Szerkesztette: Fülöp Tamás

Nemegyensúlyi termodinamika és szilárd közegek



Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 22

Nemegyensúlyi termodinamika és szilárd közegek Dr. Szarka Zoltán (1927–2015) emlékének szentelve



Szarka Zoltánt köszönti a Montavid Kutatócsoport 80. születésnapján; a képen (balról jobbra haladva) Szabó György, Béda Gyula, Szarka Zoltán, Asszonyi Csaba és Kertész Pál látható.

International Society for Rock Mechanics Mérnökgeológia-Kőzetmechanika 2018 Konferencia, Budapest

NEMEGYENSÚLYI TERMODINAMIKA ÉS SZILÁRD KÖZEGEK

SZERKESZTETTE

Fülöp Tamás

BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, Budapest Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, Budapest

Írta

Asszonyi Csaba, Écsi László, Fodor Tamás, Fülöp Tamás, Kovács Róbert, Lovas Ádám, Rieth Ágnes, Szarka Zoltán, Szücs Mátyás, Ván Péter

MÉRNÖKGEOLÓGIA-KŐZETMECHANIKA KISKÖNYVTÁR 22. KÖTET Egyesület a Tudomány és Technológia Egységéért 2018

SZERKESZTETTE

FÜLÖP TAMÁS BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, Budapest Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, Budapest

Írta

Asszonyi Csaba, Écsi László, Fodor Tamás, Fülöp Tamás, Kovács Róbert, Lovas Ádám, Rieth Ágnes, Szarka Zoltán, Szücs Mátyás, Ván Péter

A KUTATÁST ÉS A KÖTET MEGJELENÉSÉT

A MONTAVID TERMODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT, AZ EGYESÜLET A TUDOMÁNY ÉS TECHNOLÓGIA EGYSÉGÉÉRT, AZ NKFIH ÉS A VEGA

TÁMOGATÁSA TETTE LEHETŐVÉ

ISBN 978-615-80157-5-2 ISSN 1789-0454

Megjelent az *Egyesület a Tudomány és Technológia Egységéért* gondozásában Nyomdai munkák: Robinco Kft. Felelős vezető: Kecskeméthy Péter

©2018 Budapest, Asszonyi Csaba, Écsi László, Fodor Tamás, Fülöp Tamás, Kovács Róbert, Lovas Ádám, Rieth Ágnes, Szarka Zoltán, Szücs Mátyás, Ván Péter

TARTALOMJEGYZÉK

Elős	zó		9
	S	ZILÁRDTEST-REOLÓGIAI FELADATOK ANALITIKUS EGZAKT MEGOLDÁSA –	
		ALAGUTAK KÖRÜLI MECHANIKAI FOLYAMATOK MEGHATÁROZÁSA	
		(Asszonyi Csaba – Fülöp Tamás – Szarka Zoltán – Szücs Mátyás)	
1.	Motiv	/áció	11
2.	Reold	ígiai feladatok egy analitikus megoldási módszere	13
	2.1.	A reológiai egyenletrendszer	13
	2.2.	Az időfüggő rugalmasságtani együtthatók módszere	16
3.	Néhá	ny egyszerű példa a módszer alkalmazására	20
	3.1.	Furat homogén, izotrop feszültségmezőben	21
	3.2.	Furat homogén, anizotrop feszültségmezőben	22
	3.3.	Gömb alakú üreg homogén, izotrop feszültségmezőben	23
	3.4.	Furat önsúlyával terhelt közegben	24
		3.4.1. Hidrosztatikus kezdeti feszültségi állapot ($k = 1$)	27
		3.4.2. Gátolt oldalirányú tágulás $\left(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta}\right)$	27
		3.4.3. Szabad oldalirányú tágulás $(k = 0)$	29
4.	Az is	mertetett feladatok megoldása konkrét anyagmodellekkel	30
	4.1.	Kelvin–Hooke-modell	31
	4.2.	Kluitenberg-Verhás-Hooke-modell	32
	4.3.	Elmozdulásmezők	33
5.	Továl	bbi lehetőségek	69
Köszö	Köszönetmondás ϵ		
Irodal	om		70

ANYAGI SOKASÁGOK ÉS ANYAGFÜGGVÉNYEK (*Ván Péter – Écsi László*)

1.	Beve	zetés	73
2.	Miért van szükség anyagi sokaságokra?		74
3.	Anyagi kinematika		
	•	3.0.1. Anyagi időderiváltak	80
	3.1.	Térbeli és anyagi mérlegek	81
		3.1.1. Nanson tétele	81
	3.2.	Mérlegek	82
	3.3.	Skalár mérleg	82
		3.3.1. Tömeg	82
	3.4.	Vektor mérleg	83
		3.4.1. A lendület mérlege	84
4.	Vége	s deformációs termosztatika	85
5.	Össze	efoglalás	86
Köszö	önetm	ondás	87
Iroda	lom		87

1.	Bevez	zetés	89	
	1.1.	Célkitűzés	91	
2.	A hốy	vezetési egvenletek	91	
	2.1.	Memória- és nemlokális hatások	92	
	2.2.	A hővezetési elmélet általánosítása	92	
	2.3.	Hőtágulással csatolt hővezetés és rugalmasság	99	
		2.3.1. Az alapegyenletek	99	
		2.3.2. A levezetés	100	
3.	Nume	erikus megoldási módszerek	102	
	3.1.	Bevezetés	102	
	3.2.	Az explicit módszer	103	
		3.2.1. Diszkretizálás	103	
		3.2.2. Konzisztencia	105	
		3.2.3. Stabilitásvizsgálat	107	
	3.3.	Az implicit módszer	110	
		3.3.1. Implicit módszer: I. rész	110	
		3.3.2. Implicit módszer: II. rész	112	
		3.3.3. A Fourier-egyenlet megoldása	115	
		3.3.4. Az MCV-egyenlet megoldása	116	
		3.3.5. GK-egyenlet megoldása	116	
		3.3.6. Ballisztikus-konduktív egyenlet megoldása	119	
4.	A Gu	yer-Krumhansl-egyenlet analitikus megoldása hőimpulzus peremfeltétel esetén	119	
	4.1.	Bevezetés	119	
	4.2.	Feladat kitűzése	119	
	4.3.	Megoldás	120	
		4.3.1. I. szakasz	120	
		4.3.2. II. szakasz	123	
	4.4.	A hőmérsékletmező meghatározása	124	
		4.4.1. Az implicit numerikus megoldással való összevetés	127	
Köszö	Köszönetmondás			
Irodal	lom		128	

NEM-FOURIER HŐVEZETÉSI EGYENLETEK ÉS MEGOLDÁSI MÓDSZEREIK (Lovas Ádám – Rieth Ágnes – Kovács Róbert – Fülöp Tamás)

NEM-FOURIER HŐVEZETÉS KÍSÉRLETI ÉS VÉGESELEMES VIZSGÁLATA (Lovas Ádám – Fodor Tamás – Kovács Róbert)

1.	Méré	ési eljárás bemutatása	
	1.1.	A flash módszer	
	1.2.	A mérés elrendezése	135
	1.3.	Mérés kiértékelése	138
		1.3.1. Hővezetési egyenletek megoldása	138
	1.4.	Kondenzátorminták	
	1.5.	Félvezetők	145
	1.6.	Al-globocer fémhab	
	1.7.	Fémhab	
	1.8.	Kőminták	151
		1.8.1. Kőminták anyagi paramétereinek vizsgálata	151
		1.8.2. Kőminták hővezetési tulajdonságainak vastagságfüggése	157
	1.9.	Eredmények összefoglalása	165
2.	Vége	eselemes szimulációk	165
	2.1.	Kétrétegű korong	
	2.2.	Húszrétegű korong	
	2.3.	Ötvenrétegű korong	
	2.4.	Hasábos szerkezetű minták	
		2.4.1. Következtetések	

Köszönetmondás	178
Irodalom	178

Szilárd közegek reológiája a GENERIC nemegyensúlyi termodinamikai leírásban (Szücs Mátyás)

1.	Bevez	zetés	181		
2.	A GE	NERIC formalizmus és a hozzá vezető út	183		
	2.1.	A Hamilton-elv	183		
	2.2.	A Hamilton-féle kanonikus egyenletek	187		
	2.3.	A Poisson-zárójelek	190		
	2.4.	Disszipatív rendszerek leírása	193		
	2.5.	A GENERIC fomalizmus	194		
	2.6.	A GENERIC néhány hasznos összefüggése	199		
3.	Belső	változós szilárdtest-reológia	201		
	3.1.	Az egy térdimenziós tárgyalásmód	203		
		3.1.1. A kiindulási rendszer	203		
		3.1.2. A kiterjesztett rendszer	205		
		3.1.3. A belső változó kiküszöbölése: a Kluitenberg–Verhás-modellcsalád	208		
		3.1.4. A modell beágyazása a GENERIC keretelméletbe	209		
	3.2.	A három térdimenziós tárgyalásmód	219		
		3.2.1. A kiindulási rendszer	219		
		3.2.2. A kiterjesztett rendszer	221		
		3.2.3. A belső változó kiküszöbölése: a deviatorikus-gömbi alak	223		
		3.2.4. Az egyenletek beágyazása a GENERIC keretelméletbe	224		
4.	Követ	tkeztetések	229		
5.	Össze	foglalás	231		
A.	Funkc	cionálderiváltak	232		
B.	8. A jacobi.m program használata 2				
Köszö	Köszönetmondás				
Irodal	rodalom				

Előszó

A 2018-as Mérnökgeológia–Kőzetmechanika Konferenciára készítette el legújabb kötetét a Montavid Termodinamikai Kutatócsoport. A korábbiakhoz hasonlóan, az itt megjelent írások közös vezérelve a nemegyensúlyi termodinamikai módszertan. Ugyanannak az általános kontinuum-termodinamikai megközelítésnek találhatjuk itt meg különböző konkrét szempontok szerinti vizsgálatait. Ezzel párhuzamosan figyelhető meg a másik közös szál: a kőzetek mint különösen fontos alkalmazási terület szem előtt tartása. A kőzetek elegendően bonyolult közegek ahhoz, hogy mind idő-, mind helyfüggés szempontjából jócskán túl kell lépjünk az egyszerűbb modelleken, mechanikai és termodinamikai – így hővezetési – oldalról egyaránt, jól tesztelik tehát az elmélet fejlettségi szintjét. Ezzel összhangban, új kísérleti megközelítésekre van szükség, és új numerikus számítási eljárásokra. Emellett a gyakorlat számára értékes kimenet a megformálódó új gondolkodásmód, az új fogalmak, tanulságos példák, melyek segítségével a bonyolult, összetett helyzetek elemzése könnyebbé válik.

Legutóbbi kötetünkkel, szomorú apropóként, Marta Doležalovától kellett búcsúznunk. Ez alkalommal a Montavid Kutatócsoport egy olyan tagjának emléke előtt tisztelgünk megrendülten, aki még 88 éves korában, élete utolsó hónapjaiban is fáradhatatlanul dolgozott közös kutatásunkban, az első fejezetben bemutatott új eredményeinket ő alapozta meg. Szarka Zoltán hiánya fájó űr. De ő jelen van eredményeinkben és szívünkben egyaránt.

A szerkesztő köszönetet mond Szücs Mátyásnak a kötet megjelenésében nyújtott segítségéért. A Kedves Olvasónak kellemes és értékes olvasmányélményt kíván a Kutatócsoport nevében:

Budapest, 2018. április 3.

Fülöp Tamás szerkesztő

Szilárdtest-reológiai feladatok analitikus egzakt megoldása – alagutak körüli mechanikai folyamatok meghatározása

Asszonyi Csaba¹ – Fülöp Tamás^{1,2} – $Szarka Zoltán^{\dagger;1}$ – Szücs Mátyás^{1,2} ¹Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, Budapest ²BME GPK Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, Budapest

Reológiai anyagtörvényű szilárd közegek mechanikai folyamatainak meghatározása lényegesen bonyolultabb probléma, mint a rugalmas megfelelőiké, mivel ezen feladatok már az erőegyensúlyi közelítés esetén is időfüggőek, a helyfüggés mellett. A Volterra-elv segítségével a lineáris reológiai feladatok megoldása a megfelelő Hooke-rugalmas probléma megoldásából származtatható, azonban a Volterra-elv felhasználhatósága korlátozott, például időfüggő peremfeltételek esetén alkalmazása bonyodalmas. Ilyen, időfüggő peremfeltételek segítségével modellezhetőek például az alagútnyitási folyamatok is, ezért kifejlesztettünk egy másik analitikus módszert, mellyel ilyen reológiai közegekre vonatkozó, időfüggő peremfeltételekkel megadott problémák oldhatók meg. Ennek során a megfelelő rugalmasságtani megoldást tesszük alkalmas módon időfüggővé, és így a reológiai parciális differenciálegyenlet-rendszert közönséges differenciálegyenlet-rendszerre vezetjük vissza. Jelen írásban ezt a módszert alkalmazzuk különböző kezdeti feszültségállapotú közegekben nyitott alagutakra. A számítások azt mutatják, hogy már a legegyszerűbb reológiai modellekben is váratlan lefutású, erős tranziensek léphetnek föl.

1. Motiváció

A rugalmas szilárd közegek nem feltétlenül annyira rugalmasak, mint gondolnánk. Bányászok körében ismert tapasztalat, hogy a vágat, ahol a műszak kezdetén még könnyedén, állva végig lehetett sétálni, a műszak végére jelentősen összezsugorodott, és visszafelé csak négykézláb volt járható. Egy föld alatti kőzettömegben nyitott üreg sokszor csak évek alatt veszi föl végleges alakját (ld. 1. ábra). A rugalmasságra alapozott várakozásunkhoz képest tehát sokszor késleltetve és csillapítva jelentkezik a külső hatásra adott

[†]2015-ben bekövetkezett haláláig Szarka Zoltán az önsúlyos mező esetének tárgyalását alapozta meg.



1. ÁBRA. *Fent:* Példák jelentős alagútkonvergenciára [1, 2]. *Lent:* A Bátaapáti Radioaktívhulladék-Tároló falában mért, 3–10 év időskálájú, exponenciális jellegű alagútkonvergenciák [3].

válasz. Az ilyen, reológiainak (más szóval viszkoelasztikusnak) nevezett viselkedés a műanyagok, a fák vagy az aszfaltok esetén jól ismert és nem meglepő, azonban az előző példák szerint a kőzetek is jobban közelíthetők ezekkel a modellekkel, mint a rugalmasakkal. A reológia jelenléte már standard kőzetmechanikai laboratóriumi vizsgálatok során is megfigyelhető, például az ultrahangosan meghatározott dinamikai rugalmasságtani együtthatók jelentősen nagyobbak lehetnek a statikus értékeknél {ld. pl. [4] adatait}. Idősorokból [5] beazonosítható diszperziós relációk már részletesebben, célzatosan végzett kúszási/relaxációs kísérletek pedig még közvetlenebbül mutatják a reológiai időfüggést.

A reológiai viselkedést bele kell tehát számolni a műszaki eszközök, létesítmények megtervezésébe. Ez nemcsak hátrányt, problémát jelenthet, hanem előnyt is lehet kovácsolni belőle: például alapozni lehet rezgéscsillapító, -elnyelő hatására. Biológiai eredetű minták és orvostechnikában alkalmazott protézisek egy része is mutat ilyen viselkedést, annak előnyeivel. (Vegyük észre: minden élőlény egy "puha gépezet", melynek megvannak az evolúciós okai.) Továbbá, visszatérve fő alkalmazási területünkhöz: a frissen nyitott alagutat is először elegendő lehet egy egyszerű ideiglenes biztosítással ellátni, és csak a mozgások zömének lejátszódása után építeni ki a végleges – így jóval olcsóbb – biztosítást. Az ASR módszer [6, 7, 8] pedig szintén a reológiára alapozva tud 3D *in situ* feszültséget meghatározni a pl. 600 m mélyről felhozott kőzetminták relaxációjának méréséből és kiértékeléséből.

Reológiai problémák megoldására jelenleg a leggyakrabban alkalmazott eljárások a diszkretizáláson alapuló numerikus módszerek, amik azonban több problémát is felvetnek. Az ilyen megoldások ugyanis erősen függenek az alkalmazott felosztás finomságától, továbbá bonyolult, háromdimenziós problémák megoldásakor jelentős futásidőkkel kell számolnunk. Kiindulásként, első közelítésként megfelelő lehet, ha a probléma egy leegyszerűsítettjének keressük analitikus megoldását. Ilyen megoldások által nemcsak közelítő eredményeket kaphatunk, hanem validálhatjuk is a numerikus módszereket.

Jelen írásban szilárdtest-reológiai problémák analitikus egzakt megoldásával és különböző alagútnyitási szituációkra való alkalmazásával foglalkozunk. Az analitikus megoldási módszer a [9] könyvfejezetben és a [10] diákköri dolgozatban került korábban ismertetésre, ezt az eljárást most új elrendezésekre is alkalmazzuk, és ezúttal az elmozdulásmezőt is kiszámítjuk és ábrázoljuk.

2. REOLÓGIAI FELADATOK EGY ANALITIKUS MEGOLDÁSI MÓDSZERE

2.1. A REOLÓGIAI EGYENLETRENDSZER

Ebben a tanulmányban a kis alakváltozási tartományban¹, kvázistatikus problémákkal foglalkozunk, azaz az impulzusmérleg-egyenletből elhanyagoljuk a gyorsulási tagot², így az impulzusmérleg a

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \stackrel{\leftarrow}{\nabla} = -\varrho \mathbf{g} \tag{1}$$

¹ Ekkor a ρ sűrűség állandónak tekinthető, a sebességgradiens-tenzor szimmetrikus része pedig az $\dot{\epsilon}$ alakváltozási sebességgel egyenlő.

² Ennek megfelelően ebben az írásban nem foglalkozunk hullámjelenségekkel, az impulzusmérleg pusztán térbeli parciális differenciálegyenlet; időfüggő peremfeltételek a reológiai anyagmodellen keresztül indukálnak nemtriviális időfüggést.

alakot ölti, itt σ a feszültségmezőt, ∇ a nabla operátort³, ρ **g** pedig a térfogati erősűrűséget jelöli. Az ε alakváltozásra vonatkozó (geometriai) kompatibilitási egyenlet

$$\vec{\nabla} \times \boldsymbol{\varepsilon} \times \boldsymbol{\overleftarrow{\nabla}} = \boldsymbol{0}, \tag{2}$$

mely egy másodrendű tenzormező "duplaörvény-mentességét" jelenti matematikai szempontból, eszerint létezik egy $\mathbf{u}^{\text{Cauchy}}$ ún. Cauchy-potenciál, melyből az alakváltozási tenzor egyszerűen származtatható, nevezetesen az

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \left(\mathbf{u}^{\text{Cauchy}} \otimes \boldsymbol{\nabla} \right)^{\text{Sym}} \tag{3}$$

összefüggéssel, a Cauchy-potenciál pedig az

$$\mathbf{u}^{\text{Cauchy}}(t,\mathbf{r}) = \mathbf{u}_0(t) + \mathbf{\Omega}_0(t)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \left\{ \boldsymbol{\varepsilon}(t,\tilde{\mathbf{r}}) + 2\left[\boldsymbol{\varepsilon}(t,\tilde{\mathbf{r}}) \otimes \boldsymbol{\nabla}\right]^{\mathbf{A}_{1,3}}(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}) \right\} d\tilde{\mathbf{r}} \quad (4)$$

ún. Cesàro⁴-formulával [11] származtatható az alakváltozási mezőből, ahol az \mathbf{r}_0 segédpontot és az integrálás útvonalát – mivelhogy egy potenciálról van szó – szabadon választhatjuk meg, továbbá ^{A1,3} egy harmadrendű tenzor első és harmadik indexében lévő antiszimmetrizáltját jelöli. Megjegyzendő, hogy a Cauchy-potenciál egy $\mathbf{u}_0(t)$ tetszőleges vektorfüggvény, ill. egy $\Omega_0(t)$ tetszőleges antiszimmetrikus tenzorfüggvény erejéig határozatlan, azaz egy tetszőleges időfüggésű merevtest-szerű elmozdulástól és egy forgástól eltekintve ekvivalens az \mathbf{u} elmozdulásmezővel. Ezen határozatlanságok – melyek az alakváltozási mező vonalmenti integrálásából, mint integrálási konstansok adódnak – megfelelő rögzítéséről gondoskodnunk kell, hogy a valós, fizikai elmozdulásmezőt kapjuk [12].

