

メタンプラズマにおける化学反応解析のための有向グラフを用いたネットワーク構造分析(Ⅱ)

Analysis of network structures of directed graphs for chemical reactions in methane plasmas II

○信藤 恭佑¹, 宮城 茂幸¹, 橘 邦英², 酒井 道¹(1. 滋賀県立大, 2. 大阪電通大)

○Kyosuke Nobuto¹, Shigeyuki Miyagi¹, Kunihide Tachibana² and Osamu Sakai¹ (1.Univ of Shiga Pref, 2. Osaka Electro-Communication Univ)

E-mail:oo23knobutou@ec.usp.ac.jp

1. はじめに

社会の進化に伴い、統計科学の環境が大きく変化している。扱えるデータの平均サイズが大きくなり、データ解析の重要性が高まっている。データ解析の中に、ネットワーク分析があり、解析対象を問わないものの、利用される分野はいまだ限定的である[1]。前報告[2]では、化学反応系をネットワーク構造分析の対象とすることを提案し、その反応系の有向グラフ表現および指標計算を試みた。今回、グラフの表現方法を修正し、そのグラフから得られた指標と反応系における粒子の特性との関係を検討した。

2. 解析の概要

2.1 化学反応のネットワーク構造化

化学反応を分析するにあたり、今回はメタンプラズマの化学反応式を使用した[3]。考慮した反応式に対して Table 1 に示す手順を適用し、各辺が方向をもつ有向グラフとして表現した。また1つの辺の重みを1として、隣接行列を作成し、中心性指標 PageRank および媒介中心性により評価を行った。ネットワークの描画は Cytoscape (NRNB, オープンソースソフトウェア(<http://www.cytoscape.org/>))を用い、指標計算は統計分析フリーソフト R を使用した。

Table 1 One example of reaction step

reaction	$\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}_2$
nodes	a:CH ₃ , b:CH ₂ , c:H ₂ , d: H
edges	Edge A:From CH ₃ to CH ₂ , Edge B:From CH ₃ to H ₂ , Edge C:From H to CH ₂ , Edge D:From H to H ₂

3. 解析結果

Figure 1 に作成したネットワーク図を示し、粒子毎の指標計算結果を Figure 2 に示す。CH₃,CH₄が両指標において高い値をとり、安定構造粒子は反応系において多くの反応の生成種となり、中間生成されやすい粒子の媒介中心性が高くなることが確認できた。講演では他のネットワーク分析による化学反応系の特性についても報告する。

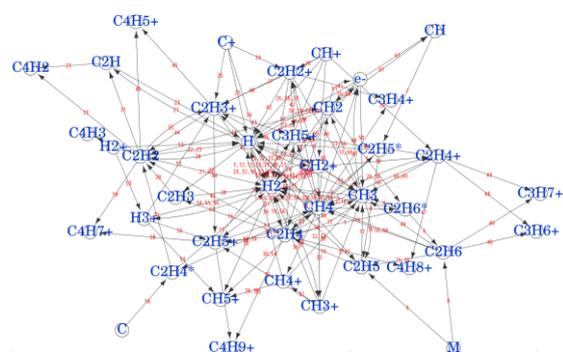


Figure 1 Network structure of methane chemical reactions. Names of species are shown at nodes and chemical reactions are shown at directed edges.

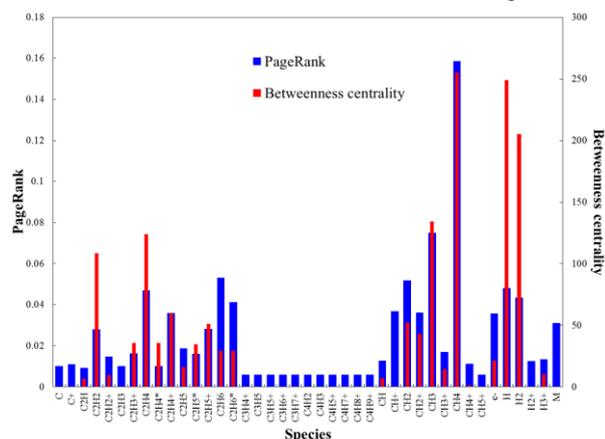


Figure 2 Result of centrality index for each species. blue:PageRank and red:betweenness centrality.

参考文献

- [1] 金明哲, “ R で学ぶデータサイエンスネットワーク分析”, 共立出版, 2009年.
- [2] O. Sakai, K. Nobuto, S. Miyagi and K. Tachibana AIP Advances **5**, 107140 (2015).
- [3] K. Tachibana, M. Nishida, H. Harima and Y. Urano, J.Phys. **D** 17, 1727 (1984).