表標題 3-dimensional topology and polycontinuous pattern
3 . 学会等名 International Symposium "Polymers and networks via topology and entanglement" (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Koya Shimokawa
2 . 発表標題 3-dimensional topology and poly-continuous pattern
3 . 学会等名 MATERIALS RESEARCH MEETING 2019, Mathematical Materials Science -Mathematical Approaches for Materials Designs in the Data Driven Society- (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Shimokawa, Koya, Ishihara, Kai, Tezuka, Yasuyuki	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer, SpringerBriefs in the Mathematics of Materials	5. 総ページ数 89
3. 書名 Topology of Polymers	

〔産業財産権〕

〔その他〕

下川研究室 https://www-p.sci.ocha.ac.jp/shimokawa-lab/ 国際会議ホームページ http://www.rimath.saitama-u.ac.jp/lab.jp/kshimoka/polymersandnetworks2019.html

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会 国際シンポジウム "Polymers and networks via topology and entanglement"	開催年 2019年～2019年
--	--------------------

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------