Az (1)–(2) egyenletek anyagmodelltől függetlenül teljesülnek. A feszültséget és alakváltozást összekapcsoló egyenlet – a konstitúciós összefüggés – rugalmas esetben a jól ismert Hooke-törvény:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{d}} = E^{\mathrm{d}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{d}}, \qquad \boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{s}} = E^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{s}}, \qquad (5)$$

ahol

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{s}} = \frac{1}{3} (\mathrm{tr}\,\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{1} \tag{6}$$

az alakváltozási tenzor gömbi (az 1 egységtenzorral arányos) része,

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{d}} = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{s}} \tag{7}$$

³ A klasszikus kontinuumelméletekben sokszor jobboldali gradienst, divergenciát, rotációt, ... szokás használni; az operátor fölött elhelyezett balra mutató nyíl arra utal, hogy az operátor a tőle balra lévő mennyiségre hat. Továbbá a szokásos jelöléseket használjuk: $\otimes \overleftarrow{\nabla}$ a gradienst, $\cdot\overleftarrow{\nabla}$ a divergenciát, $\times\overleftarrow{\nabla}$ pedig a rotációt jelöli.

⁴ejtsd: cseSZÁro

pedig a deviatorikus (nyom nélküli) része. Lineáris reológiai anyagtörvény esetén pedig a

$$S^{d}\sigma^{d} = \mathcal{E}^{d}\varepsilon^{d}, \qquad S^{s}\sigma^{s} = \mathcal{E}^{s}\varepsilon^{s}$$
(8)

összefüggéseket használjuk, ahol S^d és S^s a feszültséghez tartozó, \mathcal{E}^d és \mathcal{E}^s pedig az alakváltozáshoz tartozó polinomiális időderiváló operátorok:

$$\mathcal{S}^{d} = 1 + \tau_{1}^{d} \frac{\partial}{\partial t} + \tau_{2}^{d} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} + \dots, \qquad \qquad \mathcal{E}^{d} = E_{0}^{d} + E_{1}^{d} \frac{\partial}{\partial t} + E_{2}^{d} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} + \dots, \qquad (9)$$

$$\mathcal{S}^{s} = 1 + \tau_{1}^{s} \frac{\partial}{\partial t} + \tau_{2}^{s} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} + \dots, \qquad \qquad \mathcal{E}^{s} = E_{0}^{s} + E_{1}^{s} \frac{\partial}{\partial t} + E_{2}^{s} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} + \dots$$
(10)

A későbbiekben ismertetett megoldási módszer ugyan minden, ezen operátorokkal leírható lineáris reológiai problémára alkalmazható, azonban a továbbiakban ennek speciális esetére, az irreverzibilis termodinamika belső változós módszertanával, egyetlen, szimmetrikus másodrendű tenzori belső változó segítségével levezett, elméletileg [13] és kísérletileg (kőzetekre ld. [6, 7, 8], műanyagokra pedig [14]) is kitüntetett, ún. Kluitenberg⁵–Verhás-modellcsaládra szorítkozunk:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{d}} + \tau^{\mathrm{d}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{d}} = E_0^{\mathrm{d}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{d}} + E_1^{\mathrm{d}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{d}} + E_2^{\mathrm{d}} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{d}}, \tag{11}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{s}} + \tau^{\mathrm{s}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{s}} = E_0^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{s}} + E_1^{\mathrm{s}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{s}} + E_2^{\mathrm{s}} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{s}}.$$
(12)

Hagyományosan a szilárd közegek reológiai viselkedését mint a rugalmas folyamatok késleltetését és csillapítását szokás tekinteni. A termodinamikai módszertan azonban minőségileg új lehetőségekre is rávilágít, ezek közül egy a *reológiai oszcilláció* jelensége, melyet már a

$$\sigma + \tau \dot{\sigma} = E_0 \varepsilon + E_1 \dot{\varepsilon} + E_2 \ddot{\varepsilon} \tag{13}$$

alakú skaláregyenlettel is bemutathatunk. Az együtthatókból két fontos kombináció képezhető, az

$$I_1 = E_1 - \tau E_0 \tag{14}$$

csillapítási index és az

$$I_2 = E_2 - \tau I_1 \tag{15}$$

tehetetlenségi index [15]. Ezek közül I_1 -re az $I_1 \ge 0$ feltételt rója ki a termodinamika. I_2 viszont pozitív és negatív értéket egyaránt felvehet. Az $I_2 < 0$ eset túlcsillapított (avagy alultehetlen) esetnek nevezhető, ilyenkor a megoldások időben exponenciálisan csökkenő típusúak. Az $I_2 > 0$ alulcsillapított (avagy túltehetetlen) esetben ellenben időben oszcilláló (csökkenő amplitúdójú) a viselkedés, az ilyen anyagok tehát reológiai sajátfrekvenciával rendelkeznek, rezonanciába hozhatók. A rugalmas rezonanciával ellentétben, a

⁵ ejtsd: Klaitenberh

reológiai rezonancia lokális jelenség, független a test méreteitől és alakjától, pusztán az anyagi együtthatók közötti viszony következménye [13].

Rugalmasságtani probléma esetén az (1), (2), (5) egyenletek és a kitöltött tartomány peremére előírt peremfeltételek alkotják a megoldandó egyenletrendszert, melynek létezik és egyértelmű a megoldása, habár előállítása nem feltétlenül egyszerű, mivel (5) a feszültség- és alakváltozási tenzorok deviatorikus és gömbi részeire *külön-külön*, míg (1), (2) és a peremfeltételek a gömbi és deviatorikus részek *összegére* rónak ki feltételt. Amennyiben a probléma reológiai általánosításával foglalkozunk, úgy az (1), (2), (8), a peremfeltételek, továbbá – mivel az anyagmodell már időderiváltakat is tartalmaz – a kezdeti feltételek együttesen biztosítják a megoldás létezését és egyértelműségét [12]; a mennyiségek mind a helynek, mind az időnek függvényei, így az előbbi egyenletek és a peremfeltételek teljesülését minden időpillanatban biztosítani kell, ami még bonyolultabb feladat. Megkönnyítené a helyzetet, ha a probléma térbeli függésével nem kéne foglalkoznunk, hanem a rugalmasságtani megoldás helyfüggését kihasználva csak a probléma időfüggésével kéne foglalkoznuk.

Erre nyújt lehetőséget a Volterra-elv [11, 16, 17], mely szerint a rugalmasságtani megoldásban az E^d és E^s állandókat az S^d , S^s , \mathcal{E}^d és \mathcal{E}^s reológiai operátorokra cserélve, és a származó időbeli differenciálegyenleteket megoldva kaphatjuk a probléma reológiai megoldását. A Volterra-elv alkalmazása azonban bizonyos esetekben bonyodalmas lehet, például időfüggő peremfeltételek esetén, különösen ha a peremfeltételek a feszültségre vonatkoznak, mint a következőkben tekintett példákban (vö. [16]).

2.2. AZ IDŐFÜGGŐ RUGALMASSÁGTANI EGYÜTTHATÓK MÓDSZERE

Az előbbiek szerint a reológiai probléma analitikus tárgyalása meglehetősen bonyolult, mivel egy parciális differenciálegyenlet-rendszert kell megoldanunk, a Volterra-elvet pedig időfüggő peremfeltételek esetén problémás használni, azonban az elvben rejlő ötletet kihasználhatjuk: a reológiai problémát megpróbálhatjuk visszavezetni a rugalmasságtani probléma megoldására.

Ilyen módon jár el a [9, 18]-ban közölt módszer, amikor a rugalmasságtani megoldásban a rugalmassági állandókat nem a reológiai operátorokkal, hanem időfüggő függvényekkel helyettesítjük, erre az időfüggővé tett megoldásra hattatjuk a reológiai operátorokat, melyek időbeli, közönséges differenciálegyenleteket generálnak, és ezek megoldásával kaphatjuk a reológiai megoldást. Az ötlet ugyanis itt az, hogy a rugalmasságtani feszültségmegoldás bármilyen E^d , E^s -re kielégíti az (1) egyenletet és a feszültségperemfeltételt, így tetszőleges időfüggő $E^d(t)$, $E^s(t)$ esetén is minden időpillanatban kielégíti őket. Hasonlóan, a rugalmasságtani alakváltozás-megoldásunk bármilyen E^d , E^s is minden időpillanatban kielégíti. Ráadásul a *feszültségmegoldásba* helyettesített $E_{\sigma}^{d}(t)$, $E_{\sigma}^{s}(t)$ függvények eltérhetnek az *alakváltozási megoldásba* helyettesített $E_{\varepsilon}^{d}(t)$, $E_{\varepsilon}^{s}(t)$ függvényektől. E négy időfüggő függvényre a (8) reológiai konstitutív összefüggések adnak közönséges differenciálegyenlet-rendszert.

Ezzel a módszerrel azonban csak bizonyos speciális problémák megoldása volt lehetséges, csak a legfeljebb két független térbeli rugalmas mintázattal (ld. később) előállítható feladatokat lehetett megoldani [18]. További fontos hátrány volt, hogy az $E_{\sigma}^{s}(t)$, $E_{\sigma}^{d}(t)$, $E_{\varepsilon}^{s}(t)$, $E_{\varepsilon}^{d}(t)$ függvényekre adódó időbeli differenciálegyenlet-rendszer *nemlineáris* volt.

A későbbiekben ennek a módszernek egy általánosítását fogjuk használni, ahol nincs megszorítás a térbeli mintázatok számára, és az adódó időbeli differenciálegyenletrendszer sok esetben *lineáris*. A módszer első lépéseként levonunk egy olyan $\bar{\sigma}$ és $\bar{\varepsilon}$ mezőt – a továbbiakban: primer mezőt –, melyek eleget tesznek a

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}\cdot \overleftarrow{\nabla} = -\varrho \mathbf{g},\tag{16}$$

$$\nabla \times \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} \times \nabla = \boldsymbol{0}$$
 (17)

egyenleteknek, így azonban a peremfeltételek esetleg elhangolódhatnak. A továbbiakban használt

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\sigma} - \bar{\boldsymbol{\sigma}},$$
 (18)

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\varepsilon} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$$
 (19)

különbségmezőkre - a továbbiakban: kiegészítő mezőkre -

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overleftarrow{\nabla} = \boldsymbol{0}, \tag{20}$$

$$\vec{\nabla} \times \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \times \overleftarrow{\nabla} = \boldsymbol{0}$$
(21)

adódnak.

Mint már említettük, a következőkben olyan problémákkal foglalkozunk, melyek peremfeltételei feszültségeket írnak elő. Ha a közeg által kitöltött tartomány több peremmel is rendelkezik, akkor a feladatot felbontjuk olyan részfeladatok összegére, hogy egy részfeladatban csak egy peremfeltétel nemnulla. A továbbiakban egy ilyen részfeladatot vizsgálunk.

Dimenzionális alapon megállapítható, hogy a feszültségmegoldás a (nemnulla) feszültség-peremfeltétellel arányos, ezért az E^d , E^s rugalmasságtani együtthatóktól csak a dimenziótlan

$$\eta = \frac{E^{d}}{E^{s}} \tag{22}$$

kombinációjukon keresztül – más szóval a $\nu = \frac{1-\eta}{2+\eta}$ Poisson-tényezőtől – függhet. (Ez a tekintett konkrét példákban jól megfigyelhető lesz.) Dimenzionális okokból célszerű az alakváltozást is feszültség dimenziójúra hozni:

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\rm el}(\mathbf{r}) = E^{\rm s} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\rm el}(\mathbf{r}), \tag{23}$$

melyet a továbbiakban feszültségdimenziójú alakváltozás néven fogunk használni. Ez szintén kielégíti a kompatibilitási egyenletet:

$$\vec{\nabla} \times \hat{\boldsymbol{\zeta}} \times \overleftarrow{\nabla} = \boldsymbol{0}, \tag{24}$$

és a rugalmasságtani együtthatóktól szintén csak η -n keresztül függ.

Tételezzük fel, hogy a rugalmasságtani probléma feszültségmegoldását véges összeg alakban⁶ megadhatjuk, azaz

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{el}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{J} c_j(\eta) \mathbf{s}_j(\mathbf{r}), \qquad (25)$$

ahol J egész szám, $c_j(\eta)$ -k egymástól független együtthatófüggvények, $\mathbf{s}_j(\mathbf{r})$ -k pedig egymástól független térbeli mintázatok. Deviatorikus-gömbi felbontásban:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{el}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{J} \left[c_j(\eta) \mathbf{s}_j^{d}(\mathbf{r}) + c_j(\eta) \mathbf{s}_j^{s}(\mathbf{r}) \right].$$
(26)

A Hooke-törvény alapján

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\rm el}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{J} \left[\frac{1}{\eta} c_j(\eta) \mathbf{s}_j^{\rm d}(\mathbf{r}) + c_j(\eta) \mathbf{s}_j^{\rm s}(\mathbf{r}) \right].$$
(27)

Amennyiben az egyetlen nemnulla feszültség-peremfeltételünk egy $\lambda(t)$ időfüggő szorzóval szorzódik (pl. alagútnyitási feladatok esetén a folyamatos anyageltávolítást egy ilyen peremfeltétellel modellezhetjük), a feszültség és a feszültségdimenziójú alakváltozás rugalmasságtani megoldása ugyanezzel a szorzóval szorzódik:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{el}(\mathbf{r},t) = \lambda(t) \sum_{j=1}^{J} \left[c_j(\eta) \mathbf{s}_j^{d}(\mathbf{r}) + c_j(\eta) \mathbf{s}_j^{s}(\mathbf{r}) \right],$$
(28)

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{el}(\mathbf{r},t) = \lambda(t) \sum_{j=1}^{J} \left[\frac{1}{\eta} c_j(\eta) \mathbf{s}_j^{d}(\mathbf{r}) + c_j(\eta) \mathbf{s}_j^{s}(\mathbf{r}) \right].$$
(29)

Most térjünk át a (8) kostitúciós összefüggéssel előírt reológiai problémára. Ez a feszültségdimenziójú alakváltozással felírva a

$$\mathcal{S}^{d}\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{d}(\mathbf{r},t) = \mathcal{Z}^{d}\hat{\boldsymbol{\zeta}}^{d}(\mathbf{r},t), \qquad \qquad \mathcal{S}^{s}\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{s}(\mathbf{r},t) = \mathcal{Z}^{s}\hat{\boldsymbol{\zeta}}^{s}(\mathbf{r},t)$$
(30)

⁶ Végtelen összeg alakban biztosan létezik a megoldás, azonban ennek kezelése matematikai szempontból (konvergencia-kérdések miatt) lényegesen bonyolultabb.

kapcsolatokat jelenti, ahol [vö. (9)-(10)]

$$\mathcal{Z}^{d} = \eta + \frac{E_{1}^{d}}{E^{s}} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{E_{2}^{d}}{E^{s}} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} + \dots, \qquad \mathcal{Z}^{s} = 1 + \frac{E_{1}^{s}}{E^{s}} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{E_{2}^{s}}{E^{s}} \frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}} + \dots$$
(31)

Hogy a (20) egyenletet, a feszültség-peremfeltételt, illetve a (24) egyenletet minden pillanatban kielégítsük, ez alkalommal is rugalmasságtani megoldások egymásutániságaként keressük a reológiai megoldást, illetve ezúttal ilyenek időfüggő lineárkombinációiként. Ez alkalommal tehát rögzítünk J darab $\eta_1, \eta_2, \ldots, \eta_k, \ldots, \eta_J$ értéket, és a hozzájuk tartozó rugalmasságtani megoldások időbeli lineárkombinációt tekintjük, más kombinációkat a feszültségre, mint a feszültségdimenziójú alakváltozásra. Képletben:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{reol}}(\mathbf{r},t) = \sum_{k=1}^{J} \left\{ \lambda_k(t) \sum_{j=1}^{J} \left[c_j(\eta_k) \mathbf{s}_j^{\text{d}}(\mathbf{r}) + c_j(\eta_k) \mathbf{s}_j^{\text{s}}(\mathbf{r}) \right] \right\},\tag{32}$$

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\text{reol}}(\mathbf{r},t) = \sum_{k=1}^{J} \left\{ \kappa_k(t) \sum_{j=1}^{J} \left[\frac{1}{\eta_k} c_j(\eta_k) \mathbf{s}_j^{\text{d}}(\mathbf{r}) + c_j(\eta_k) \mathbf{s}_j^{\text{s}}(\mathbf{r}) \right] \right\}.$$
(33)

Hogy miért éppen J darab rugalmasságtani megoldásból építkezzünk, annak magyarázata az, hogy J darab független térbeli mintázatunk van, így J-nél több kombináció használatata redundáns lenne, nem képes növelni a mozgásterünket. A (20) és (24) egyenleteket tehát kielégítettük, a peremfeltétel teljesülését pedig a

$$\sum_{k=1}^{J} \lambda_k(t) = \lambda(t) \tag{34}$$

feltétel fogja biztosítani. Már csak a reológiai összefüggéseket kell érvényesíteni. A (32) és (33) egyenletekből a következő összefüggéseket kapjuk:

$$\mathcal{S}^{d}\left\{\sum_{k=1}^{J}\left[\lambda_{k}(t)\sum_{j=1}^{J}c_{j}\left(\eta_{k}\right)\mathbf{s}_{j}^{d}(\mathbf{r})\right]\right\} = \mathcal{Z}^{d}\left\{\sum_{k=1}^{J}\left[\kappa_{k}(t)\sum_{j=1}^{J}\frac{1}{\eta_{k}}c_{j}\left(\eta_{k}\right)\mathbf{s}_{j}^{d}(\mathbf{r})\right]\right\}, \quad (35)$$

$$\mathcal{S}^{\mathbf{s}}\left\{\sum_{k=1}^{J}\left[\lambda_{k}(t)\sum_{j=1}^{J}c_{j}(\eta_{k})\mathbf{s}_{j}^{\mathbf{s}}(\mathbf{r})\right]\right\} = \mathcal{Z}^{\mathbf{s}}\left\{\sum_{k=1}^{J}\left[\kappa_{k}(t)\sum_{j=1}^{J}c_{j}(\eta_{k})\mathbf{s}_{j}^{\mathbf{s}}(\mathbf{r})\right]\right\}.$$
(36)

Vegyük észre, hogy a keresett $\lambda_k(t)$, $\kappa_k(t)$ függvényekre *lineáris* differenciálegyenletrendszer adódott.

Lehetőségünk van arra is, hogy az η_k értékek konstans helyett időfüggő függvények legyenek. Ez a módszer általánosabb változatát jelenti. Mivel ilyenkor azonban nemlineáris differenciálegyenlet-rendszer adódik, jelen dolgozatban olyan példákat fogunk vizsgálni, melyek konstans η_k -kra szorítkozva is megoldhatóak.

