

## 結び目不変量の物理学への一つの応用\*

Tetsuo Deguchi

出口 哲生

東京大学理学部物理学教室

東京都文京区本郷 7 丁目 3 番地 1 号

環状高分子とは長い高分子鎖が閉じているもののことであるが、環状になったことによって統計力学的にどのような影響があるのだろうか。環状高分子の具体例としては、環状 DNA 分子が考えられるが、その他にも様々な環状の高分子がある。分子が幾つか集まって一つの単位を構成し、それが大体  $10^5$  個以上鎖状につながっているものを想定している。

環状の DNA は生体内でリラックスした形と縮み上がったような形（スーパーコイルリング）の二つの形状をとることが知られている。そしてこのスーパーコイルリングの形状をうまく選ぶことによって、D

---

\*数理解析研究所短期共同研究 代数的組み合わせ論と低次元トポロジー、1992年12月14日-16日

DNAの複製や蛋白質へ情報を伝達したりする生化学反応をコントロールしているらしい。そして、トポアイソメラーゼという酵素がDNA二重螺旋を切ったりつなげたりしてそのリンキングナンバーを変えて、リラックス形とスーパーコイルリング形の間の変換をやっているらしい。ここでもしランダムにつなぎ変えが起こったらどうなるか、ということ調べ、そしてこれを手始めにしてトポロジーの効果を組織的に調べてDNAの形状変化・制御の機構を解析しよう、というのがDNA分子に対して環状高分子の応用研究をすることの動機である。このような問題意識は生物物理学と生化学の境界領域では1960年代以来ずっと引き継がれて今日に至っている。スーパーコイルリングをうまく制御出来れば、生命の起源を理解することも可能となるであろう。

分子数が小さい場合の通常の統計力学的取り扱いとは異なり、高分子の統計力学は一般に独特な取り扱いをする必要がある。例えば鎖が長いために長距離の相関があるとみることもしできる。高分子ネットワークのからみあいから、ゾル・ゲル相転移などの臨界現象が説明されている。(現在この現象は紙おむつに應用されている。)環状高分子を研究するには閉じることによるトポロジー的制限をうまく取り扱う必要があり、ここが理論的には非常に興味深い。以下で議論されるように不変量をうまく用いてこの効果が議論出来るようになれば、これは多体問題としても非自明な取り扱いになるであろう。

以上のような背景のもとで、統計物理学あるいは物性物理学の基

礎論の一つの研究テーマとして、環状高分子の統計力学を考察する。一番簡単な問題として、閉じたランダムウォークを発生してその結び目型を判定するということを考える。基本的には次のようなやり方である。ランダムウォークは3次元の座標データの列として与えられる。これを2次元平面に射影して、何等かの不変量を計算し、その結果から結び目型を当てる。そしてランダムウォークを多数発生させて調べて、統計的法則性を見出そう、というわけである。ランダムウォークのステップの数はまず100以上、大体1000ぐらい、そして試行回数は10000回以上を目安としている。

この問題の要素は次の3点である。

1. 閉じたランダムウォークの発生
2. 結び目型の判定
3. 統計法則の発見

我々は2に関して議論する。1に関してもガオッシアン・ウォーク、2 量化法、モンテカルロ法、分子動力学的方法など、様々な方法が行われていることを注意しておきたい。(3に関しては現在研究が進行中。)

1970年代以来、幾つかのグループがランダム結び目の数値実験を実行しているが、結び目の判定に用いられる方法はいつもアレクサンダー多項式の特殊値  $\Delta_K(-1)$  であった。(  $\Delta_K(t)$  とは結び目  $K$  のアレクサンダー多項式のこと、これは通常ある変数  $t$  のロー

ラン多項式である。) また、ジョーンズ多項式やその他の最近の新しい不変量を計算するということは全くなされていない。

これにはつぎの二つの理由がある。(1) 数值的発散あるいはメモリーの制限。(2) 計算時間が指数時間であるものは事実上計算不可能である。

アレクサンダー多項式の数値が使われていて多項式値が用いられていないのは、もし多項式値の計算(変数  $t$ )をそのまま計算機で実行するとメモリーが足りなくなってしまうためである。さてもし絶対値が1でない数値をこの変数に代入すると、1000個もの交差点がある場合  $t^{\pm 1000}$  というような項が計算の途中で出現してしまうので、数值的に非常に大きな数と非常に小さな数の両方を取り扱う必要が生ずる。そこで絶対値が1で非自明な数、つまり-1が代入されるのである。アレクサンダー多項式は行列式を用いて計算出来るので  $N$  の3乗の計算時間で求められる。 $N$  は交差点の数である。つまり多項式時間であり、実際に計算可能である。

ジョーンズ多項式についてはこれを計算するには指数時間がかかってしまうことが知られている。例えば交差点の数が一つ増えると計算時間は2倍になるというわけである。この困難のため、ほとんど誰もジョーンズ多項式を数値計算的研究に応用していなかったと考えられる。(実はこの研究会の席上で Jaeger 氏から、ジョーンズ多項式の一部の多項式 (truncated Jones polynomial) を多項式時間で計算する方法を Przytycka and Przytycki が示しているという

ことを教えて頂いた。但し彼らの方式は多項式値の計算で、数値的発散やメモリーの問題が解決できないようである。)

この問題に対して実は少し異なったやり方で解決法がある。多項式を計算するの多項式を直接用いずに、その係数を多項式時間で求めることができるのである。( Deguchi and Tsurusaki、1992年4月の日本物理学会での講演; preprint 1992, to appear in Phys. Lett. A. ) トリックは量子群の準古典展開を考え、ジョーンズ多項式(あるいは量子群の表現から導かれる様々な不変量)の準古典展開の係数(整数値)を計算するということである。すると、展開の $r$ 次の係数は $N$ の $r$ 乗の計算時間で求められるのである。ここで $N$ は交差点の数そして交差点が10個程度以下であれば実質的にはこの展開の係数をつかって結び目を分類することができる。この方法により、数値的発散の困難あるいはメモリーの問題、そして計算時間の問題の二つの問題が同時に解決できる。

こうして、大きな結び目を計算機で判定するという問題は実質的には解決できた。現在このアルゴリズムを用いてランダム結び目の統計的性質をいろいろ調べている状況である。絡み目に対しても全く同様なアプローチができるので、例えば環状高分子間のトポロジカル相互作用も調べることができる。これはいわゆるゴム弾性の説明に用いられるようにエントロピーの力を求めていることに相当する。

さて、応用研究の側面の他にも意外なおもしろい結び付きがあった。じつはこの準古典展開の係数はバシリエフ不変量を与えている

のである。というわけで、バシリエフ不変量は多項式不変量の多項式計算可能な部分を抽出した不変量であると言える。このことは、昨年の夏にジョーンズ氏にプレプリントを送った際にすぐに手紙の返事が来たが、その中で実質的に指摘されたといってよい。(バルナータンの論文を参考にするように、との指示があった。) 多項式値と整数値の違いは、結び目理論の不変量の一般理論(バシリエフ不変量は結び目不変量の統一理論といってもよいのかもしれない)においても、実質的応用研究においても重要な違いとなっている。

最後に、研究会に参加させて頂きましたことを、河野先生に感謝いたします。