

# 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

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

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

○Kyosuke Nobuto<sup>1</sup>, Shigeyuki Miyagi<sup>1</sup>, Kunihide Tachibana<sup>2</sup> and Osamu Sakai<sup>1</sup> (1. Univ of Shiga Pref, 2. Osaka Electro-Communication Univ)

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

## 1. はじめに

社会と科学技術の進化に伴い統計科学の環境は大きく変化し、統計的データ解析の重要性が急速に高まっている。1990年代の Robert Gentleman らにより整備された R 等の解析環境は整いつつあるが、ネットワーク分析の解析対象はいまだ限定的である。すなわち、対象とされる分野は数学や社会学などネットワークの成り立ちと密接なデータであることが多い。本研究では、新たにプラズマ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、メタンプラズマの反応ネットワークを有向グラフで表現し、中心性指標の1つである PageRank により構成要素間の関係を考察した。

## 2. 提案手法および計算手法概要

文献[1]におけるメタンの化学反応式を Table 1 に示す手順により有向グラフで表現した。そして1つの反応の重みを1とし各要素の隣接行列から中心性指標 PageRank を計算することにより、電子の有無を考慮した構造考察の可能性を示した。

Table 1 One example of reaction step

|          |                                                                                          |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------|
| reaction | $\text{CH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}_2$                            |
| nodes    | a: $\text{CH}_3$ , b: $\text{CH}_2$ , c: $\text{H}_2$ , d: $\text{H}$                    |
| edges    | Edge A: From $\text{CH}_3$ to $\text{CH}_2$ ,<br>Edge B: From $\text{H}$ to $\text{H}_2$ |

## 3. 結果

Figure 1 に作成したネットワーク図を示し、各要素の PageRank 値のグラフを Figure 2 に示す。PageRank 値は要素に対して強い依存性を示し、電子を除くことで電子依存の高い要素の値が低下していることが示された。講演では他の指標による反応ネットワーク構造特性についても報告する。

## 参考文献

[1] K. Tachibana, M. Nishida, H. Harima and Y. Urano, J. Phys. D **17**, 1727 (1984).

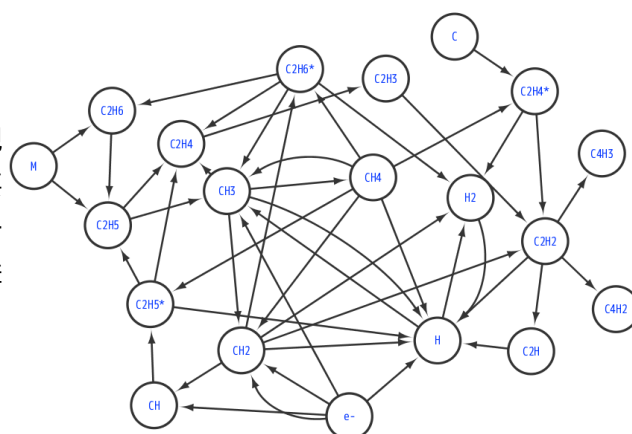


Fig.1 Network structure of methane chemical reactions. Names of species are shown at nodes and chemical reactions are shown at directed edges.

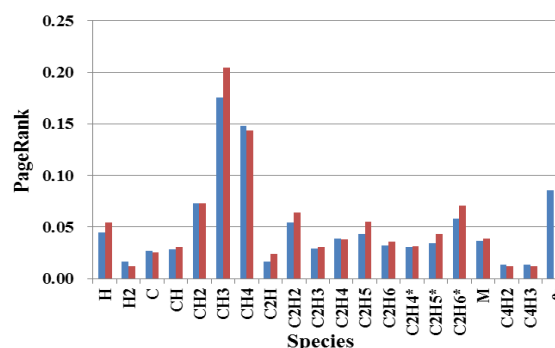


Fig.2 Change of PageRank for each node or species with (in blue) and without (in red) electrons.