Felvetődik a kérdés, hogy a megoldás függ-e az η_1, \ldots, η_J értékek megválasztásától. Mivel a J darab rugalmasságtani megoldással tulajdonképpen a J darab térbeli mintázat lineárkombinációinak terében adunk meg egy bázist⁷, más η_1, \ldots, η_J értékek egyszerűen egy másik bázist jelentenek, melyen a megoldás lineárkombinációs együtthatói más $\lambda_k(t)$, $\kappa_k(t)$ függvények. A megoldás maga ugyanaz.

A jelölések egyszerűsítése végett vezessük be a

$$C_{jk} = c_j(\eta_k) \tag{37}$$

konstans mátrixot, a $c_j(\eta_k)$ függvények függetlensége miatt ez – kivételes η_1, \ldots, η_J értékegyüttesektől eltekintve – nemdegenerált mátrix.

Véges összegekről lévén szó, (35) és (36) átírható a következőképpen:

$$\sum_{j=1}^{J} \left[\sum_{k=1}^{J} \mathcal{S}^{\mathsf{d}} \lambda_{k}(t) C_{jk} \mathbf{s}_{j}^{\mathsf{d}}(\mathbf{r}) \right] = \sum_{j=1}^{J} \left[\sum_{k=1}^{J} \mathcal{Z}^{\mathsf{d}} \kappa_{k}(t) \frac{1}{\eta_{k}} C_{jk} \mathbf{s}_{j}^{\mathsf{d}}(\mathbf{r}) \right],$$
(38)

$$\sum_{j=1}^{J} \left[\sum_{k=1}^{J} \mathcal{S}^{s} \lambda_{k}(t) C_{jk} \mathbf{s}_{j}^{s}(\mathbf{r}) \right] = \sum_{j=1}^{J} \left[\sum_{k=1}^{J} \mathcal{Z}^{s} \kappa_{k}(t) C_{jk} \mathbf{s}_{j}^{s}(\mathbf{r}) \right].$$
(39)

Az $s_1(\mathbf{r}), \ldots, s_J(\mathbf{r})$ térbeli mintázatok lineárisan független függvények. Ha a deviatorikus részeik is mind egymástól lineárisan függetlenek, és a gömbi részeik is egymástól lineárisan független függvények, akkor a (38)–(39) egyenletek minden egyes komponens együtthatóinak egyenlőségét követelik meg:

$$\sum_{k=1}^{J} \mathcal{S}^{\mathsf{d}} \lambda_k(t) C_{jk} = \sum_{k=1}^{J} \mathcal{Z}^{\mathsf{d}} \kappa_k(t) \frac{1}{\eta_k} C_{jk}, \qquad j = 1, \dots, J, \qquad (40)$$

$$\sum_{k=1}^{J} \mathcal{S}^{s} \lambda_{k}(t) C_{jk} = \sum_{k=1}^{J} \mathcal{Z}^{s} \kappa_{k}(t) C_{jk}, \qquad j = 1, \dots, J.$$
(41)

Ez így 2*J* darab egyenlet, és hozzávéve még (34)-et, összesen 2*J* + 1 darab egyenletünk lett a 2*J* darab $\lambda_1(t), \ldots, \lambda_J(t), \kappa_1(t), \ldots, \kappa_J(t)$ ismeretlen függvényre. Ilyenkor tehát a módszer általában nem tud megoldásra vezetni. Az általunk alább vizsgált példákban azonban mindben észrevehetjük, hogy a *J* darab $\mathbf{s}_1^{s}(\mathbf{r}), \ldots, \mathbf{s}_J^{s}(\mathbf{r})$ gömbi mintázat egyike kifejezhető a többi lineáris kombinációjaként. Ilyenkor (39) csak *J* – 1 darab független egyenletet jelent, így a módszer megoldásra vezet. Ha a kezdeti feltételek is (32)–(33) alakba írhatóak – például stacionárius előélet időfüggetlen $\lambda = 0$ -jú peremfeltétel mellett –, akkor talált megoldásunk a feladatnak a megoldása.

3. NÉHÁNY EGYSZERŰ PÉLDA A MÓDSZER ALKALMAZÁSÁRA

Ebben a fejezetben a fent ismertetett módszer alkalmazásával néhány példára származtatjuk a megoldandó közönséges differenciálegyenleteket általános reológiai operáto-

⁷ Kivételes η_1, \ldots, η_J értékegyüttesektől eltekintve

rok esetére. Az ezt követő fejezet fogja tartalmazni ezeknek a feladatoknak a megoldását konkrét anyagmodellek esetén.

3.1. FURAT HOMOGÉN, IZOTROP FESZÜLTSÉGMEZŐBEN

Első példaként egy végtelen kiterjedésű, homogén, izotrop $\bar{\sigma}$ feszültségmezőben nyitott R sugarú, kör keresztmetszetű végtelen hosszú furat körüli feszültségmezőt vizsgáljuk. A probléma peremfeltételei, átfogalmazva a kiegészítőmezőre,

$$\hat{\sigma}_{rr}(R,\varphi,z) = -\bar{\sigma}_{rr}, \qquad \lim_{r \to \infty} \hat{\sigma}(r,\varphi,z) = \mathbf{0}.$$
 (42)

A rugalmasságtani megoldás [19] alapján a

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) = \bar{\sigma}_{rr} \begin{pmatrix} -\frac{R^2}{r^2} & 0 & 0\\ 0 & \frac{R^2}{r^2} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(43)

feszültségtenzor, melynek gömbi része zérus, azaz $\hat{\sigma} = \hat{\sigma}^{d}$. A (25) szerinti jelöléssel a megoldás most

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) = c(\eta)\mathbf{s}(\mathbf{r}),\tag{44}$$

ahol $c(\eta) = 1$ és $\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r})$, a feszültségdimenziójú alakváltozásra pedig

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{E^{d}} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{d}(\mathbf{r}) = \frac{1}{E^{d}} \mathbf{s}^{d}(\mathbf{r}) = \hat{\boldsymbol{\zeta}}^{d}(\mathbf{r})$$
(45)

adódik.

.

A fúrást úgy modellezzük, hogy a hengerpalást mentén előírt peremfeltételt egy időfüggő szorzó révén egy $[t_1, t_2]$ intervallumon fokozatosan kapcsoljuk be, azaz a $t < t_1$ időszakban a primer feszültségmező uralkodik, majd a $[t_1, t_2]$ intervallumon a furatnyitást a

$$\hat{\sigma}_{rr}(t, R, \varphi, z) = \lambda(t) \left(-\bar{\sigma}_{rr}\right) \tag{46}$$

időfüggő peremfeltétellel modellezzük. $\lambda(t)$ -ről elég annyit megkötnünk, hogy

$$\lambda(t) = \begin{cases} 0, & \text{ha } t \leq t_1, \\ 1, & \text{ha } t \geq t_2, \\ \text{közben sima.} \end{cases}$$
(47)

Az ehhez tartozó - továbbra is rugalmas - megoldás:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\rm el}(t,\mathbf{r}) = \lambda(t) \cdot \mathbf{s}^{\rm d}(\mathbf{r}), \tag{48}$$

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\rm el}(t, \mathbf{r}) = \frac{\lambda(t)}{\eta} \cdot \mathbf{s}^{\rm d}(\mathbf{r}).$$
(49)

A reológiai megoldást az időfüggő együtthatók módszerével keressük, a

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{reol}}(t, \mathbf{r}) = \lambda(t) \cdot \mathbf{s}^{\text{d}}(\mathbf{r}), \tag{50}$$

$$\hat{\boldsymbol{c}}_{\text{reol}}(t, \mathbf{r}) = \frac{\kappa(t)}{\epsilon} \mathbf{s}^{\text{d}}(\mathbf{r}) \tag{51}$$

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\text{reol}}(t, \mathbf{r}) = \frac{\kappa(t)}{\eta} \cdot \mathbf{s}^{d}(\mathbf{r})$$
(51)

alakban. A reológiai egyenletek közül a (41) gömbi egyenlet triviálisan teljesül, míg a (40) deviatorikus feltétel:

$$\mathcal{S}^{\mathsf{d}}\lambda(t) = \mathcal{Z}^{\mathsf{d}}\frac{\kappa(t)}{\eta}.$$
(52)

A kezdeti feltételek olyanok, hogy a kiegészítő feszültség- és feszültségdimenziójú alakváltozási mezők a furat létesítése előtt zérusok.

Örömmel állapíthatjuk meg, hogy ugyanarra a megoldásra jutottunk, mint az ugyanezt a problémát más eszközökkel tárgyaló Béda–Fülöp-féle számítás [19, 20].

3.2. FURAT HOMOGÉN, ANIZOTROP FESZÜLTSÉGMEZŐBEN

A homogén, izotrop feszültségmezőben történő furatnyitás egyik általánosítása, amikor a feszültségmező továbbra is homogén, de nem izotrop, hanem általános orientációjú. A feladat rugalmasságtani megoldását a [21] cikkben közlik, ezt rögtön az általunk keresett formában adjuk meg:

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) &= c_1(\eta)\mathbf{s}_1(\mathbf{r}) + c_2(\eta)\mathbf{s}_2(\mathbf{r}) = \\ &= \begin{pmatrix} -\left(\frac{R}{r}\right)^2 \bar{\sigma}_+ - \left[4\left(\frac{R}{r}\right)^2 - 3\left(\frac{R}{r}\right)^4\right] \bar{\sigma}_-(\varphi) & \left[2\left(\frac{R}{r}\right)^2 - 3\left(\frac{R}{r}\right)^4\right] \bar{\sigma}_{r\varphi}(\varphi) & -\left(\frac{R}{r}\right)^2 \bar{\sigma}_{rz}(\varphi) \\ & \left[2\left(\frac{R}{r}\right)^2 - 3\left(\frac{R}{r}\right)^4\right] \bar{\sigma}_{r\varphi}(\varphi) & \left(\frac{R}{r}\right)^2 \bar{\sigma}_+ - 3\left(\frac{R}{r}\right)^4 \bar{\sigma}_-(\varphi) & \left(\frac{R}{r}\right)^2 \bar{\sigma}_{\varphi z}(\varphi) \\ & -\left(\frac{R}{r}\right)^2 \bar{\sigma}_{rz}(\varphi) & \left(\frac{R}{r}\right)^2 \bar{\sigma}_{\varphi z}(\varphi) & 0 \end{pmatrix} + \end{aligned}$$

$$+\frac{1-\eta}{2+\eta} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -4\left(\frac{R}{r}\right)^2 \bar{\sigma}_{-}(\varphi) \end{pmatrix},$$
(53)

ahol $c_1(\eta) = 1$, valamint a $\bar{\sigma}$ primer mezőre vonatkozó segédjelölések a következők:

$$\bar{\sigma}_{+} = \frac{1}{2} \left(\bar{\sigma}_{xx} + \bar{\sigma}_{yy} \right),$$

$$\bar{\sigma}_{-}(\varphi) = \frac{1}{2} \left(\bar{\sigma}_{xx} - \bar{\sigma}_{yy} \right) \cos\left(2\varphi\right) + \bar{\sigma}_{xy} \sin\left(2\varphi\right),$$

$$\bar{\sigma}_{r\varphi}(\varphi) = -\frac{1}{2} \left(\bar{\sigma}_{xx} - \bar{\sigma}_{yy} \right) \sin\left(2\varphi\right) + \bar{\sigma}_{xy} \cos\left(2\varphi\right),$$

$$\bar{\sigma}_{rz}(\varphi) = \bar{\sigma}_{xz} \cos\varphi + \bar{\sigma}_{yz} \sin\varphi,$$

$$\bar{\sigma}_{\varphi z}(\varphi) = -\bar{\sigma}_{xz} \sin\varphi + \bar{\sigma}_{yz} \cos\varphi.$$
(54)

Mivel két független helymintázatunk van, így két-két ismeretlen $\kappa_k(t)$, $\lambda_k(t)$ függvényt keresünk, a (37)-ben bevezetett C_{jk} mátrix pedig a

$$C_{jk} = \begin{pmatrix} 1 & 1\\ \frac{1-\eta_1}{2+\eta_1} & \frac{1-\eta_2}{2+\eta_2} \end{pmatrix}$$
(55)

alakot ölti. Így a reológiai megoldást (32)-(33) alapján a

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{reol}}(t,\mathbf{r}) = \lambda_1(t)C_{11}s_1^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_1(t)C_{21}s_2^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_2(t)C_{12}s_1^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_2(t)C_{22}s_2^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_1(t)C_{11}s_1^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_1(t)C_{21}s_2^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_2(t)C_{12}s_1^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_2(t)C_{22}s_2^{s}(\mathbf{r})$$
(56)

$$\hat{\boldsymbol{\zeta}}_{\text{reol}}(t,\mathbf{r}) = \kappa_1(t) \frac{C_{11}}{\eta_1} s_1^{\text{d}}(\mathbf{r}) + \kappa_1(t) \frac{C_{21}}{\eta_1} s_2^{\text{d}}(\mathbf{r}) + \kappa_2(t) \frac{C_{12}}{\eta_2} s_1^{\text{d}}(\mathbf{r}) + \kappa_2(t) \frac{C_{22}}{\eta_2} s_2^{\text{d}}(\mathbf{r}) + \kappa_1(t) C_{11} s_1^{\text{s}}(\mathbf{r}) + \kappa_1(t) C_{21} s_2^{\text{s}}(\mathbf{r}) + \kappa_2(t) C_{12} s_1^{\text{s}}(\mathbf{r}) + \kappa_2(t) C_{22} s_2^{\text{s}}(\mathbf{r})$$
(57)

alakban keressük. Észrevehető, hogy $\mathbf{s}_1^s = \mathbf{s}_2^s$, ezt felhasználva, valamint hattatva (56) és (57) egyenletekre a reológiai operátorokat a

$$\mathcal{S}^{d} [\lambda_{1}(t)C_{11} + \lambda_{2}(t)C_{12}] = \mathcal{Z}^{d} \left[\kappa_{1}(t)\frac{C_{11}}{\eta_{1}} + \kappa_{2}(t)\frac{C_{12}}{\eta_{2}}\right],$$

$$\mathcal{S}^{d} [\lambda_{1}(t)C_{21} + \lambda_{2}(t)C_{22}] = \mathcal{Z}^{d} \left[\kappa_{1}(t)\frac{C_{21}}{\eta_{1}} + \kappa_{2}(t)\frac{C_{22}}{\eta_{2}}\right],$$
 (58)

$$\mathcal{S}^{s}\left\{\lambda_{1}(t)\left[C_{11}+C_{21}\right]+\lambda_{2}(t)\left[C_{12}+C_{22}\right]\right\}=\mathcal{Z}^{s}\left\{\kappa_{1}(t)\left[C_{11}+C_{21}\right]+\kappa_{2}(t)\left[C_{12}+C_{22}\right]\right\}$$

egyenletek generálódnak. Négy ismeretlenünkre e három egyenlet mellett a peremfeltétel ad negyedik egyenletet:

$$\lambda(t) = \lambda_1(t) + \lambda_2(t). \tag{59}$$

Kezdeti feltételeink olyanok, hogy a furat nyitása előtt a kiegészítőmezők stacionáriusan zérusok.

3.3. GÖMB ALAKÚ ÜREG HOMOGÉN, IZOTROP FESZÜLTSÉGMEZŐBEN

Egy végtelen, homogén, izotrop feszültségmezőben található gömbszerű üregre vonatkozó peremfeltételek, ezúttal is a kiegészítőmezőre átfogalmazva:

$$\hat{\sigma}_{rr}(R,\vartheta,\varphi) = -\bar{\sigma}_{rr}, \qquad \lim_{r \to \infty} \hat{\sigma}(r,\vartheta,\varphi) = \mathbf{0}.$$
 (60)

A probléma rugalmasságtani megoldására

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) = \bar{\sigma}_{rr} \frac{R^3}{r^3} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$
(61)

adódik [18]. Hasonlóan a homogén, izotrop feszültségmezőben nyitott furat esetéhez, a gömbi rész most is nulla, tehát $\hat{\sigma}^{d} = \hat{\sigma}$. Az η és **r** változók ezúttal is a

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) = c(\eta)\mathbf{s}(\mathbf{r}) \tag{62}$$

módon szeparálódnak, ahol $c(\eta) = 1$ és $\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r})$. Láthatjuk, hogy innen ugyanazokat az egyenleteket kapjuk, mint a homogén, izotrop feszültségmezőben történő furatnyitás esetén (ld. 3.1. szakasz), így végeredményben a

$$\mathcal{S}^{\mathsf{d}}\lambda(t) = \mathcal{Z}^{\mathsf{d}}\frac{\kappa(t)}{\eta}.$$
(63)

egyenletet kapjuk.

3.4. FURAT ÖNSÚLYÁVAL TERHELT KÖZEGBEN

Utolsó, és egyben legbonyolultabb problémaként egy saját súlyával terhelt, furattal gyengített félvégtelen tartomány reológiai folyamatát vizsgáljuk, így modellezhetők például a föld alatt nyitott alagutak körüli folyamatok is. A probléma rugalmas megoldásával a [22, 23, 24] munkák foglalkoznak. A primer – üregnyitás előtti – feszültségmező az $\{O, x, y, z\}$ koordinátarendszerben a

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \gamma(y-d) \begin{pmatrix} k & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & k \end{pmatrix},$$
(64)

formában adható meg, ahol $\gamma = \varrho g$, d az üreg középpontjának a földfelszíntől vett mélysége (ld. 2. ábra), a k paramétert oldalnyomási tényezőnek nevezzük.



2. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben nyitott furat sematikus ábrája.

A problémát három különböző oldalnyomási tényező értékre adják meg:

- Amennyiben a kezdeti állapotban hidrosztatikus nyomásmegoszlást feltételezünk, akkor k = 1.
- Amennyiben feltételezhető, hogy a közeg tágulása oldalirányban gátolt, akkor az $\bar{\varepsilon}_{xx}$ és $\bar{\varepsilon}_{zz}$ alakváltozási komponensek zérusok, így az oldalnyomási tényezőre a $k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta}$ adódik.
- Amennyiben feltételezhető, hogy a közeg oldalirányban szabadon tágulhat, akkor a $\bar{\sigma}_{xx}$ és $\bar{\sigma}_{zz}$ feszültségek zérusok, azaz k = 0.

Henger-koordinátarendszerre áttérve (64) a

$$\bar{\sigma}_{rr} = \frac{\gamma r}{4} \left[(3+k)\sin\varphi + (k-1)\sin3\varphi \right] - \frac{\gamma d}{2} \left[(1+k) - (1-k)\cos2\varphi \right],$$

$$\bar{\sigma}_{\varphi\varphi} = \frac{\gamma r}{4} \left[(1+3k)\sin\varphi - (k-1)\sin3\varphi \right] - \frac{\gamma d}{2} \left[(1+k) + (1-k)\cos2\varphi \right],$$

$$\bar{\sigma}_{r\varphi} = \frac{\gamma r}{4} (1-k)\left(\cos\varphi - \cos3\varphi\right) - \frac{\gamma d}{2} (1-k)\sin2\varphi,$$

$$\bar{\sigma}_{zz} = \gamma r k \sin\varphi - \gamma dk,$$

$$\bar{\sigma}_{rz} = \bar{\sigma}_{\varphi z} = 0$$
(65)

feszültségkomponenseket jelenti.

