



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Mean-Field Kinetic Theory Based Study of Boundary Condition at Vapor-Liquid Interface [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	今, 美沙紀
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第12761号
Issue Date	2017-03-23
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/65564
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.1/jp/
Type	doctoral thesis
File Information	Misaki_Kon_abstract.pdf, 論文内容の要旨



学 位 論 文 内 容 の 要 旨

博士の専攻分野の名称 博士（工学） 氏名 今 美沙紀

学 位 論 文 題 名

Mean-Field Kinetic Theory Based Study of Boundary Condition at Vapor-Liquid Interface
(気液界面における境界条件の平均場分子運動論に基づく研究)

本研究の対象は、蒸気とその凝縮相からなる気液二相系における熱・物質輸送現象である。本研究では特に、気液界面を通過する法線方向の質量流束に伴う熱・物質輸送現象に着目する。このような質量流束は、界面を通過する分子数の不釣り合いによって生じる微視的な現象である。一般的に、分子スケールの微視的な現象の影響は、希薄化の効果が表れるような低圧化を除いて空間内のごく狭い範囲に限られる。しかし、気液界面を通過する法線方向の質量流束は、界面近傍の分子スケールの領域を越えて蒸気の流れに影響を与えることが知られている。当然、このような質量流束を予測するためには微視的なアプローチが要求されるが、多くの流体力学解析では、界面近傍の微視的な現象を無視した簡易モデル（例えば、Hertz-Knudsen-Langmuir モデルや Hertz-Knudsen-Schrage モデル）が用いられてきた。これらのモデルは、界面近傍の微視的な現象には立ち入らず、巨視的な気液二相流れの大枠を捉えることができるという点では有用である。実際に、これらのモデルを用いた流体力学解析から、気液界面における質量流束の有無が気泡運動などの巨視的な気液二相流れに影響を与えることが示されてきた。しかし、このような簡易モデルから、物理現象を適切に予測できる保証はない。

これに対して本研究では、より微視的なアプローチから、気液界面における質量流束を適切に予測するためのモデル（気液界面における境界条件）を提案することを目指す。以降では、気液界面を通過して蒸気相へ向かう質量流束がある場合を「正味の蒸発」、逆に、液相へ向かう質量流束がある場合を「正味の凝縮」と呼ぶこととする。また、界面近傍における分子運動のモデルとして、「蒸発」「反射」「凝縮」という3つのプロセスについて考える。気液界面において蒸発分子の数が凝縮分子の数よりも多い場合には正味の蒸発が生じ、逆に、凝縮分子の数が蒸発分子の数よりも多い場合には正味の凝縮が生じる。原理的には、気液二相系についての分子計算によりこれらの分子を区別してその数を数えることで、正味の蒸発・凝縮における質量流束を求めることができる。しかし、この結果が直ちに流体力学方程式系のための境界条件となるわけでない。次の段階として、分子計算から得られた微視的な情報を、流体力学方程式系の境界条件として解の存在が保証される形で巨視的な情報に置き換える必要がある。

このための理論として、分子気体力学解析が有用である。以降では、基礎的な問題として、単成分の単原子分子からなる気液二相系について考えることとする。分子気体力学は、分子の統計的性質を表す関数（速度分布関数）から蒸気または気体の流体现象を記述する理論体系である。この理論体系において、境界と分子の相互作用は気体論境界条件（Kinetic boundary condition, KBC）として取り入れられる。また、流体力学方程式系のための境界条件は、気液界面と界面から離れた無限遠方での KBC を課した半無限領域における分子気体力学解析（Knudsen layer analysis）から導出される。Knudsen layer analysis については、これまでの網羅的な研究により一般的な理論体系が構築されているが、ここで用いられている KBC は多少の物理的考察の下に求められた、いわば「数理モデル」であるという問題点がある。これに対して、分子計算により界面近傍の分子プロセス（蒸発・反射・凝縮）を適切に反映した KBC を提案するというのが本研究の立場である。

分子計算により、KBC を調査するという研究例はこれまでにいくつか存在する。このような研究の多くは、KBC に含まれる未知係数を蒸発係数・凝縮係数として界面近傍の分子プロセスと関連

付けて定義することを試みている。しかし、同じ定義に従っているにも関わらず、各研究により蒸発係数・凝縮係数の値が異なることが報告されており、これらの係数の定義やその値については、統一的な見解が得られていないのが現状である。この要因は、界面近傍の分子プロセスが満たすべき物理的要請が明らかとなっておらず、これらを一意的に区別することができないためである。これに対して、本研究では、分子プロセスによらない、より基本的な法則から蒸発係数・凝縮係数について考察することを試みる。この法則は、いわば、気液界面における質量流束の保存則を微視的なスケールに拡張したものであり、気液界面における巨視的な質量流束と微視的な質量流束を接続する関係式（以下、質量流束の関係式）である。

以下では、本研究において具体的に、何をどのように明らかにするかについて、本学位論文の構成に沿って示す。第二章では、初めに、本計算において考える空間次元における定常な正味の蒸発・凝縮問題について説明する。また、本計算で用いる温度差のある二つの液膜とその間の蒸気から構成される系（two surface problem）について説明し、この系で生じる特徴的な現象について紹介する。次に、本計算で用いる平均場運動論に基づく分子計算方法について説明する。この分子計算方法を用いる利点は、従来用いられてきた分子動力学計算よりも少ない計算負荷で正味の蒸発・凝縮を伴う気液二相系についての分子計算を実施することが可能な点である。これにより、従来は数条件から数十条件の正味の蒸発・凝縮下でしか実施されていなかった分子計算を、百以上の網羅的な条件下で行うことが可能となる。

第三章では、気液界面における質量流束の関係式を調査する。そのために、第二章で説明した two surface problem について、二つの液膜の温度差を変えた 160 条件の分子計算を実施する。この計算から、多様な正味の蒸発・凝縮下における気液界面での質量流束を取得し、各液体温度について質量流束の関係式を定式化する。この結果から、界面近傍の分子プロセスを区別することなく、正味の蒸発・凝縮における質量流束と対応した蒸発係数・凝縮係数の値とその液体温度依存性を求める。

第四章では、第三章において求めた蒸発係数・凝縮係数の物理的意味を考察する。先述の通り、分子プロセスが満たすべき物理的要請については明らかになっていないが、適当な仮定の下でこれらを区別することは可能である。ここでは、蒸発分子が液体の情報のみを持つという「自発蒸発の仮定」に従って蒸発係数・凝縮係数を算出し、第三章で求めたこれらの係数と比較する。この結果から、蒸発係数・凝縮係数と分子プロセスの関連を明らかにすることで、これらの係数に物理的意味を付与した定義を与える。

第五章では、第三章と第四章において得られた蒸発係数・凝縮係数の検証を行う。このために、第三章と第四章で考えていた計算系とは異なる 2 つの気液二相系について分子計算を実施する。これらの分子計算と、求めた蒸発係数・凝縮係数を用いた分子気体力学計算によって得られた蒸気相での巨視量（速度・温度）を比較する。また、第三章で定式化した質量流束の関係式から、これら 2 つの系における蒸発係数・凝縮係数の液体温度依存性を調査する。これらの結果から、求めた蒸発係数・凝縮係数の値が計算系に依存するものであるか否かを検証する。

第六章では、ここまでの章の結果をまとめて、最終的に提案する気液界面における境界条件、およびその利点について説明する。