

氏名	キム 金	ヒョン 賢	ドゥッ 得
学位の種類	博士 (人間・環境学)		
学位記番号	人博第 243 号		
学位授与の日付	平成 16 年 3 月 23 日		
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当		
研究科・専攻	人間・環境学研究科 人間・環境学専攻		
学位論文題目	Local Nonequilibrium Effects in Kinetic Theory - The Boltzmann Equation - (気体分子運動論に見る局所非平衡の効果—ボルツマン方程式—)		
論文調査委員	(主査) 教授 富田博之	助教授 早川尚男	助教授 阪上雅昭

### 論 文 内 容 の 要 旨

統計力学は、1860年及び67年に Maxwell によって提出された気体の平均速度分布関数の理論と、1872年に Boltzmann によって提出された Boltzmann 方程式によって始まったと言っても過言ではない。以来、Boltzmann 方程式は非平衡送現象を論じる際に最も信頼のおける方程式として確立しており、その方程式の解析によって得られた数多くの結果は不朽のものとして多くの分野で共通の財産となっている。しかしながら、Boltzmann 方程式は非線形の積分項を含む偏微分方程式であり、その正確な取り扱いには困難を極めていた。そうした中で、希薄気体の場合に用いられる最も標準的な取り扱いの一つとして、1920年代に Chapman-Enskog 法が開発され発展したことにより、線形非平衡領域での非平衡速度分布関数の決定、ならびに流体力学方程式の導出と輸送係数の決定が可能になったと言えよう。

本論文では、まず 1 章において、以上の歴史的背景とともに最近の非平衡熱力学・統計力学に関する研究の動向を解説し、本研究に取り組むに至った経過と動機を述べている。本論文の主要な部分である 2 章では、熱流の存在するハードコア分子系に対する Boltzmann 方程式の熱流の 2 次までの非線形摂動解を、Chapman-Enskog 法に基づき求めている。この種の摂動解の求め方の一般的な手法は 1935 年に Burnett が開発したが、彼自身も含めて、その計算の煩雑さのために誰も 2 次摂動による速度分布関数の陽な形を求めていなかった。申請者はこの困難な問題に対して膨大な数式処理に取り組み、初めてその陽な解を求めた。Burnett は 2 次摂動解の陰な形を求めて、その流体力学方程式への影響を論じたが、その有効性は音波吸収や衝撃波の場合に確かめられている。本申請論文では、注意深い数学的な計算によって Burnett の摂動解を一般化することに成功したばかりでなく、Burnett 自身が求めた近似解の収束が不十分であることを示し、さらに陽な分布関数を初めて求めることに成功した。申請者が求めた 2 次摂動解の定量的な正当性は、既に他の研究者による分子動力学法を用いたシミュレーションによって高精度で検証されている。

3 章では、得られた結果の具体的な応用として、陽な関数形があって初めて計算が可能となる稀薄気体中の化学反応率を、Line-of-Centers モデルに基づき求めている。この化学反応率は、線形非平衡の影響が対称性により消えるために、従来は平衡状態を仮定した計算しか存在せず、この種の計算が待望されていた。実際、従来は根拠の薄弱なある種の実効理論にもとづく計算によって反応率の非平衡補正を論じていたが、本論文によって初めて化学反応率への非平衡効果が定量的に論じられた。さらに、化学反応率の実測とここで計算された反応率に差があるとすれば、それは壁近傍の温度ギャップの存在を意味し、その定量的評価が可能になることを指摘している。

4 章では、これまで提案されてきた様々な仮説的理論、すなわち、エントロピー最大原理や熱力学的母関数を非平衡定常状態まで無批判的に拡張した種々の変分理論の妥当性の検証を行っている。これは、今回求めた陽な解を用いることにより初めて可能となったものである。実際、ハードコア分子系の摂動解に基づき計算を行うと、熱流の存在する環境でのストレステンソルは異方性を持つことが明らかになった。一方、距離の逆 4 乗に比例する斥力を及ぼし合う Maxwell 分子系や Boltzmann 方程式の衝突積分を単一緩和時間を有するモデルとして置き換えた BGK 方程式の解は、等方的なストレステン