Az üregnyitás utáni állapot peremfeltételei az üreg kontúrjára és a sík felszínre – vízszintes peremre – a normálirányú feszültség nulla volta. A probléma megoldása félvégtelen térben vizsgált, Mindlin a megoldást végtelen sor alakjában, a hengerhez és a sík felszínhez egyaránt illeszkedő bipoláris koordinátarendszerben adta meg [22]. Amennyiben a furat R sugarának és középpontjának a sík felszíntől vett d távolságának arányára a $\frac{d}{R} > 1.5$ feltétel igaz (nagymélységű közelítés), akkor a végtelen sorból elég a vezető rendű tagokat venni, melyek henger-koordinátarendszerbe transzformálva [23, 24] a

$$\sigma_{rr} = \frac{\gamma R}{4} \left\{ \left[(3+k) \frac{r}{R} - \frac{4+5\eta}{1+2\eta} \frac{R}{r} + \left(\frac{1-\eta}{1+2\eta} - k \right) \frac{R^3}{r^3} \right] \sin \varphi + \left[(k-1) \frac{r}{R} + 5\left(1-k\right) \frac{R^3}{r^3} + 4\left(k-1\right) \frac{R^5}{r^5} \right] \sin 3\varphi \right\} - \frac{\gamma d}{2} \left[(1+k) \left(1 - \frac{R^2}{r^2} \right) + (1-k) \left(-1 + 4\frac{R^2}{r^2} - 3\frac{R^4}{r^4} \right) \cos 2\varphi \right], \quad (66)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \frac{\gamma R}{4} \left\{ \left[(1-3k) \frac{r}{R} + \frac{3\eta}{1+2\eta} \frac{R}{r} + \left(k - \frac{\eta}{1+2\eta}\right) \frac{R^3}{r^3} \right] \sin\varphi + \left[(1-k) \frac{r}{R} + (k-1) \frac{R^3}{r^3} + 4(1-k) \frac{R^5}{r^5} \right] \sin 3\varphi \right\} - \frac{\gamma d}{2} \left[(1+k) \left(1 + \frac{R^2}{r^2}\right) + (1-k) \left(1 + 3\frac{R^4}{r^4}\right) \cos 2\varphi \right],$$
(67)

$$\sigma_{r\varphi} = \frac{\gamma R}{4} \left\{ \left[(1-k)\frac{r}{R} - \frac{3\eta}{1+2\eta}\frac{R}{r} + \left(k - \frac{\eta}{1+2\eta}\right)\frac{R^3}{r^3} \right] \cos\varphi + \left[(k-1)\frac{r}{R} + 3(k-1)\frac{R^3}{r^3} + 4(1-k)\frac{R^5}{r^5} \right] \cos 3\varphi \right\} - \frac{\gamma d}{2} (1-k) \left(1 + 2\frac{R^2}{r^2} - 3\frac{R^4}{r^4} \right) \sin 2\varphi,$$
(68)

$$\sigma_{zz} = \frac{\gamma R}{4} \left[\left(4k \frac{r}{R} - 2\frac{1-\eta}{1+2\eta} \frac{R}{r} \right) \sin \varphi + 4 \frac{1-\eta}{2+\eta} (1-k) \frac{R^3}{r^3} \sin 3\varphi \right] - \frac{\gamma d}{2} \left(2k + 4\frac{1-\eta}{2+\eta} \frac{R^2}{r^2} \cos 2\varphi \right),$$
(69)

$$\sigma_{rz} = \sigma_{\varphi z} = 0 \tag{70}$$

feszültségkomponenseket jelentik. A kiegészítőmező (mely síkalakváltozási állapotú):

$$\hat{\sigma}_{rr} = \frac{\gamma R}{4} \left\{ \left[-\frac{4+5\eta}{1+2\eta} \frac{R}{r} + \left(\frac{1-\eta}{1+2\eta} - k \right) \frac{R^3}{r^3} \right] \sin \varphi + \left[5\left(1-k\right) \frac{R^3}{r^3} + 4\left(k-1\right) \frac{R^5}{r^5} \right] \sin 3\varphi \right\} - \frac{\gamma d}{2} \left[-\left(1+k\right) \frac{R^2}{r^2} + \left(1-k\right) \left(4\frac{R^2}{r^2} - 3\frac{R^4}{r^4} \right) \cos 2\varphi \right],$$
(71)

$$\hat{\sigma}_{\varphi\varphi} = \frac{\gamma R}{4} \left\{ \left[\frac{3\eta}{1+2\eta} \frac{R}{r} + \left(k - \frac{\eta}{1+2\eta} \right) \frac{R^3}{r^3} \right] \sin \varphi + \left[(k-1) \frac{R^3}{r^3} + 4 \left(1 - k \right) \frac{R^5}{r^5} \right] \sin 3\varphi \right\} - \frac{\gamma d}{2} \left[(1+k) \frac{R^2}{r^2} + 3 \left(1 - k \right) \frac{R^4}{r^4} \cos 2\varphi \right],$$
(72)

$$\hat{\sigma}_{r\varphi} = \frac{\gamma R}{4} \left\{ \left[-\frac{3\eta}{1+2\eta} \frac{R}{r} + \left(k - \frac{\eta}{1+2\eta}\right) \frac{R^3}{r^3} \right] \cos \varphi + \left[3\left(k-1\right) \frac{R^3}{r^3} + 4\left(1-k\right) \frac{R^5}{r^5} \right] \cos 3\varphi \right\} - \frac{\gamma d}{2} \left(1-k\right) \left(2\frac{R^2}{r^2} - 3\frac{R^4}{r^4} \right) \sin 2\varphi,$$
(73)

$$\hat{\sigma}_{zz} = \frac{1-\eta}{1+2\eta} \cdot \left\{ \frac{\gamma R}{4} \left[-2\frac{2+\eta}{1+2\eta} \frac{R}{r} \sin \varphi + 4(1-k) \frac{R^3}{r^3} \sin 3\varphi \right] - 2\gamma d(1-k) \frac{R^2}{r^2} \cos 2\varphi \right\},$$
(74)

$$\hat{\sigma}_{rz} = \hat{\sigma}_{\varphi z} = 0. \tag{75}$$

A következőkben a három különböző k oldalnyomási paraméter érték mellett vizsgáljuk a reológiai folyamatot.

Ebben az esetben a kiegészítő feszültségmező

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) = c_{1}(\eta)\mathbf{s}_{1}(\mathbf{r}) + c_{2}(\eta)\mathbf{s}_{2}(\mathbf{r}) = \\
= \begin{pmatrix} -\frac{\gamma R}{4} \left(3\frac{R}{r} + \frac{R^{3}}{r^{3}}\right)\sin\varphi + \gamma d\frac{R^{2}}{r^{2}} & \frac{\gamma R}{4} \left(-\frac{R}{r} + \frac{R^{3}}{r^{3}}\right)\cos\varphi & 0 \\
\frac{\gamma R}{4} \left(-\frac{R}{r} + \frac{R^{3}}{r^{3}}\right)\cos\varphi & \frac{\gamma R}{4} \left(\frac{R}{r} + \frac{R^{3}}{r^{3}}\right)\sin\varphi - \gamma d\frac{R^{2}}{r^{2}} & 0 \\
0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \\
+ \frac{1 - \eta}{1 + 2\eta} \begin{pmatrix} \frac{\gamma R}{4} \left(-\frac{R}{r} + \frac{R^{3}}{r^{3}}\right)\sin\varphi & \frac{\gamma R}{4} \left(\frac{R}{r} - \frac{R^{3}}{r^{3}}\right)\cos\varphi & 0 \\
\frac{\gamma R}{4} \left(\frac{R}{r} + \frac{R^{3}}{r^{3}}\right)\cos\varphi & -\frac{\gamma R}{4} \left(\frac{R}{r} + \frac{R^{3}}{r^{3}}\right)\sin\varphi & 0 \\
0 & 0 & -\frac{\gamma R}{2}\frac{R}{r}\sin\varphi \end{pmatrix},$$
(76)

itt szintén $c_1(\eta) = 1$. A reológiai megoldást ismét a (32)–(33) szerinti

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{reol}}(t,\mathbf{r}) = \lambda_{1}(t)C_{11}\mathbf{s}_{1}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{1}(t)C_{21}\mathbf{s}_{2}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{12}\mathbf{s}_{1}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{22}\mathbf{s}_{2}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{1}(t)C_{11}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{1}(t)C_{21}\mathbf{s}_{2}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{12}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{22}\mathbf{s}_{2}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{22}\mathbf{s}_{2$$

alakban keressük. Észrevéve, hogy $2s_1^s = s_2^s$, ezúttal is eggyel kevesebb gömbi reológiai egyenletünk lesz, mint deviatorikus:

$$\mathcal{S}^{d} \Big[\lambda_{1}(t)C_{11} + \lambda_{2}(t)C_{12} \Big] = \mathcal{Z}^{d} \left[\kappa_{1}(t)\frac{C_{11}}{\eta_{1}} + \kappa_{2}(t)\frac{C_{12}}{\eta_{2}} \right],$$

$$\mathcal{S}^{d} \Big[\lambda_{1}(t)C_{21} + \lambda_{2}(t)C_{22} \Big] = \mathcal{Z}^{d} \left[\kappa_{1}(t)\frac{C_{21}}{\eta_{1}} + \kappa_{2}(t)\frac{C_{22}}{\eta_{2}} \right], \quad (79)$$

$$\mathcal{S}^{s} \Big\{ \lambda_{1}(t)[C_{11} + 2C_{21}] + \lambda_{2}(t)[C_{12} + 2C_{22}] \Big\} = \mathcal{Z}^{s} \Big\{ \kappa_{1}(t)[C_{11} + 2C_{21}] + \kappa_{2}(t)[C_{12} + 2C_{22}] \Big\}; \quad (80)$$

a peremfeltétel alapján pedig

$$\lambda(t) = \lambda_1(t) + \lambda_2(t). \tag{81}$$

3.4.2. Gátolt oldalirányú tágulás (
$$k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta}$$
)

A kiegészítő feszültségmező ezúttal

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) = c_1(\eta)\mathbf{s}_1(\mathbf{r}) + c_2(\eta)\mathbf{s}_2(\mathbf{r}) + c_3(\eta)\mathbf{s}_3(\mathbf{r})$$
(82)

alakú, ahol

$$c_1(\eta) = \frac{1-\eta}{1+2\eta}, \qquad c_2(\eta) = \frac{2+\eta}{1+2\eta}, \qquad c_3(\eta) = \frac{3(1-\eta)\eta}{(2+\eta)(1+2\eta)},$$
 (83)

valamint

$$s_{1,rr}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma R}{2} \left[\frac{R}{r} \sin \varphi - \left(5\frac{R^3}{r^3} - 4\frac{R^5}{r^5} \right) \sin 3\varphi \right] + \gamma d \left(4\frac{R^2}{r^2} - 3\frac{R^4}{r^4} \right) \cos 2\varphi,$$

$$s_{1,\varphi\varphi}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma R}{2} \left[-\frac{R}{r} \sin \varphi + \left(\frac{R^3}{r^3} - 4\frac{R^5}{r^5} \right) \sin 3\varphi \right] + 3\gamma d\frac{R^4}{r^4} \cos 2\varphi,$$

$$s_{1,r\varphi}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma R}{2} \left[\frac{R}{r} \cos \varphi + \left(3\frac{R^3}{r^3} - 4\frac{R^5}{r^5} \right) \cos 3\varphi \right] + \gamma d \left(2\frac{R^2}{r^2} - 3\frac{R^4}{r^4} \right) \sin 2\varphi,$$

$$s_{1,rz}(\mathbf{r}) = -\frac{\gamma R}{2} \cdot \frac{R}{r} \sin \varphi, \qquad s_{1,rz}(\mathbf{r}) = s_{1,\varphi z}(\mathbf{r}) = 0,$$

$$s_{2,rr}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma R}{4} \left[-3\frac{R}{r} \sin \varphi + \left(5\frac{R^3}{r^3} - 4\frac{R^5}{r^5} \right) \sin 3\varphi \right] - \frac{\gamma d}{2} \left[\left(4\frac{R^2}{r^2} - 3\frac{R^4}{r^4} \right) \cos 2\varphi - \frac{R^2}{r^2} \right],$$

$$s_{2,\varphi\varphi}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma R}{4} \left[\frac{R}{r} \sin \varphi - \left(\frac{R^3}{r^3} - 4\frac{R^5}{r^5} \right) \sin 3\varphi \right] - \frac{\gamma d}{2} \left(3\frac{R^4}{r^4} \cos 2\varphi + \frac{R^2}{r^2} \right),$$

$$s_{2,r\varphi}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma R}{4} \left[\frac{R}{r} \sin \varphi - \left(\frac{R^3}{r^3} - 4\frac{R^5}{r^5} \right) \cos 3\varphi \right] - \frac{\gamma d}{2} \left(3\frac{R^4}{r^4} \cos 2\varphi + \frac{R^2}{r^2} \right),$$

$$s_{2,r\varphi}(\mathbf{r}) = \frac{\gamma R}{4} \left[-\frac{R}{r} \cos \varphi - \left(3\frac{R^3}{r^3} + 4\frac{R^5}{r^5} \right) \cos 3\varphi \right] - \frac{\gamma d}{2} \left(2\frac{R^2}{r^2} - 3\frac{R^4}{r^4} \right) \sin 2\varphi,$$

$$s_{2,rz}(\mathbf{r}) = s_{2,rz}(\mathbf{r}) = s_{2,\varphi z}(\mathbf{r}) = 0,$$

$$s_{3}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{R\frac{R^3}{r^3}} \sin 3\varphi - 2\gamma d\frac{R^2}{r^2} \cos 2\varphi \end{pmatrix},$$
(84)

melyekből megállapítható, hogy $\mathbf{s}_2^s = \mathbf{s}_1^s + 3\mathbf{s}_3^s$, így ismét eggyel kevesebb gömbi reológiai egyenletünk lesz, mint deviatorikus. A reológiai megoldást a

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{reol}}(t,\mathbf{r}) &= \lambda_{1}(t)C_{11}\mathbf{s}_{1}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{1}(t)C_{21}\mathbf{s}_{2}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{1}(t)C_{31}\mathbf{s}_{3}^{d}(\mathbf{r}) + \\ &+ \lambda_{2}(t)C_{12}\mathbf{s}_{1}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{22}\mathbf{s}_{2}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{32}\mathbf{s}_{3}^{d}(\mathbf{r}) + \\ &+ \lambda_{3}(t)C_{13}\mathbf{s}_{1}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{3}(t)C_{23}\mathbf{s}_{2}^{d}(\mathbf{r}) + \lambda_{3}(t)C_{33}\mathbf{s}_{3}^{d}(\mathbf{r}) + \\ &+ \lambda_{1}(t)C_{11}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{1}(t)C_{21}\mathbf{s}_{2}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{1}(t)C_{31}\mathbf{s}_{3}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \lambda_{2}(t)C_{12}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{22}\mathbf{s}_{2}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{2}(t)C_{32}\mathbf{s}_{3}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \lambda_{3}(t)C_{13}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{3}(t)C_{23}\mathbf{s}_{2}^{s}(\mathbf{r}) + \lambda_{3}(t)C_{33}\mathbf{s}_{3}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \lambda_{3}(t)C_{13}\mathbf{s}_{1}^{d}(\mathbf{r}) + \kappa_{1}(t)\frac{C_{21}}{\eta_{1}}\mathbf{s}_{2}^{d}(\mathbf{r}) + \kappa_{1}(t)\frac{C_{31}}{\eta_{1}}\mathbf{s}_{3}^{d}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{2}(t)\frac{C_{12}}{\eta_{2}}\mathbf{s}_{1}^{d}(\mathbf{r}) + \kappa_{2}(t)\frac{C_{22}}{\eta_{2}}\mathbf{s}_{2}^{d}(\mathbf{r}) + \kappa_{2}(t)\frac{C_{32}}{\eta_{2}}\mathbf{s}_{3}^{d}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{3}(t)\frac{C_{13}}{\eta_{3}}\mathbf{s}_{1}^{d}(\mathbf{r}) + \kappa_{3}(t)\frac{C_{23}}{\eta_{3}}\mathbf{s}_{2}^{d}(\mathbf{r}) + \kappa_{3}(t)\frac{C_{33}}{\eta_{3}}\mathbf{s}_{3}^{d}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{1}(t)C_{11}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \kappa_{1}(t)C_{21}\mathbf{s}_{2}^{s}(\mathbf{r}) + \kappa_{1}(t)C_{31}\mathbf{s}_{3}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{3}(t)C_{13}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \kappa_{3}(t)C_{23}\mathbf{s}_{2}^{s}(\mathbf{r}) + \kappa_{3}(t)C_{32}\mathbf{s}_{3}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{3}(t)C_{13}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \kappa_{3}(t)C_{23}\mathbf{s}_{2}^{s}(\mathbf{r}) + \kappa_{3}(t)C_{33}\mathbf{s}_{3}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{3}(t)C_{33}\mathbf{s}_{3}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{3}(t)C_{33}\mathbf{s}_{1}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{3}(t)C_{33}\mathbf{s}_{3}^{s}(\mathbf{r}) + \\ &+ \kappa_{$$

alakban keressük, ezekre a

$$\mathcal{S}^{\mathsf{d}}\Big[\lambda_1(t)C_{11} + \lambda_2(t)C_{12} + \lambda_3(t)C_{13}\Big] = \mathcal{Z}^{\mathsf{d}}\left[\kappa_1(t)\frac{C_{11}}{\eta_1} + \kappa_2(t)\frac{C_{12}}{\eta_2} + \kappa_3(t)\frac{C_{13}}{\eta_3}\right], \quad (87)$$

$$\mathcal{S}^{d} \Big[\lambda_1(t) C_{21} + \lambda_2(t) C_{22} + \lambda_3(t) C_{23} \Big] = \mathcal{Z}^{d} \left[\kappa_1(t) \frac{C_{21}}{\eta_1} + \kappa_2(t) \frac{C_{22}}{\eta_2} + \kappa_3(t) \frac{C_{23}}{\eta_3} \right], \quad (88)$$

$$\mathcal{S}^{d} \Big[\lambda_1(t) C_{31} + \lambda_2(t) C_{32} + \lambda_3(t) C_{33} \Big] = \mathcal{Z}^{d} \left[\kappa_1(t) \frac{C_{31}}{\eta_1} + \kappa_2(t) \frac{C_{32}}{\eta_2} + \kappa_3(t) \frac{C_{33}}{\eta_3} \right], \quad (89)$$

$$S^{s} \Big\{ \lambda_{1}(t) \left[C_{11} + C_{21} \right] + \lambda_{2}(t) \left[C_{12} + C_{22} \right] + \lambda_{3}(t) \left[C_{13} + C_{23} \right] \Big\} = \\ = \mathcal{Z}^{s} \Big\{ \kappa_{1}(t) \left[C_{11} + C_{21} \right] + \kappa_{2}(t) \left[C_{12} + C_{22} \right] + \kappa_{3}(t) \left[C_{13} + C_{23} \right] \Big\},$$
(90)

$$S^{s} \Big\{ \lambda_{1}(t) \left[3C_{21} + C_{31} \right] + \lambda_{2}(t) \left[3C_{22} + C_{32} \right] + \lambda_{3}(t) \left[3C_{23} + C_{33} \right] \Big\} = Z^{s} \Big\{ \kappa_{1}(t) \left[3C_{21} + C_{31} \right] + \kappa_{2}(t) \left[3C_{22} + C_{32} \right] + \kappa_{3}(t) \left[3C_{23} + C_{33} \right] \Big\}$$
(91)

egyenletek adódnak, a peremfeltételből pedig:

$$\lambda(t) = \lambda_1(t) + \lambda_2(t) + \lambda_3(t).$$
(92)

3.4.3. Szabad oldalirányú tágulás (k = 0)

Ebben az esetben ismét 3 független helymintázatunk van:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}) = c_1(\eta)\mathbf{s}_1(\mathbf{r}) + c_2(\eta)\mathbf{s}_2(\mathbf{r}) + c_3(\eta)\mathbf{s}_3(\mathbf{r}), \tag{93}$$

ahol

$$c_1(\eta) = 1,$$
 $c_2(\eta) = \frac{1-\eta}{2+\eta},$ $c_3(\eta) = \frac{1-\eta}{1+2\eta},$ (94)

valamint

A C_{jk} mátrix:

$$C_{jk} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1\\ \frac{1-\eta_1}{2+\eta_1} & \frac{1-\eta_2}{2+\eta_2} & \frac{1-\eta_3}{2+\eta_3}\\ \frac{1-\eta_1}{1+2\eta_1} & \frac{1-\eta_2}{1+2\eta_2} & \frac{1-\eta_3}{1+2\eta_3} \end{pmatrix}.$$
(96)

Észrevéve, hogy $\mathbf{s}_3^s = 2(\mathbf{s}_1^s - \mathbf{s}_2^s)$, ez alkalommal is eggyel kevesebb a gömbi reológiai egyenletek száma, mint a deviatorikusoké:

$$\mathcal{S}^{d} \Big[\lambda_{1}(t)C_{11} + \lambda_{2}(t)C_{12} + \lambda_{3}(t)C_{13} \Big] = \mathcal{Z}^{d} \Big[\kappa_{1}(t)\frac{C_{11}}{\eta_{1}} + \kappa_{2}(t)\frac{C_{12}}{\eta_{2}} + \kappa_{3}(t)\frac{C_{13}}{\eta_{3}} \Big],$$

$$\mathcal{S}^{d} \Big[\lambda_{1}(t)C_{21} + \lambda_{2}(t)C_{22} + \lambda_{3}(t)C_{23} \Big] = \mathcal{Z}^{d} \Big[\kappa_{1}(t)\frac{C_{21}}{\eta_{1}} + \kappa_{2}(t)\frac{C_{22}}{\eta_{2}} + \kappa_{3}(t)\frac{C_{23}}{\eta_{3}} \Big], \quad (97)$$

$$\mathcal{S}^{d} \Big[\lambda_{1}(t)C_{31} + \lambda_{2}(t)C_{32} + \lambda_{3}(t)C_{33} \Big] = \mathcal{Z}^{d} \Big[\kappa_{1}(t)\frac{C_{31}}{\eta_{1}} + \kappa_{2}(t)\frac{C_{32}}{\eta_{2}} + \kappa_{3}(t)\frac{C_{33}}{\eta_{3}} \Big],$$

$$\mathcal{S}^{s} \Big\{ \lambda_{1}(t) [C_{11} + 2C_{31}] + \lambda_{2}(t) [C_{12} + 2C_{32}] + \lambda_{3}(t) [C_{13} + 2C_{33}] \Big\} = \mathcal{Z}^{s} \Big\{ \kappa_{1}(t) [C_{11} + 2C_{31}] + \kappa_{2}(t) [C_{12} + 2C_{32}] + \kappa_{3}(t) [C_{13} + 2C_{33}] \Big\}, \quad (98)$$

$$\mathcal{S}^{s} \{ \lambda_{1}(t) [C_{21} - 2C_{31}] + \lambda_{2}(t) [C_{22} - 2C_{32}] + \lambda_{3}(t) [C_{23} - 2C_{33}] \} = \mathcal{Z}^{s} \Big\{ \kappa_{1}(t) [C_{21} - 2C_{31}] + \kappa_{2}(t) [C_{22} - 2C_{32}] + \kappa_{3}(t) [C_{23} - 2C_{33}] \Big\}.$$

A peremfeltételből pedig:

$$\lambda(t) = \lambda_1(t) + \lambda_2(t) + \lambda_3(t).$$
(99)

4. AZ ISMERTETETT FELADATOK MEGOLDÁSA KONKRÉT ANYAGMODELLEKKEL

Amint az előző fejezet elején említettük, most konkrét anyagmodellek esetén adjuk meg az előbb ismertetett feladatok megoldását. A peremfeltételt skálázó függvényt [vö. (47)] a következőnek választjuk:

$$\lambda(t) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad t \le t_1, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \sin\left(\pi \frac{t - \frac{t_1 + t_2}{2}}{t_2 - t_1}\right) \right], & \text{ha} \quad t_1 \le t \le t_2, \\ 1, & \text{ha} \quad t_2 \le t. \end{cases}$$
(100)

A tapasztalat szerint reológiai anyagi viselkedés általában a deviatorikus részben látható, így a most bemutatásra kerülő példáinkban a gömbi rész anyagi viselkedésére mindig Hooke-féle rugalmasságmodellt feltételezünk, míg a deviatorikus részben Kelvin-, illetve Kluitenberg–Verhás-modellt használunk.

Minden tekintett példánál három esetet vizsgálunk:

- a reológiai időskáláknál sokkal lassabb felfutású $\lambda(t)$ esetét,
- amikor a $t_2 t_1$ bekapcsolási időskála összemérhető a reológiai időskálákkal,
- amikor a $\lambda(t)$ bekapcsolás sokkal gyorsabb, mint a reológiai időskálák léptéke.

A most következő ábrák mindegyikén a feszültséghez tartozó, ill. a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó deviatorikus mintázatok időfejlődését rendre a

$$\varphi_j^{\text{dev}}(t) = \sum_{k=1}^J \lambda_k(t) C_{jk}, \qquad \psi_j^{\text{dev}}(t) = \sum_{k=1}^J \kappa_k(t) \frac{1}{\eta_k} C_{jk}, \qquad j = 1, \dots, J,$$
(101)

a gömbi mintázatok időfejlődését pedig az analóg módon definiált $\varphi_j^{\text{sph}}(t)$, $\psi_j^{\text{sph}}(t)$ függvényekkel mutatjuk be, melyekre az alábbi színskálák érvényesek (ahol kevesebb függvényre van szükségünk, ott értelemszerűen a többit elhagyjuk):

 $\varphi_1^{\text{dev}}(t)$	 $\psi_1^{\text{dev}}(t)$
 ${\varphi_2}^{\sf dev}({\mathfrak t})$	 $\psi_2^{\text{dev}}(t)$
 ${arphi_3}^{ ext{dev}}(ext{t})$	 $\psi_3^{dev}(t)$
 ${arphi_1}^{ m sph}({ m t})$	 $\psi_1^{sph}(t)$
 $\varphi_2^{sph}(t)$	 $\psi_2^{sph}(t)$

3. ÁBRA. Bal oldalon: a feszültség mintázatait skálázó időfüggvények színkódjai. Jobb oldalon: a feszültségdimenziójú alakváltozás mintázatait skálázó színkódjai.

A fekete vonalak a deviatorikus mintázatokat jelölik, míg a szürkék a gömbieket; a folytonos vonaltól az egyre ritkábbig haladva növekednek a mintázatok indexei.

A bal oldali ábrák a feszültségmintázatok időbeli alakulását ábrázolják, a jobb oldaliak pedig a feszültségdimenziójú alakváltozás mintázataiét; fentről lefelé haladva sorra a lassú, közepes és gyors peremfeltétel-változás esete következik.

4.1. Kelvin-Hooke-modell

Először tekintsük a legegyszerűbb reológiai anyagmodellt, a deviatorikusan Kelvin-, térfogatilag Hooke-modell esetét:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{d}} = \eta \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{d}} + \frac{E_{1}^{\mathrm{d}}}{E^{\mathrm{s}}} \dot{\boldsymbol{\zeta}}^{\mathrm{d}}, \tag{102}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{s}}.\tag{103}$$

A feladatban jelenlevő reológiai időskála $\frac{E_1^d/E^s}{\eta}$. Ezt használva időegységként, a peremfeltétel bekapcsolását a lassú esetben $t_2 - t_1 = 5$ -nek, a közepes esetben $t_2 - t_1 = 1$ -nek, a gyors esetben $t_2 - t_1 = 0,1$ -nek választjuk.

A legegyszerűbb feladatok a homogén, izotrop feszültségmezőben nyitott furat, illetve gömb alakú üreg esete, ezen két feladat ugyanarra az egyetlen deviatorikus egyenletre vezetett [(52) ill. (63)], melynek megoldását a 4. és 5. ábrák szemléltetik. A feladat geometriai egyszerűsége miatt itt nem láthatunk különösebben említésre méltó jelenséget, azonban megjegyzendő, hogy az egyetlen feszültséghez tartozó időfüggvény itt megegyezik a peremfeltételt skálázó függvénnyel, így könnyen megállapíthatjuk, hogy a furatnyitási folyamat befejezése után is deformálódik a közeg.

A homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat esetén már két független deviatorikus és egyetlen gömbi mintázat időbeli alakulását követjük nyomon, melyek együtthatófüggvényeit a 6. és 7. ábrákon láthatjuk. Ennél az elrendezésnél már érdekességeket figyelhetünk meg: láthatjuk, hogy amíg a peremfeltétel-változás tart, erős, nem várt tranziensek jelentkeznek a megoldásokban, továbbá a megoldásfüggvények egy része a peremfeltételek stacionáriussá válása után is időfüggően viselkedik, lassabban tart a stacionárius limeszhez. Összehasonlítva megállapítható, hogy ezek a megoldásfüggvények megegyeznek a korábbi, más úton számoló, nemlineáris differenciálegyenlet-rendszert megoldó [9, 18] számításokban kapottakkal.

Következzenek az önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás esetei. A 8. és 9. ábrák a hidrosztatikus kezdeti feszültségi állapot (k = 1) esetén mutatják a két deviatorikus és egy gömbi mintázathoz tartozó együtthatófüggvényeket, így ebben a példában szintén 3-3 ábrázolandó függvényünk van. Mint az előző példában, itt is megfigyelhető, hogy az egyik mintázat a stacionárius végállapothoz képest ellenkező előjellel indul. A reológia tehát itt sem csupán csillapítást és késleltetést okoz, hanem jóval kevésbé szemléletes, bonyolultabb viselkedést is.

A gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ esetében már 3 független deviatorikus és 2 független gömbi mintázatunk van, ezt az 5–5 függvényt szemléltetik a 10. és 11. ábrák. Ezen együtthatófüggvények közül már kettő is ellentétes előjellel indul.

Tekintsük végül a szabad oldalirányú tágulás (k = 0) esetét. Az előző esethez hasonlóan itt is 5–5 függvény ábrázolandó, melyeket a 12. és 13. ábrákon láthatunk. Az időbeli lefutás itt még bonyolultabb, az 5 függvényből 3 indul ellentétes előjellel.

Feltehető a kérdés, hogy mit is jelenthet az, ha egy mintázathoz tartozó időfüggvény ellentétes előjellel indul; erre a kérdésre az elmozdulásmezők elemzésekor adunk választ.

4.2. Kluitenberg–Verhás–Hooke-modell

A folytatásban a deviatorikus szektorban a dolgozat elején ismertetett Kluitenberg– Verhás-anyagmodellt alkalmazzuk. Az egyszerűség kedvéért a feszültség időderiváltját nulla együtthatóval tekintjük – ilyenkor a tehetetlenségi index szükségszerűen pozitív, reológiai oszcilláció fog fellépni csillapítás kíséretében -:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{d}} = \eta \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{d}} + \frac{E_{1}^{\mathrm{d}}}{E^{\mathrm{s}}} \dot{\boldsymbol{\zeta}}^{\mathrm{d}} + \frac{E_{2}^{\mathrm{d}}}{E^{\mathrm{s}}} \ddot{\boldsymbol{\zeta}}^{\mathrm{d}}, \qquad (104)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{s}}.\tag{105}$$

Továbbra is a $\frac{E_1^d/E^s}{\eta}$ reológiai időskálát használjuk időegységként.

Az oszcilláció mértékét az $\frac{E_2^d}{E^s}$ együttható értéke szabja meg, két esetet fogunk vizsgálni, amikor $\frac{E_2^d/E^s}{\eta} = 0,1$, illetve amikor $\frac{E_2^d/E^s}{\eta} = 1$ (erősen illetve gyengén csillapított oszcilláció).

Tekintsük a homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat problémáját. Gyenge oszcilláció esetén a 14. és 15., míg erős oszcilláció esetén a 16. és 17. ábrák mutatják az együtthatófüggvények időbeli alakulását. Az előbbi esetben a gyors peremfeltételváltozás az előzőekben látottaknál intenzívebb tranzienseket okoz, míg az utóbbinál várakozásainknak megfelelően, a megoldások erős oszcillációt mutatnak.

Az önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás esetén vizsgáljuk meg a gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ esetét. Erős csillapítás esetén a 18. és 19., gyenge csillapítás esetén pedig a 20. és 21. ábrákon láthatjuk az együtthatófüggvények időfejlődését. Előbbi esetben gyenge oszcilláció teszi itt is nemtriviálisabbá a gyors nyitás kezdeti tranziensét, míg az utóbbi esetben az erős oszcilláció mindegyik térbeli mintázaton megfigyelhető.

Mivel ilyen, pozitív tehetetlenségi indexű anyagok jelenleg nem ismertek, így az ezekhez tartozó elmozdulásmezőket nem közöljük.

4.3. Elmozdulásmezők

Az elmozdulásmezőket a (4) Cesàro-formula segítségével állíthatjuk elő. Ebbe helyettesítsük $\varepsilon = \frac{1}{E^s} \hat{\zeta}$ -t (23) alapján, majd (33)-t. Mivel a feszültségdimenziójú alakváltozást reológiai esetben véges sor alakban kerestük, melyben ráadásul a tér- és időfüggéseket szeparáltuk, így az időfüggő részeket kiemelhetjük az integrál elé, így a

$$\mathbf{u}^{\text{Cauchy}}(t,\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{0}(t) + \Omega_{\mathbf{0}}(t)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{0}) + \\ + \frac{1}{E^{s}} \sum_{j=1}^{J} \psi_{j}^{d}(t) \int_{\mathbf{r}_{0}}^{\mathbf{r}} \left\{ \mathbf{s}_{j}^{d}(\tilde{\mathbf{r}}) + 2 \left[\mathbf{s}_{j}^{d}(\tilde{\mathbf{r}}) \otimes \tilde{\nabla} \right]^{\mathbf{A}_{1,3}}(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}) \right\} d\tilde{\mathbf{r}} + \\ + \frac{1}{E^{s}} \sum_{j=1}^{J} \psi_{j}^{s}(t) \int_{\mathbf{r}_{0}}^{\mathbf{r}} \left\{ \mathbf{s}_{j}^{s}(\tilde{\mathbf{r}}) + 2 \left[\mathbf{s}_{j}^{s}(\tilde{\mathbf{r}}) \otimes \tilde{\nabla} \right]^{\mathbf{A}_{1,3}}(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}) \right\} d\tilde{\mathbf{r}}$$
(106)

alakra jutunk. Ne felejtsük, hogy így még csak egy Cauchy-potenciált kaptunk, a merevtest-szerű haladásokat és forgásokat még rögzítenünk kell.

A homogén, izotrop és anizotrop feszültségmezőben történő furatnyitás esetén ezeket egzaktul tudjuk rögzíteni, a végtelen távoli limeszben leolvasható merevtest-szerű mozgás levonásával.

Az önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás esetén ezen határozatlanságok rögzítése bonyolultabb feladat. A reológiai megoldás előállításához használt rugalmas megoldás ugyanis egy végtelen sornak az első tagja, így a reológiai megoldásunk is csak egy közelítés, mely a furat környezetében érvényes. Ezen megoldásokból előállított Cauchypotenciálok a végtelenben divergálnak, így a végtelenben vett rögzítést nem használhatjuk. Ehelyett a deformálódott felszínen időpillanatról-időpillanatra megkeressük azt a pontot, ahol az elmozdulás-szintvonal érintője vízszintes, és az itteni függőleges irányú elmozdulást vonjuk le az elmozdulásmezőből, ezzel rögzítve a merevtest-szerű elmozdulást.

Az önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás esetén a következő dimenziótlan numerikus értékeket használtuk:

$$R = 1,$$
 $d = 2,$ $\gamma = 0.04,$ $E^{\rm s} = 1.$ (107)

A homogén, izotrop feszültségmezőben történő furatnyitás esetén a σ_{rr} feszültségkomponenst az előző adatokból a $\sigma_{rr} = -\gamma d$ összefüggéssel vettük fel. A homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat esetén az önsúlyával terhelt feszültségmezőhöz hasonlóan a $\bar{\sigma}_{yy} = -\gamma d$ -nek választottuk, a $\bar{\sigma}_{xx}$ feszültségkomponenst pedig ebből a k oldalnyomási tényező segítségével a már ismertetett módon számoltuk, konkrétan a gátolt oldalirányú táguláshoz tartozó $k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta}$ értékkel vettük figyelembe, valamint a $\bar{\sigma}_{xy}$ -t $-\frac{\gamma d}{5}$ -nek választottuk, az összes többi feszültségkomponenst nullának vettük, hiszen a furat tengelyére merőlegesen vizsgáljuk a problémát.

A 22.–36. ábrákon az elmozdulásmezők időbeli alakulása látható a lassú, a közepes és a gyors peremfeltétel-változások hatására. A világosabb árnyalattól a sötétebb felé telik az idő, az egyes állapotokat a 0; 0,5; 1; 2; 4 és 8 dimenziótlan időpontokban ábrázoltuk. **Figyelem:** az elmozdulás-ábrák mesterségesen felnagyítottak (melyet a fenti dimenziótlan mennyiségek valószerűtlen értékekre állításával értünk el), mert elsődleges célunk itt a *tendenciák* szemléltetése! Valós helyzetekhez az azokhoz tartozó dimenziótlan mennyiségek alkalmazása esetén nyerhetünk számszerű jóslatokat.

Általánosságban megállapíthatjuk, hogy a lassú peremfeltétel-változás hatására a folyamat kezdetekor gyengén változik a furat alakja, ellenben gyors peremfeltétel-változáskor a folyamat kezdetén a furat gyorsan deformálódik, és várakozásainknak meg-felelően a rugalmas végállapot a peremfeltétel-változástól független.

A homogén, izotrop feszültségmezőben nyitott furat elmozdulásmezői láthatók a 22.– 24. ábrákon. Ezeken a képeken sok érdekesség nem látható, idővel egyenletesen összezsugorodik a furatunk, ezzel egyidőben a felszín a furat középpontja irányába mozdul el.

A 25.–27. ábrák a homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat elmozdulásmezőit szemléltetik. Ugyan ez a modell a közeg önsúlya általi terhelést nem veszi figyelembe, ellenben a a keresztmetszet elfordulását számíthatjuk ezzel a közelítéssel. További érdekes megfigyeléseket tehetünk: észrevehetjük, hogy kezdetben az elfordult ellipszis főtengelyének irányában a geometria megnyúlik, később pedig zsugorodik. Összevetve ezeket a 7. ábrával, láthatjuk, hogy a folyamat kezdetekor az egyik együtthatófüggvény ellentétesen indul, tehát eszerint ehhez a függvényhez tartozó mintázat kezdetben tágul, majd csak később zsugorodik.

Az önsúlyával terhelt közegben nyitott furat elmozdulásmezőit láthatjuk a 28.–36. ábrákon. Ez a modell közelíti legjobban az alagutak körül lejátszódó folyamatokat. Mindegyik képen jól látszódik, hogy a furat középpontja a felszín felé mozdul el. A hidrosztatikus kezdeti feszültségi állapot (28.–30. ábrák) esetén számolt elmozdulásmezők sok újat nem mutatnak ezen túl, a furat körülbelül izotrópan deformálódik, a felszín süllyedése eszerint a modell szerint elhanyagolható. Gátolt (31.–33. ábrák) és szabad (34.–36. ábrák) oldalirányú tágulás esetén már a felszín süllyedése, valamint a talpduzzadás jelensége is megfigyelhető a képeken.


4. ÁBRA. Homogén, izotrop feszültségmezőben nyitott furat, illetve gömb alakú üreg – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvény időfejlődése.



5. ÁBRA. Homogén, izotrop feszültségmezőben nyitott furat, illetve gömb alakú üreg – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvény időfejlődése.



6. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvények időfejlődése.



7. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvények időfejlődése.



8. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, hidrosztatikus kezdeti feszültségi állapot (k = 1) – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvények időfejlődése.



9. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, hidrosztatikus kezdeti feszültségi állapot (k = 1) – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvények időfejlődése.



10. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvények időfejlődése.



11. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvények időfejlődése.



12. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, szabad oldalirányú tágulás (k = 0) – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvények időfejlődése.



13. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, szabad oldalirányú tágulás (k = 0) – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvények időfejlődése.



14. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvények időfejlődése gyenge oszcilláció esetén.



15. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvények időfejlődése gyenge oszcilláció esetén.



16. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvények időfejlődése erős oszcilláció esetén.



17. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvények időfejlődése erős oszcilláció esetén.



18. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvények időfejlődése gyenge oszcilláció esetén.



19. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvények időfejlődése gyenge oszcilláció esetén.



20. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – a feszültséghez tartozó együtthatófüggvények időfejlődése erős osz-cilláció esetén.



21. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – a feszültségdimenziójú alakváltozáshoz tartozó együtthatófüggvények időfejlődése erős oszcilláció esetén.



22. ÁBRA. Homogén, izotrop feszültségmezőben nyitott furat – az elmozdulásmező időbeli változása lassú peremfeltétel-változások mellett.



23. ÁBRA. Homogén, izotrop feszültségmezőben nyitott furat – az elmozdulásmező időbeli változása közepes sebességű peremfeltételváltozások mellett.

55



24. ÁBRA. Homogén, izotrop feszültségmezőben nyitott furat – az elmozdulásmező időbeli változása gyors peremfeltétel-változások mellett.



25. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – az elmozdulásmező időbeli változása lassú peremfeltétel-változások mellett.



26. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – az elmozdulásmező időbeli változása közepes sebességű peremfeltételváltozások mellett.



27. ÁBRA. Homogén, anizotrop feszültségmezőben nyitott furat – az elmozdulásmező időbeli változása gyors peremfeltétel-változások mellett.



28. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, hidrosztatikus kezdeti feszültségi állapot (k = 1) – az elmozdulásmező időbeli változása lassú peremfeltétel-változások mellett.



29. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, hidrosztatikus kezdeti feszültségi állapot (k = 1) – az elmozdulásmező időbeli változása közepes sebességű peremfeltétel-változások mellett.



30. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, hidrosztatikus kezdeti feszültségi állapot (k = 1) – az elmozdulásmező időbeli változása gyors peremfeltétel-változások mellett.



31. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – az elmozdulásmező időbeli változása lassú peremfeltétel-változások mellett.



32. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – az elmozdulásmező időbeli változása közepes sebességű peremfeltétel-változások mellett.



33. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, gátolt oldalirányú tágulás $(k = \frac{\nu}{1-\nu} = \frac{1-\eta}{1+2\eta})$ – az elmozdulásmező időbeli változása gyors peremfeltétel-változások mellett.



34. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, szabad oldalirányú tágulás (k = 0) – az elmozdulásmező időbeli változása lassú peremfeltétel-változások mellett.



35. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, szabad oldalirányú tágulás (k = 0) – az elmozdulásmező időbeli változása közepes sebességű peremfeltétel-változások mellett.



36. ÁBRA. Önsúlyával terhelt közegben történő furatnyitás, szabad oldalirányú tágulás (k = 0) – az elmozdulásmező időbeli változása gyors peremfeltétel-változások mellett.

5. TOVÁBBI LEHETŐSÉGEK

Az itt bemutatott munka a jövőben több irányban is folytatható. Elsősorban tanulságos volna összevetni az itt kapott eredményeket a vizsgált feladatok numerikus (elsősorban végeselemes) megoldásaival.

Egy következő megvizsgálandó kérdés azzal kapcsolatos, hogy az itt tárgyalt feladatok mindegyikében a folyamat síkalakváltozási volt. Ilyenkor az alakváltozási tenzor

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0\\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(108)

alakú, és rugalmas esetben a feszültségi tenzor

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \nu \left(\sigma_{11} + \sigma_{22}\right) \end{pmatrix}$$
(109)

alakú. Ennek volt köszönhető, hogy mindegyik tárgyalt példában a független térbeli mintázatok gömbi részei között egy feltétel adódott, ezáltal csökkentve a független reológiai egyenletek számát, így végeredményben lineáris differenciálegyenlet-rendszert kellett csak megoldanunk. Hasznos lenne megvizsgálni, hogy milyen más tulajdonságok vezethetnek ugyanígy a gömbi mintázatok számának csökkenésére.

Amikor nincs összefüggés a gömbi mintázatok között, eggyel több ismeretlen függvényt kell feltételeznünk, amikor is a módszer 19. oldalon ismertetett általánosabb alakjával érhetünk csak célt. Ilyenkor a megoldandó differenciálegyenlet-rendszer nemlineárisnak ígérkezik. A korábbi vizsgálatainkban [9, 18] tekintett ilyen példákban azonban mindegyikben sikerült – alkalmas változótranszformációkkal – lineáris differenciálegyenletrendszert elérni. Fontos lenne tudni, hogy ilyen transzformáció milyen széles körben lehetséges.

Egy további, természetes módon adódó továbblépési irány az olyan feladatok kezelése, melyek végtelen sok független térbeli mintázatot tartalmaznak. A végtelen sok tag kezelése egzakt, véges összeggel közelítése pedig közelítő módszert adhat, mely bonyolult elrendezések reológiai folyamatainak újfajta numerikus kiszámítását tenné lehetővé.

KÖSZÖNETMONDÁS

A kutatást az NKFIH K116375 pályázata támogatta.

IRODALOM

- [1] Basnet, C. B. Shrestha, P. K. Panthi, K. K.: Analysis of squeezing phenomenon in the headrace tunnel of Chameliya Project, Nepal, *Hydro Nepal Journal of Water Energy and Environment*, 2013.
- [2] Mathieu, E.: At the mercy of the mountain, *Tunnels & Tunneling International*, 2015.
- [3] Kovács, L. et al.: A Geotechnikai Értelmező Jelentés (GÉJ) felülvizsgálata és kiterjesztése, Kézirat, *Kőmérő Kft., RHK Kft. Irattára*, Pécs–Paks, RHK-K-032/12, 2012.
- [4] Fekete, Zs. Lógó, B. Vásárhelyi, B.: A parajdi sókőzet mechanikai tulajdonságainak elemzése, In: Török, Á. – Görög, P. – Vásárhelyi, B. (szerk.): Mérnökgeológia-Kőzetmechanika 2016, konferenciakötet, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika 2016 konferencia, 2016.05.18, Budapest, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 20, Hantken Kiadó, Budapest, 2016; 211-224.
- [5] Barnafoldi, G.G. Bulik, T. Cieslar, M. David, E. Dobroka, M. Fenyvesi, E. Gondek-Rosinska, D. – Graczer, Z. – Hamar, G. – Huba, G. – Kis, A. – Kovacs, R. – Lemperger, I. – Levai, P. – Molnar, J. – Nagy, D. – Novak, A. – Olah, L. – Pazmandi, P. – Piri, D. – Somlai, L. – Starecki, T. – Suchenek, M. – Suranyi, G. – Szalai, S. – Varga, D. – Vasuth, M. – Van, P. – Vasarhelyi, B. – Wesztergom, V. – Weber, Z.: First report of long term measurements of the MGGL laboratory in the Matra mountain range, *Classical and Quantum Gravity* 34 (2017) Paper 114001.
- [6] Lin, W. Kuwahara, Y. Satoh, T. Shigematsu, N. Kitagawa, Y. Kiguchi, T. Koizumi, N.: A case study of 3D stress orientation determination in Shikoki Island and Kii Peninsula, Japan, In Ivan Vrkljan (editor): Rock Engineering in Difficult Ground Conditions (Soft Rock and Karst), Proceedings of Eurock'09 Cavtat, Croatia, October 28-29, 2009, *Balkema*, 2010; 277–282.
- [7] Matsuki, K. Takeuchi, K.: Three-dimensional in situ stress determination by anelastic strain recovery of a rock core, *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr.* **30** (1993) 1019– 1022.
- [8] Matsuki, K.: Anelastic strain recovery compliance of rocks and its application to in situ stress measurement, *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 45 (2008) 952–965.
- [9] Fülöp, T. Szücs, M.: Szilárdtest-reológiai időfüggés meghatározása a Volterra-elv által inspirálva, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 19, Egyesület a Tudomány és Technológia Egységéért, Budapest, 2015.
- [10] Szücs, M.: Szilárd közegek nemegyensúlyi termodinamikája reológiai megoldások műszaki problémákban, a BME 2016. november 17.-ei Tudományos Diákköri Konferenciájára készült, Fülöp Tamás által témavezetett dolgozat.
- [11] Béda, Gy. Kozák, I. Verhás, J.: Kontinuummechanika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1986.
- [12] Fülöp, T.: Rugalmasságtani és reológiai lineáris feladatok, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 9, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 2009.

- [13] Asszonyi, Cs. Fülöp, T. Ván, P.: Distinguished rheological models for solids in the framework of a thermodynamical internal variable theory, *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 27 (2015) 971–986.
- [14] Asszonyi, Cs. Csatár, A. Fülöp, T.: Elastic, thermal expansion, plastic and rheological processes – theory and experiment, *Periodica Polytechnica Civil Engineering* 60 (2016) 591– 601.
- [15] Asszonyi, Cs.: A Poynting–Thomson-féle ún. standard modell, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 6, Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2006, 89–118.
- [16] Gromov, V. G.: On the mathematical content of Volterra's principle in the boundary value problem of viscoelasticity, *Prikladnaja Matyematyika i Mekhanyika* **35** (1971) 869–878.
- [17] Rabotnov, Ju. N.: Elements of hereditary solid mechanics, Mir Publishers, Moscow, 1980.
- [18] Szücs, M.: Szilárd közegek reológiája termodinamikai háttér és megoldások, szakdolgozat, BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, Budapest, 2015.
- [19] Fülöp, T. Béda, Gy.: Hengerszimmetrikus alagút körüli reológiai időfüggés, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 9, Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2009, p. 99–114.
- [20] Fülöp, T. Béda, Gy.: Rheological dynamics of tunnels an analytical investigation, in: I. Vrkljan (ed.), Rock Engineering in Difficult Ground Conditions – Soft Rocks and Karst, Proceedings of the Regional Sympsium of the International Society for Rock Mechanics (ISRM), 29–31 October 2009, Cavtat near Dubrovnik, Croatia, *Taylor & Francis Group*, London, 2010, p. 441–447.
- [21] Asszonyi, Cs. Szarka, Z. Béda, Gy.: Körszelvényű földalatti folyosók körül kialakuló mechanikai mezők, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 9, Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2009, p. 115–171
- [22] Mindlin, R. D.: Stress distribution around a tunnel, *Proceedings of the American Society of Civil Engineering*, New York, 1939, p. 619–642.
- [23] Papkovich, P. R.: Elasticity theory, Oborongiz, Moscow-Leningrad, 1939.
- [24] Savin, G. N.: Stress distribution around holes, National Aeronautics and Space Administration, Washington, D. C, 1970.
ANYAGI SOKASÁGOK ÉS ANYAGFÜGGVÉNYEK

Ván Péter^{1,2,3} – Écsi László⁴ ¹MTA Wigner FK RMI, Elméleti Fizikai Osztály, Budapest ²BME GPK Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, Budapest ³Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, Budapest ⁴Pozsonyi Szlovák Műszaki Egyetem, Gépészmérnöki Kar, Bratislava

Az anyagi objektivitás egyik megjelenési módja, hogy az anyagi sokaságon értelmezett mennyiségeket tekintjük kiindulópontnak az anyagtörvények megfogalmazásához. Ebben az írásban az alapvető kinematikai mennyiségekkel, a mérlegekkel és a termodinamikai leírás alapjaival foglalkozunk.

1. BEVEZETÉS

A termikus hatásoknak kitett rugalmas kontinuumok véges deformációs kinematikai leírásai a deformációt rugalmas, képlékeny és termikus részekre bontják. A felbontás a teljes deformációmező ezeknek az összetevőknek multiplikatív felbontásával származtatható a legtöbb elmélet szerint [1]. Ez a leírás több szempontból is problémákat vet fel. Egyrészt az anyagi objektivitásnak a Noll-féle szokásos érvényesítésén túlmutató, azt megjavító és általánosító elmélete alapján a deformációsebességek additívan komponálódnak [2, 3, 4, 5]. Ugyanezt támasztja alá az elmozdulásmezőt alapvetőnek feltételező kinematikai kép, és a nagy deformációk numerikus problémái [6, 7]. Dinamikai oldalról pedig egyáltalán nem világos, hogy a három deformáció időben milyen sorrendben lépne fel, illetve a kapott numerikus eredmények sorrendfüggők. Harmadrészt pedig a termodinamikai leírásban alapvető munka és teljesítmény tagok objektivitására vonatkozóan szintén kell előírásokat tennünk. Egyik kézenfekvő megoldás, hogy a deformáció, mint tenzormező adott objektív formájához a megfelelő feszültségmező objektív formáját kell rendelni, a Galilei-relativitás figyelembe vételével [8, 9].

Ebben az írásban megvizsgáljuk, hogy az anyagi sokaságok mennyiben segítenek a fenti kérdések tisztázásában, röviden ismertetjük a kinematikai leírást és tárgyaljuk a deformáció-feszültség kompatibilitásának kérdését is.

2. MIÉRT VAN SZÜKSÉG ANYAGI SOKASÁGOKRA?

A tömegmérleg szokásos, lokális és differenciális formája a következő:

$$\partial_t \rho + \partial_i (\rho v^i) = 0. \tag{1}$$

Itt ρ a tömegsűrűség, v^i pedig a kontinuum sebességmezőjét jelöli. Ebben az egyenletben a legfontosabb információ az, hogy az anyagot a kontinuum tömegmezőjéhez rögzítve értelmezzük, hiszen nincs a tömegáramsűrűségnek konduktív része. Ha a kontinuum nyugalomban van, akkor $v^i = 0$, tehát a sűrűség nem változik. A másik fontos háttérinformáció, hogy van egy külső, inerciális vonatkoztatási rendszer – a laboratóriumi – a kontinuum sebességmezője pedig a labor és a kontinuum relatív sebessége. Mező alatt ebben a vonatkoztatási rendszerben értett (t, x^i) időtől és tértől függő fizikai mennyiségeket értünk. ∂_i a térbeli gradiens, megegyező felső-alsó indexek pedig összegzést is jelentenek, az Einstein konvenció szerint, tehát például $\partial_i v^i$ a sebességmező divergenciája.

Az lendület(impulzus)mérleg szokásos, lokális és differenciális formája a következő:

$$\partial_t(\rho v^i) - \partial_j(\sigma^{ij} - \rho v^i v^j) = f^i.$$
⁽²⁾

Itt f^i a külső erőmező és σ^{ij} a feszültségmező. Azt érdemes megfigyelnünk, hogy a lendületsűrűség nulla, ha az anyag nyugalomban van a laboratóriumban, azaz $v^i = 0$. Ez a tulajdonság triviálisnak tűnik, ha a pontmechanika a kiindulópontunk, azonban a vonatkoztatási rendszertől való függés lebontásával megállapítható, hogy ez az előírás nem más, mint egy termodinamikai állapotegyenlet [10, 8]. Egy másik nem nyilvánvaló tulajdonsága a lendületmérlegnek, hogy az impulzussűrűség egyenlő a tömegáramsűrűséggel. Ennek a tulajdonságnak a pontos feltételei jelenleg is vitatottak [11, 12, 13, 14, 15, 10, 16]. A fő feltétel mindenképpen a lokális tömegközéppont (booster) megmaradása [10, 17].

A kinetikus energia mérlege a lendületmérlegnek a sebességgel való skaláris szorzatával számolható ki:

$$\partial_t \left(\rho \frac{v^2}{2} \right) - \partial_j \left(v_i \sigma^{ij} - \rho \frac{v^2}{2} v^j \right) = -\sigma^{ij} \partial_i v_j + v_i f^i.$$
(3)

A teljes energia megmarad, és a teljes és kinetikus energia különbsége a belső energia: $\rho_e = \rho_{tot} - \rho \frac{v^2}{2}$. A belső energia mérlege tehát:

$$\partial_t \rho_e + \partial_i (q^i + \rho_e v^i) = \sigma^{ij} \partial_i v_j - v_i f^i.$$
(4)

Itt a belső energia áramsűrűsége a q^i hőáramsűrűség a teljes energiasűrűség és a nyomásból származó rész különbsége: $q^i = j_{te}^i + \sigma^{ij} \partial_i v_j$. Az egykomponensű kontinuumok alapegyenletrendszerének általános tulajdonsága, hogy a konvektív áramsűrűségek kiküszöbölhetőek, ha áttérünk a mérlegek anyaghoz rögzített szubsztanciális formájára fajlagos mennyiségeket és szubsztanciális deriváltakat használva. Ez a reprezentáció feltételezi és felhasználja a tömegmérleg sajátos, (1), formáját, ezáltal a sebességmező tömeghez kötését is. A fajlagos mennyiségek különösen a folyadékmechanikában használatosak, a rugalmasságtanban és a kontinuummechanikában inkább a sűrűségekre alapozott tárgyalás szokásos.

Egy második, sokkal fontosabb megjegyzés, hogy a teljes és belső energiák nem függetlenek: a fenti megfontolások miatt azt várjuk, hogy egyik a másiknak Galileitranszformáltja a közeghez rögzített és a laboratóriumi rendszerek között. Az objektív, vonatkoztatási rendszertől független tartalma az energiamérlegnek is jól érthető általánosabb elméleti keretek között [8].

A vizsgálataink utolsó fontos megszorítása az, hogy az impulzusmomentum megmarad. Ezért a feszültség szimmetrikus [18, 17]. Ezért a belső energia mérlegének jobboldali első tagja speciális, mert a sebességgradiens szimmetrikus része ad hozzá járulékot.

A továbbiakban felhasználjuk az alábbi jól ismert kinematikai összefüggést és egyúttal bevezetjük a deformáció ϵ^{ij} tenzormezőjét is, amelynek szubsztanciális időderiváltja a sebességgradiens szimmetrikus része:

$$\dot{\epsilon}^{ij} = \partial_t \epsilon^{ij} + v^k \partial_k \epsilon^{ij} = \frac{1}{2} (\partial^i v^j + \partial^j v^i) = \partial^{(j} v^{i)}.$$
(5)

Ennek az összefüggésnek a következő fejezetben meg fogjuk adni egy sokkal részletesebb magyarázatát. A deformáció termodinamikai állapothatározó és a zárójelben levő indexek az adott másodrendű tenzor szimmetrikus részét jelölik.

Az entrópiamérleget az alábbi formában adjuk meg:

$$\partial_t \rho_s + \partial_i (J^i + \rho_s v^i) = \Sigma \ge 0.$$
(6)

Itt ρ_s az entrópiasűrűség, J^i az entrópiafluxus, azaz az entrópia áramsűrűségének konduktív része. Az entrópiasűrűséget a termosztatikából adottnak tekintjük, azaz térbelileg homogén testekre vonatkozó mérésekből meghatározható. A továbbiakban feltételezzük, hogy a ρ sűrűségnek, a ρ_e belső energiának, és a ϵ^{ij} deformációnak, egy α skaláris belső változónak és a belső változó $\partial_i \alpha$ gradiensének a függvénye, azaz $\rho_s(\rho_e, \epsilon^{ij}, \rho, \alpha, \partial_i \alpha)$. Az entrópiasűrűség parciális deriváltjait az alábbi Gibbs-relációval értelmezzük :

$$d\rho_e = T d\rho_s + \frac{\tilde{\sigma}_{ij}}{\rho} d(\rho \epsilon^{ij}) + \mu d\rho - \frac{A}{\rho} d(\rho \alpha) - \frac{A_d^i}{\rho} d(\rho \partial_i \alpha).$$
(7)

A továbbiakban a megfelelő extenzivitási feltétel is fontos szerepet fog játszani:

$$\rho_e = T\rho_s + \tilde{\sigma}_{ij}\epsilon^{ij} + \mu\rho - A\alpha - A^i_d\partial_i\alpha.$$
(8)

Itt T a hőmérséklet, $\tilde{\sigma}_{ij}$ a termosztatikai feszültség, A-val jelöltük a belső változóhoz, illetve A_d^i -val a belső változó gradienséhez tartozó termodinamikai affinitást [19]. Figyeljük meg, hogy az entrópia nem függ a lendületsűrűségtől, sem a sebességmezőtől.