ソルをもつことが知られており、本論文の結果はこれらとの間に明らかに定性的な差を有している。これは、本研究によって非平衡定常状態の熱力学は容易に実現し得ないことが示されたものと言える。さらに、ここで求めた解は、Shannon エントロピーの極大条件により分布関数を求める Information Theory の解とも全く異なった振る舞いをするを明らかにしており、最近提唱されている定常熱力学の存在に関する予言を明示的に否定するなど、非線形領域への拡張を試みた安易な非平衡熱力学・非平衡統計力学の立場の脆弱性と根拠の乏しさを指摘している。

5章では本論文のまとめを行うと同時に、6章においてこの分野の研究の展望を論じている。

## 論文審査の結果の要旨

申請者は、1935年に Burnett が求め方を提唱して以来の懸案であった、Boltzmann 方程式の熱流についての 2 次摂動解を陽に求める問題に取り組み、本論文において、ハードコア分子に対する Boltzmann 方程式の熱流の 2 次までの非線形摂動解を Chapman-Enskog 法に基づき求めた事を報告している。この種の 2 次摂動による速度分布関数の陽な形は、2 次摂動の求め方の一般的手法の提唱者である Burnett 自身も含めて、その計算の煩雑さのために誰も求めていなかった。Burnett は 2 次摂動解の陰な形を求めて、その流体力学方程式への影響を論じたが、その有効性は音波吸収や衝撃波の場合に確かめられている。本論文では、極めて注意深い数学的な計算によって、Burnett が部分的に求めていた摂動解を一般化することに成功したばかりでなく、Burnett が求めた近似解の収束が不十分であることを示し、また陽な分布関数を初めて求めることに成功している。

本論文で申請者の用いた手法は数値シミュレーションとは一線を画しており、求めた結果が解析的手法に基づいたものであるだけに、摂動論の枠内では厳密な取り扱いとなっている。また、その解析の定量的な正しさは、本研究内容の論文公表後、直ちに他の研究者の分子動力学法を用いたシミュレーションによって高精度で検証されるに至っており、解析的表現の有用性に鑑みても、今後の Boltzmann 方程式の研究者にとって標準的な指標となるものと思われる。その意味で本論文は、堅実な方法による科学の前進に実質的な貢献を与えたものとなっている。

また本論文は、単に難解な数学的方程式を解いたというだけでなく、そのモデルの有用性と求めた解の信頼度故に、Line-of-Centers モデルに基づく化学反応率の正確な見積りをも可能にした。特に化学反応率の正しい非平衡補正は、申請者の研究によって初めて議論が可能になったことは注目すべきである。同時に、一部の研究者の間で熱狂的とも言える支持を集めている非平衡定常熱力学 (SST) や Information Theory などの仮説的理論の正当性の検証が可能になり、その結果、何れの理論も現時点のモデル化では正しくないことを指摘している。

これらの成果により、申請者の研究は物理学のみならず化学、応用数学の分野でも注目を集めている。既に本論文の内容の一部は欧文誌に 3 篇、参考論文として他に 1 篇が公表され、国際会議の会議録にも掲載されており、日本のみならず欧米でも注目されるようになってきており、既にヨーロッパの当分野の専門家の招きに応じて赴き、申請者の研究成果等に関する議論を行っている。

申請者の研究分野は、長い歴史をもつだけに単なる思いつきだけで研究成果を得られるものではなく、本論文では、オリジナルな研究成果のみならず、気体分子運動論の研究史、様々な解析手法の長所や短所をまとめ、同時に最近の非平衡定常熱力学 (SST) や Information Theory にみられる非線形非平衡熱力学の試みやその問題点、稀薄気体の有限濃度補正やその際の長距離相関の影響、境界の効果やその解析の試み等についても的確なレビューを行っており、オリジナル論文だけでは窺いしれない価値の高い博士論文となっている。

また、調査委員の全員の出席の下で行われた予備審査会において、論文の背景や詳細な解析に関するもの、解析の正当性や展望について調査委員の様々な角度からの多岐にわたるコメントや質問に対し、申請者はそのすべてに的確に応答し、本研究の背景や自己の研究成果の位置づけ、さらに物理学にとどまらず化学・熱工学等の広い分野における理解度の深さを示した。よって、本申請論文は、学際的研究をめざして創設された人間・環境学専攻分子・生命環境論講座の博士学位論文としてふさわしい内容を備えたものであると判断できる。

よって本論文は博士 (人間・環境学) の学位論文として価値あるものと認める。また平成 16 年 1 月 21 日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果合格と認めた。