A második főtétel egyenlőtlensége, azaz az entrópiaprodukció nemnegativitása a vonatkozó evolúciós, dinamikai egyenleteknek és a kinematikai kényszereknek a figyelembe vételével értendő. Esetünkben ezek az előbbiekben megadott (1) tömegmérleg és (4) belsőenergia-mérleg, az (5) kinematikai feltétel és a belső változó alábbi általános formájú fejlődési egyenlete

$$\partial_t \alpha = f. \tag{9}$$

A továbbiakban meghatározzuk az entrópiafluxust, és a fenti kényszerek bizonyos – konstitutív – részeit maguknak kényszereknek és a második főtételnek megfelelően. Szigorú matematikai tárgyalás esetén a vonatkozó függvényeket előre meg kell adnunk, a változóikat, azaz a *konstitutív állapotteret* le kell rögzítenünk. Ugyancsak megadandó lenne a vonatkozó parciális differenciálegyenletek megoldhatóságának szükséges feltételét jelentő *alapállapottér* megadása. Esetünkben az ezt kifeszítő alapváltozók a tömeg és a belsőenergia-sűrűség, illetve a deformáció és a belső változó mezők.

Az entrópiafluxust a Gibbs-reláció és a kényszerek segítségével a teljes divergenciák leválasztásának heurisztikus módszerével határozzuk meg [20, 21, 22]. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy az entrópiasűrűség lokális függvény, nem függ a belső változó gradiensétől, $\rho_s(\rho_e, \epsilon^{ij}, \rho, \alpha)$. Ekkor az entrópiasűrűség idő szerinti parciális deriváltját képezzük és behelyetesítjük a kényszereket az alábbiak szerint:

$$\begin{aligned} \partial_{t}\rho_{s} &+ \partial_{i}(\rho_{s}v^{i}) = \frac{\partial\rho_{s}}{\partial\rho_{e}}\partial_{t}\rho_{e} + \frac{\partial\rho_{s}}{\partial\epsilon^{ij}}\partial_{t}\epsilon^{ij} + \frac{\partial\rho_{s}}{\partial\rho}\partial_{t}\rho + \frac{\partial\rho_{s}}{\partial\alpha}\partial_{t}\alpha + \partial_{i}(\rho_{s}v^{i}) \\ &= \frac{1}{T}(\sigma_{ij}\dot{\epsilon}^{ij} - \partial_{i}(q^{i} + \rho_{e}v^{i})) - \frac{\tilde{\sigma}_{ij}}{T}\partial_{t}\epsilon^{ij} + \frac{\mu\rho + \tilde{\sigma}_{ij}\epsilon^{ij} - A\alpha}{T\rho}\partial_{i}(\rho v^{i}) + \\ &\quad \frac{A}{T}\partial_{t}\alpha + \partial_{i}(\rho_{s}v^{i}) \\ &= -\partial_{i}\left(\frac{q^{i}}{T}\right) + q^{i}\partial_{i}\left(\frac{1}{T}\right) + \frac{1}{T}\sigma_{ij}\dot{\epsilon}^{ij} - \frac{1}{T}\tilde{\sigma}_{ij}\partial_{t}\epsilon^{ij} + \\ &\quad \partial_{i}v^{i}\left(\rho_{s} - \frac{1}{T}(\rho_{e} - \rho\mu - \tilde{\sigma}_{ij}\epsilon^{ij} + A\alpha)\right) + \\ &\quad v^{i}\left(\partial_{i}\rho_{s} - \frac{\partial_{i}\rho_{e}}{T} - \frac{1}{\rho T}(\mu\rho + \tilde{\sigma}_{ij}\epsilon^{ij} - A\alpha)\partial_{i}\rho\right) + \frac{A}{T}f \\ &= -\partial_{i}\left(\frac{q^{i}}{T}\right) + q^{i}\partial_{i}\left(\frac{1}{T}\right) + \frac{1}{T}(\sigma_{ij} - \tilde{\sigma}_{ij})\dot{\epsilon}^{ij} + \frac{A}{T}(\partial_{t}\alpha + v^{i}\partial_{i}\alpha) \geq 0. \end{aligned}$$

$$\tag{10}$$

Figyeljük meg gondosan az átalakításokat és vegyük észre, hogy a deformáció szubsztanciális időderiváltja, $\dot{\epsilon}^{ij}$, jelenik meg a sztatikus feszültség, σ_{ij} , együtthatójaként. Megkaptuk az entrópiaprodukciót a szokásos (folyadékos) formában és az utolsó tagban is a

	termikus	mechanikai	belső
erő	$\partial_i \frac{1}{T}$	$\dot{\epsilon}^{ij}$	$\frac{A}{T} - \partial_i \left(\frac{A_d^i}{T}\right)$
áram	q^i	$\frac{1}{T}(\sigma_{ij} - \tilde{\sigma}_{ij})$	\dot{lpha}

1. TÁBLÁZAT. Termodinamikai erők és áramok

belső változó szubsztanciális deriváltja lép fel a parciális helyett.

Ha pedig az entrópiasűrűség a belső változó gradiensétől is függ, azaz gyengén nemlokális belső változók esetén az entrópiaprodukció kiszámításának eredményeként a következő formulát kapjuk:

$$\partial_t \rho_s(\rho_e, \epsilon^{ij}, \rho, \alpha, \partial_I \alpha) + \partial_i \left(\frac{q^i - A_d^i \dot{\alpha}}{T} + \rho v^i \right) = q^i \partial_i \left(\frac{1}{T} \right) + \frac{1}{T} (\sigma_{ij} - \tilde{\sigma}_{ij}) \partial^i v^j + \left(\frac{A}{T} - \partial_i \left[\frac{A_d^i}{T} \right] \right) \dot{\alpha} \ge 0.$$
(11)

Az utolsó, gradiens belső változót tartalmazó kifejezés levezetéséhez szükség van még egy feltevésre: az entrópiasűrűség a ∂_i lokális gradienstől közvetett módon függ, közvetlenül a $\partial_I = F_K^i \partial_i$ anyagi gradiens függvények szerepelnek benne, ahol a F_K^i a deformációgradiens (a következő fejezetben fogjuk tárgyalni). Ha ezt nem tételezzük fel, akkor értelmezhetetlen az entrópiaprodukció. Így viszont könnyen azonosíthatjuk a termodinamikai erőket és áramokat a 2. táblázat szerint.

Ez a rövid számítgatás megmutatta, hogy anyaghoz kötött mennyiségek, például szubsztanciális időderiváltak (belső változó és deformáció), anyagi szomszédsági viszonyokra jellemző térderiváltak (belső változó) természetes módon bukkannak fel az entrópiaprodukció kiszámításakor. Tehát nincs szükség a különböző objektív időderiváltak ad hoc bevezetésére (lásd pl. [23]), azok pontos formája következik a változók tenzori tulajdonságaiból, a mérlegek konzisztens használatával levezethető. Ez alapján (is) ésszerű feltételeznünk, hogy az anyaghoz kötött fizikai mennyiségekkel érdemes anyagfüggvényeket származtatnunk. Ez az oka és haszna az anyagi sokaságok elméletének, amely az elmúlt évtizedek legfontosabb fejleménye a kontinuummechanikában.

3. ANYAGI KINEMATIKA

Ebben a fejezetben azt tárgyaljuk, hogyan reprezentálhatóak a fizikai mennyiségek az anyagi sokaságon, és mi a viszony az anyagi és a térbeli leírások között.

Az 1. ábrán \mathbb{M} kontinuum testet jelöli, azaz az anyagot magát egy adott kezdeti időpontban, \mathbb{S} pedig ugyanazt a kontinuum anyagot ehhez képest t idővel később. Feltéte-



1. ÁBRA. Tér és test: anyagi és térbeli leírás

lezzük, hogy az anyag kezdetben valamely relaxált, feszültségmentes állapotban volt. Ez feltétel nem szükséges, de általában fel szokás tenni, és nagyban leegyszerűsíti a további tárgyalást [3].

A vektorokat és tenzorokat egy adott inerciális vonatkoztatási rendszerben i, j, k, ...kisbetűs absztrakt indexekkel jelöljük. A testhez rögzített vonatkoztatási rendszerben adott vektorokat és tenzorokat I, J, K, ... nagybetűs indexekkel. Az indexek absztraktok a Penrose-féle értelemben, azaz nem koordinátákat jelölnek [24, 8]. Az alapvető kinematikai mennyiség a *mozgás* egy leképezés a testről a térbe és az adott anyagi point pillanatnyi helyzetének helyvektora: $\chi^i : \mathbb{M} \times \mathbb{T} \to \mathbb{S}$. Az inverze a fordított mozgás, amelyet $R^K : \mathbb{S} \times \mathbb{T} \to \mathbb{M}$ -val jelölünk. Az adott pillanatot $t \in \mathbb{T}$ -val, egy térpontot $x^i \in \mathbb{S}$ -val, egy anyagi pontot pedig $X^K \in \mathbb{M}$ -val jelölve a mozgás és a fordított mozgás jelölése a következő:

$$\chi^{i}(X^{K},t) \in \mathbb{S}, \qquad R^{K}(x^{i},t) \in \mathbb{M}.$$
(12)

Itt \mathbb{S} és \mathbb{M} háromdimenziós vektorterek.

A χ^i mozgás és a R^K fordított mozgás egymás inverzei, tehát

$$x^{i} = \chi^{i}(R^{K}(x^{i}, t), t), \qquad X^{K} = R^{K}(\chi^{i}(X^{K}, t), t).$$
 (13)

Ezeket a mennyiségeket értelmesnek, és legalább háromszor folytonosan differenciálhatónak tekintjük a továbbiakban. A mozgás anyagi deriváltja a mozgásgradiens (deformációgradiens), a fordított mozgás térderiváltja pedig az invertált mozgásgradiens. Ezekre a gyakran használt mennyiségekre külön jelölést vezetünk be:

$$F^{i}_{\ K} = \partial_{K}\chi^{i} \in \mathbb{S} \otimes \mathbb{M}^{*}, \qquad G^{K}_{\ i} = \partial_{i}R^{K} \in \mathbb{M} \otimes \mathbb{S}^{*}.$$
 (14)

Látjuk, hogy a kovektorokat alsó indexekkel jelöltük. F^i_{K} determinánsának jelölése pedig

$$J = \det F.$$

Ennek megfelelően a fordított mozgásgradiens determinánsa det $G = \frac{1}{J}$ lesz. Ennek a mennyiségnek a különféle deriváltjai a továbbiakban fontos szerepet játszanak, ezért az alábbi differenciálokkal megadott formula hasznos lesz:

$$\mathbf{d}J = JG^{K}_{\ i}\mathbf{d}F^{i}_{\ K}.\tag{15}$$

A d differenciált kényelmesen helyettesíteni fogjuk térbeli, anyagi vagy időderiváltakkal.

 F_{K}^{i} és G_{i}^{K} egymás inverzei, ezért (13) alapján azt kapjuk, hogy:

$$F^i_{\ K}G^K_{\ j} = \delta^i_j, \qquad G^K_{\ i}F^i_{\ M} = \delta^K_M.$$
⁽¹⁶⁾

Itt δ_j^i és $\delta_M^K \mathbb{S}$ és \mathbb{M} egységtenzorai. A mozgásgradiens és a fordított mozgásgradiens deriváltjainak fontos szerepe lesz. Érdemes a determinánshoz hasonlóan differenciális formában megadni őket:

$$dF^{i}_{K} = -F^{i}_{M} dG^{M}_{j} F^{j}_{K}, \qquad dG^{K}_{i} = -G^{K}_{j} dF^{j}_{M} G^{M}_{i}.$$
(17)

 F_{K}^{i} a Jacobi-mátrix a tértenzorok anyagi tenzorokká történő transzformációjához, G_{i}^{K} a Jacobi-mátrix az anyagi tenzorok tértenzorokká történő transzformációjához. Ezért az alapvető geometriai transzformációs formulák a következőek:

$$a^{i} = F^{i}{}_{K}a^{K}, \qquad a^{K} = G^{K}{}_{i}a^{i}, \qquad b_{i} = G^{K}{}_{i}b_{K}, \qquad b_{K} = F^{i}{}_{K}b_{i}.$$
 (18)

A transzponáltakat az indexek eltolásával jelöltük, pl. $F^i_{\ K}$ transzponáltja $F_{K}^{\ i}$.

A mozgás parciális időderiváltja a térbeli sebességmező, a fordított mozgás parciális időderiváltját pedig *anyagi sebességmezőnek* fogjuk hívni:

$$v^{i} = \partial_{t}\chi^{i}(X^{K}, t) = \mathbf{d}_{t}\chi^{i}(X^{K}, t) = \dot{\chi^{i}}(X^{K}, t), \qquad V^{K} = \partial_{t}R^{K}(x^{i}, t)$$
(19)

A térbeli mezők parciális időderiváltját ∂_t -vel, az anyagi mezők parciális időderiváltját, az anyagi időderiváltat d_t-vel, vagy fölépontozással jelöljük. A sebességek összefüggenek, mert

$$\partial_t x^i = 0^i = \partial_t (\chi^i (R^K(x^i, t), t)) = \mathbf{d}_t \chi^i + \partial_K \chi^i \partial_t R^K = v^i + F^i_{\ K} V^K,$$
(20)

$$\mathbf{d}_{t}X^{K} = 0^{K} = \mathbf{d}_{t}(R^{K}(\chi^{i}(X^{K},t),t)) = \partial_{t}R^{K} + \partial_{i}R^{K}\mathbf{d}_{t}\chi^{i} = V^{K} + G_{i}^{K}v^{i}.$$
 (21)

Mindezek alapján a sebességmezőkre, és csakis azokra, az anyagi-térbeli transzformáció során egy negatív előjelet kapunk a vektorok standard transzformációs szabályához, (18)-hoz képest:

$$v^{i} = -F^{i}_{\ K}V^{K}$$
 és $V^{K} = -G^{\ K}_{i}v^{i}$. (22)

A mozgásgradiens és a fordított mozgásgradiens időderiváltjai egyenlőek a sebességmezők térbeli, illetve anyagi deriváltjaival:

$$\mathbf{d}_t F^i_{\ K} = \partial_K v^i, \qquad \partial_t G^K_{\ i} = \partial_i V^K. \tag{23}$$

Ezért aztán

$$\partial_j v^i = \mathbf{d}_t F^i_{\ K} G^K_{\ j} \qquad \text{és} \qquad \partial_M V^K = \partial_t G^K_{\ i} F^i_{\ M}. \tag{24}$$

(16) időderiváltjai kifejezhetőek a sebességekkel, tehát a térbeli és anyagi sebességgradiensek is egymással:

$$\partial_j v^i = -F^i{}_K G^M{}_j \partial_M V^K - G^M{}_j V^K \partial_K F^i{}_M, \qquad (25)$$

$$\partial_M V^K = -G^K_{\ j} F^i_{\ M} \partial_i v^j - G^K_{\ j} V^L \partial_L F^j_{\ M}.$$
⁽²⁶⁾

A divergenciákra vonatkozóan pedig egyszerű formulát kapunk:

$$\partial_i v^i + \partial_K V^K = \frac{v^k \partial_k J}{J} = -\frac{V^K \partial_K J}{J}.$$
(27)

Az anyagi és parciális időderiváltak egymással pedig az alábbi formulákon keresztül kapcsolódnak:

$$\partial_t \mathbf{a}(R^K(x^i, t), t) = \mathbf{d}_t \mathbf{a} + \partial_K \mathbf{a} \partial_t R^K = \dot{\mathbf{a}} + V^K \partial_K \mathbf{a} = \partial_t \mathbf{a},$$
(28)

$$\mathbf{d}_t \mathbf{a}(\chi^k(X^I, t), t) = \partial_t \mathbf{a} + \partial_k \mathbf{a} \mathbf{d}_t \chi^k = \partial_t \mathbf{a} + v^k \partial_k \mathbf{a} = \dot{\mathbf{a}}.$$
 (29)

Ezek az összefüggések minden vektor- és tenzormennyiségre érvényesek, de vigyázni kell az anyagi és térbeli indexekre, illetve irányokra, ahogy majd látni fogjuk.

3.0.1. ANYAGI IDŐDERIVÁLTAK

A térbeli vektorok időderiváltját kifejezhetjük az anyagi sokaság vektorainak időderiváltjaival, és fordítva is.

$$\mathbf{d}_{t}a^{K} = \mathbf{d}_{t}(G^{K}_{\ i}a^{i}) = G^{K}_{\ i}\dot{a}^{i} + a^{i}\mathbf{d}_{t}G^{K}_{\ i} = G^{K}_{\ i}\dot{a}^{i} + a^{i}G^{K}_{\ j}\mathbf{d}_{t}F^{j}_{\ M}G^{M}_{\ i} = G^{K}_{\ i}(\dot{a}^{i} - a^{j}\partial_{j}v^{i}).$$
(30)

Itt (17)-et használtuk fel, ezért

$$F^{i}_{\ K} \mathbf{d}_{t} a^{K} = \dot{a}^{i} - a^{j} \partial_{j} v^{i}, \tag{31}$$

vagyis egy anyagi a^K vektor szubsztanciális időderiváltja az a térbeli formájának a *felső áramlásos* időderiváltja. Hasonló számításokkal kapjuk, hogy

$$G^{K}_{\ i}\partial_{t}a^{i} = \partial_{t}a^{K} - a^{M}\partial_{M}V^{K}, \tag{32}$$

azaz egy a^i térbeli vektor parciális időderiváltjának anyagi formája az előző formulához hasonló kifejezésre vezet, az anyagi és térbeli szerepek felcserélésével. Ezt a kifejezést az a^i térbeli vektor anyagi formájára vonatkozó *felső áramlásos parciális* időderiváltjának hívjuk.

Az anyagi kovektorokra azt kapjuk, hogy

$$G_{i}^{K} \mathbf{d}_{t} b_{K} = \mathbf{d}_{t} b_{i} + b_{j} \partial_{i} v^{j}, \qquad (33)$$

és hasonlóan

$$F^{i}_{\ K}\partial_{t}b_{i} = \partial_{t}b_{K} + b_{M}\partial_{K}V^{M},\tag{34}$$

azaz egy b_K anyagi kovektor szubsztanciális időderiváltjának térbeli formája az a térbeli formájának *parciális alsó áramlásos* parciális időderiváltja, (33). A b_K anyagi kovektor parciális időderiváltjának anyagi formáját, (34)-t, pedig a térbeli kovektor *anyagi alsóáramlásos* időderiváltjának hívjuk.

3.1. TÉRBELI ÉS ANYAGI MÉRLEGEK

3.1.1. NANSON TÉTELE

Az előzőekben értelmezett alapvető kinematikai mennyiségek az irányokat a rugalmas kontinuum anyagi pontjainak világvonalainak megfelelően képezik le. A mérlegek viszont a vonatkozó térfogati és felületi mértékek megfelelően transzformálódnak. A vonatkozó számításokban fontos szerepet játszik Nanson tétele, amely a következő:

$$\partial_i \left(\frac{F^i{}_K}{\det F} \right) = 0_K. \tag{35}$$

(15) és (17) felhasználásával a bizonyítás kézenfekvő:

$$\partial_{i}\left(\frac{F^{i}_{K}}{J}\right) = \left(\frac{\partial_{i}F^{i}_{K}}{J}\right) - \left(\frac{F^{i}_{K}}{J^{2}}\right)\partial_{i}J = \frac{1}{J}\left(\partial_{i}F^{i}_{K} - F^{i}_{K}G^{M}_{\ j}\partial_{i}F^{j}_{\ M}\right) = \frac{\partial_{i}G^{K}_{\ j}}{J}\left(-F^{i}_{\ K}F^{j}_{\ M} + F^{i}_{\ M}F^{j}_{\ K}\right) = 0.$$
(36)

hiszen $\partial_i G^K_{\ j} = \partial_j G^K_{\ k}$.

Ennek egyszerű és fontos következménye:

$$\partial_K \left(G^K_{\ i} J \right) = 0^i. \tag{37}$$

3.2. Mérlegek

3.3. SKALÁR MÉRLEG

Egy *a* extenzív fizikai mennyiség lokális, térbeli mérlege a mennyiség sűrűségeivel kifejezve a következő:

$$\partial_t a + \partial_i (a^i + av^i) = 0. \tag{38}$$

Itt a^i a fluxus, azaz a konduktív áramsűrűsége. Ezt úgy kaptuk, hogy a teljes áramsűrűségről leválasztottuk a konvektív, azaz av^i részt.

Fizikai mennyiségek *anyagi sűrűségeinek* azok anyagi formáját nevezzük a mozgásgradiens J determinánsával szorozva. Tehát a anyagi sűrűségét és anyagi fluxusát úgy kapjuk, hogy

$$\hat{a} = Ja, \qquad \hat{a}^K = JG^K_{\ i}a^i. \tag{39}$$

Itt a második formulát Piola-transzformációnak nevezzük ([25], p17 (2.29)).

Mindezek figyelembe vételével (38) a következő formába transzformálható:

$$\partial_t \left(\frac{\hat{a}}{J} \right) + \partial_i \left(\frac{\hat{a}^K F_K^{\ i}}{J} - \frac{\hat{a} F^i_{\ K} V^K}{\det F} \right) = \frac{1}{J} \left(\partial_t \hat{a} + \hat{a} \partial_K V^K - \partial_K \hat{a} V^K + \partial_K \hat{a}^K \right) = \frac{1}{J} \left(d_t \hat{a} + \partial_K \hat{a}^K \right).$$
(40)

Tehát egy skalár értékű fizikai mennyiség mérlegének térbeli és anyagi formája közötti transzformáció

$$\partial_t a + \partial_i (a^i + av^i) = \frac{1}{J} \left(d_t \hat{a} + \partial_K \hat{a}^K \right) = 0.$$
(41)

A mozgásgradiens determinánsa szorzóként megjelenve jól mutatja, hogy a helyes formula a térbeli mértékeket transzformálja anyagivá és vissza.

3.3.1. TÖMEG

A tömeg mérlege különleges, mert a tömegnek nincs fluxusa (konduktív áramsűrűsége).

$$\partial_t \rho + \partial_i (\rho v^i) = 0. \tag{42}$$

Ezért az anyagi mennyiségek

$$\hat{\rho} = J\rho, \qquad \partial_k \rho^K = 0.$$
 (43)

Emiatt a tömeg mérlege az anyagi sokaságon különösen egyszerű:

$$d_t \hat{\rho} = 0, \tag{44}$$

A tömeg anyagi sűrűsége időben állandó, azaz a kontinuum sebességét a tömeg definiálja. Tehát magát az anyagi sokaságot is a tömeg definiálja. A térbeli és anyagi mértékek szorosan összefüggenek a tömegmérlegen keresztül: az anyagi tömegsűrűség időben változatlan, ezért a térbeli formája tisztán az áramlás miatti térfogat-transzformáció.

3.4. VEKTOR MÉRLEG

Egy a^i extenzív vektormennyiség lokális, térbeli mérlege a sűrűségekkel kifejezve sokkal bonyolultabb, mint az előző formula, a mértékek transzformációja miatt. A térbeli mérleg általában

$$\partial_t a^i + \partial_j (T^{ij} + a^i v^j) = 0^i.$$

$$\tag{45}$$

Itt T^{ij} az a^i fluxusa, azaz konduktív áramsűrűsége.

 a^i anyagi sűrűségét és T^{ij} anyagi fluxusát az alábbi formában definiáljuk:

$$\hat{a}^{K} = JG^{K}_{\ i}a^{i} = G^{K}_{\ i}\hat{a}^{i}, \qquad \hat{T}^{KM} = JG^{K}_{\ i}G^{M}_{\ i}T^{ij} = G^{K}_{\ i}\hat{T}^{iM}.$$
(46)

Itt az első formula a skalár fluxusának Piola-transzformációjával azonos és egyúttal \hat{a}^i -t is definiálja, a mértéktranszformált térvektort, mint $\hat{a}^i = Ja^i$. A mindkét indexében anyagi tenzorra vonatkozó második formulában a mozgásgradiens determinánsa csak egyszer jelenik meg, és a vegyes tér-anyagi, T^{iK} tenzort is megadtuk.

Ekkor a (45) mérleg két lépésben transzformálható. Először csak a mértéktranszformált mennyiségek bevezetésével kapjuk, hogy

$$\partial_t \left(\frac{\hat{a}^i}{J}\right) + \partial_j \left(\frac{\hat{T}^{iK} F_K^{\ j}}{J} - \frac{\hat{a}^i F^j_{\ K} V^K}{J}\right) = \frac{1}{J} \left(\partial_t \hat{a}^i + \partial_K \hat{T}^{iK} - V^K \partial_K \hat{a}^i\right) = \frac{1}{J} \left(d_t \hat{a}^i + \partial_K \hat{T}^{iK}\right) = 0^i.$$
(47)

Ez ugyanolyan formulára vezet, mint amelyet a skalármérlegeknél kaptunk, és ezt a^i *linéáris mérlegének* nevezzük:

$$d_t \hat{a}^i + \partial_K \hat{T}^{iK} = 0^i.$$
(48)

A tiszta anyagi mérleg további transzformációkat igényel az \hat{a}^{K} anyagi vektor a \hat{T}^{KM} anyagi fluxus bevezetéséhez. Ennek megfelelően

$$d_{t}\hat{a}^{i} + \partial_{K}\hat{T}^{iK} = d_{t}(F^{i}{}_{K}\hat{a}^{K}) + \partial_{K}(F^{i}{}_{M}\hat{T}^{MK}) =$$

$$F^{i}{}_{K}(\mathbf{d}_{t}\hat{a}^{K} + \partial_{M}T^{MK}) - \hat{a}^{K}(F^{i}{}_{M}\partial_{K}V^{M} + V^{L}\partial_{L}F^{i}{}_{K}) + \partial_{K}F^{i}{}_{M}T^{MK}$$

$$F^{i}{}_{K}(\mathbf{d}_{t}\hat{a}^{K} - \hat{a}^{M}\partial_{M}V^{K} + \partial_{M}T^{MK}) + \partial_{K}F^{i}{}_{M}(T^{MK} - \hat{a}^{M}V^{K}) =$$

$$F^{i}{}_{K}\left(\partial_{t}\hat{a}^{K} - \hat{a}^{M}\partial_{M}V^{K} + a^{K}\partial_{M}V^{M} + \partial_{M}\hat{T}^{MK} + G^{K}{}_{j}\partial_{L}F^{j}{}_{M}\hat{T}^{ML}\right) = 0^{i}.$$
(49)

Itt felhasználtuk a sebességgradiensek közötti viszonyt kifejező (26) formulát és bevezettük a *teljes anyagi fluxust*, $\bar{T}^{MK} = T^{MK} - \hat{a}^M V^K$ -t. Vegyük észre a $\partial_{tu} \hat{a}^K = \partial_t \hat{a}^K - \hat{a}^M \partial_M V^K$ részleges felsőáramlásos időderivált megjelenését a számításokban. Ezért a vektormennyiségre vonatkozó mérleg végül a következő anyagi formába írható:

$$\partial_{tu}\hat{a}^{K} + a^{K}\partial_{M}V^{M} + \partial_{M}\bar{T}^{MK} + G^{K}_{\ j}\partial_{L}F^{j}_{\ M}\bar{T}^{ML} = 0^{K}.$$
(50)

Ez formálisan a térbeli mérlegre hasonlít, az utolsó tag kivételével, amely a kontinuum inhomogenitásainak köszönhető, mert arányos a a mozgásgradiens anyagi gradiensével.

Összefoglalóan a térbeli, lineáris és anyagi mérlegek viszonya a következő:

$$\partial_t a^i + \partial_i (T^{ij} + a^i v^j) = \frac{1}{J} (d_t \hat{a}^i + \partial_K \hat{T}^{iK}) = \frac{F^i_K}{J} (\mathbf{d}_{tu} \hat{a}^K + \partial_M T^{MK} + \sigma^K) = 0^i.$$
(51)

Itt az inhomogenitási forrástag $\sigma^{K} = G^{K}_{\ j} \partial_{L} F^{j}_{\ M} (T^{ML} - \hat{a}^{M} V^{L}).$

3.4.1. A LENDÜLET MÉRLEGE

A lendületmérlege egy speciális vektormérleg. A lendület lokális, térbeli mérlegéből indulunk ki:

$$\partial_t p^i - \partial_j (\sigma^{ij} + p^i v^j) = 0^i.$$
(52)

ahol p^i a lendületsűrűség, σ^{ij} a Cauchy-feszültség, azaz a lendület konduktív áramsűrűsége, a lendületfluxus.

A transzformált köztes mennyiségek általános definíciójának megfelelően itt bevezetjük a \hat{p}^i lineáris lendületsűrűséget, és a σ^{Ki} első Piola–Kirchhoff-feszültséget:

$$\hat{p}^i = Jp^i, \qquad \sigma^{iK} = JG_j^{\ K}\sigma^{ij}.$$
(53)

A lineáris lendületsűrűség átírható a $\hat{p}^i = \bar{\rho}v^i$ formába is, mert $J\rho = \bar{\rho}$ és $p^i = \rho v^i$. Ekkor a lendület lineáris mérlege

$$\bar{\rho}d_t v^i - \partial_K \sigma^{iK} = 0^i \tag{54}$$

lesz. Az anyagi lendület és anyagi feszültség pedig a következőek:

$$\hat{p}^{K} = \bar{\rho} G^{K}_{\ i} v^{i} = -\rho \bar{V}^{K}, \qquad \sigma^{KM} = J G^{K}_{\ i} G^{M}_{\ j} \sigma^{ij}.$$
(55)

Ez utóbbi a második Piola-Kirchhoff-feszültség. Ezek után a lendület anyagi mérlege

$$\bar{\rho}\mathbf{d}_{tu}V^K + \partial_M \sigma^{KM} + f^K_{inh} = 0^K.$$
(56)

Itt $f_{inh}^{K} = G_{j}^{K} \partial_{L} F_{M}^{j} (\sigma^{ML} + \hat{\rho} V^{M} V^{L})$ az inhomogenitási erő.

4. VÉGES DEFORMÁCIÓS TERMOSZTATIKA

A fenti megfontolások után a szokásos úton a belső energia mérlegét kellene megkonstruálni. Azonban az energia mérlege nem skalár egyenlet már a folyadékok esetén sem. A kinetikus elmélet és függetlenül tőle általánosabb fenomenologikus megfontolások szerint az energia objektív mérlegében figyelembe kell vennünk, hogy másodrendű tenzor komponenseként tudjuk csak Galilei-transzformációs tulajdonságait megérteni [26, 27, 8]. Ezt a számítást itt most nem mutatjuk be, viszont ettől függetlenül is fontos megállapításokat tehetünk az entrópiamérlegre vonatkozóan.

A második szakasz, és azon belül is a (7) Gibbs-reláció megmutatta, hogy kis deformációs esetben az entrópiát $\rho \epsilon^{ij}$ függvényének feltételezve kapunk helyes entrópiamérleget és entrópiaprodukciót (meg például kompatibilitást az ideális gáztörvénnyel, stb.). Véges deformációk esetén két eset a legfontosabb. Ezek a szokásosan objektívnak tekintett nagy alakváltozási mértékek, az $F^i{}_K F^{\ j}_K$ bal Cauchy–Green alakváltozási tenzor [2, 3] alapján kitüntetett objektív térbeli alakváltozás, illetve a $F_K{}^i F^i{}_L$ jobb Cauchy– Green alakváltozási tenzor, amely, mint látjuk, tulajdonképpen anyagi sokaságon értelmezett kotenzor. Az entrópia deriváltjait kényelmes módon a Gibbs-relációban összegezhetjük ezekben az esetekben. Először is a kis deformációkra vonatkozó formulában vegyük észre a 3.3 fejezetben bevezetett anyagi mennyiségeket:

$$d\rho_e = T d\rho_s + \hat{\tilde{\sigma}}_{ij} d\left(\frac{\epsilon^{ij}}{J}\right) + \mu d\rho.$$
(57)

Itt $\hat{\sigma}_{ij} = J\tilde{\sigma}_{ij}$ a Kirchhoff-feszültség. Vegyük észre, hogy az ϵ^{ij} kis deformáció pedig anyagi sűrűségből alakul át nem anyagivá a J Jacobi-determinánssal történő osztással, tehát eredetileg kalapos lett volna a konzisztens jelölése. Ennek fényében, tekintetbe véve azt is, hogy kis deformációkra az (5) formulával kompatibilitásra törekszünk a bal és jobb Cauchy–Green tenzorokkal, a megfelelő alakváltozási állapothatározót a fenti bal és jobb Cauchy–Green alakváltozások felével definiáljuk, bevezetve a $\hat{B}^{ij} = F^i_{\ K} F^{\ j}_{\ K}/2$ és a $\hat{A}_{KL} = F^{\ i}_{\ K} F^i_{\ L}$ tenzorokat. Ekkor a Gibbs-relációk a következőek :

$$\mathrm{d}\rho_e = T\mathrm{d}\rho_s + T_{ij}\mathrm{d}B^{ij} + \mu\mathrm{d}\rho,\tag{58}$$

$$\mathrm{d}\rho_e = T\mathrm{d}\rho_s + \hat{T}^{KM}\mathrm{d}A_{KM} + \mu\mathrm{d}\rho.$$
⁽⁵⁹⁾

Itt az entrópiasűrűséget kétféleképpen vettük figyelembe. Egyrészt $\rho_s(\rho_e, A^{ij}, \rho)$ a fenti első kifejezésben, illetve $\rho_s(\rho_e, A_{KM}, \rho)$ a fenti második formulában. T_{ij} és T^{KM} feszültségeket a mechanikai részben a

$$\frac{\partial s_b}{\partial A^{ij}} = \frac{1}{T} T_{ij}, \qquad \frac{\partial s_j}{\partial A_{KM}} = \frac{1}{T} \hat{T}^{KM}$$
(60)

parciális deriváltak definiálják. Megfigyelhető, hogy a bal Cauchy–Green alakváltozás másodrendű tenzor. Ezért a hozzá tartozó sztatikus feszültség másodrendű kotenzor. Ennek értelmezéséhez a mérlegeknek a hagyományostól eltérő reprezentációja szükséges, ezért most ezzel itt nem foglalkozunk. A jobb Cauchy–Green alakváltozási kotenzor, az anyagi sokaságon értelmezett mennyiség, ezért különösebb magyarázat nélkül, természetes módon anyagra jellemző függvény. A hozzá tartozó feszültség pedig a második Piola–Kirchhoff-feszültség. Tekintsük ugyanis a következő átalakításokat:

$$2T^{KM}d\hat{A}_{KM} = T^{KM}(F_{K}^{\ i}dF_{\ M}^{i} + dF_{K}^{\ i}F_{\ M}^{i}) = S^{Kk}(G_{k}^{\ M}F_{K}^{\ i}dF_{\ M}^{i} + dF_{K}^{\ i}\delta_{k}^{i}) = \sigma^{jk}(\delta_{j}^{i}dF_{\ M}^{i}G_{\ j}^{L} + G_{\ j}^{L}dF_{\ L}^{i}\delta_{k}^{i})$$
(61)

ahol $S^{Ki} = T^{KM} F_M^{\ i}$ és $\sigma^{ji} = F^j_{\ K} S^{Ki} = F^j_{\ K} T^{KM} F_M^{\ i}$ a Cauchy-feszültség. \hat{S}^{Ki} az első Piola-Krichhoff-feszültség, $\hat{\sigma}^{ij}$ pedig a Kirchhoff-feszültség.

Ha a fenti formulában a differenciált időderiváltakkal helyettesítjük, akkor a mechanikai teljesítményt kapjuk:

$$T^{KM}\frac{d}{dt}\hat{A}_{KM} = \sigma^{jk}\frac{\partial_k v_j + \partial_j v_k}{2} = \sigma^{jk}\partial_{(k}v_{j)}.$$
(62)

Látjuk, hogy a klasszikus mechanikai teljesítményformula térbeli reprezentációja közvetlenül átszámítható az anyagi sokaságra és vissza. Ez mutatja a Piola–Kirchhoff-feszültségekhez tartozó deformációsebességekkel való viszonyt is.

5. Összefoglalás

A fenti számítások mutatják, hogy véges deformációs kontinuummechanikában a termodinamikai konzisztencia megköveteli a feszültség- és deformációfogalmak összehangolt használatát, különben esélytelen értelmes disszipatív elméletet bevezetnünk, mert nem kapunk mértékhelyes és vonatkoztatásirendszer-független Gibbs-relációt. Ráadásul a tökéletes, disszipációmentes esetben is problémákba ütközünk, mert a mechanikai teljesítmény lesz vonatkoztatásirendszer-, és speciálisan reprezentációfüggő. Mindezt közvetlen megfontolásokkal is lehet látni [7, 6], illetve a vonatkozó numerikus számítások problémái is mutatják. A leírtak alapján tehát az anyagfüggvények és relációk származtatásakor az entrópiamérlegben az anyagi sokaságon értelmezett mennyiségek használata minden további feltevés nélkül kell objektív, vonatkoztatási rendszertől független, csak az anyag mozgásához kötött idő- és térderiváltakra vezessen (lásd például [28]).

KÖSZÖNETMONDÁS

Ez a dolgozat a magyar Nemzeti Kutatási és Fejlesztési Hivatal - NKFIH 116197(116375), NKFIH 124366(124366) és NKFIH 123815 pályázatai, továbbá a szlovák VEGA 1/0740/16 pályázat támogatásával készült.

IRODALOM

- [1] A. Bertram. *Elasticity and Plasticity of Large Deformations (An Introduction)*. Springer, 2005.
- [2] Fülöp T. és Ván P. Véges rugalmas és képlékeny deformációk leírása. In Fülöp T., editor, *Idő és térderiváltak anyagtörvényekben*, volume 10 of *Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár*, pages 99–151. Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2010.
- [3] T. Fülöp and P. Ván. Kinematic quantities of finite elastic and plastic deformations. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 35:1825–1841, 2012. arXiv:1007.2892v1.
- [4] Fülöp T. Objective thermomechanics. 2015. arXiv:1510.08038.
- [5] Cs. Asszonyi, A. Csatár, and T. Fülöp. Elastic, thermal expansion, plastic and rheological processes – theory and experiment. *Periodica Polytechnica Civil Engineering*, 60(4):591– 601, 2016.
- [6] Ladislav Écsi, Pavel Élesztos, and Roland Jančo. An alternative J2 material model with isotropic hardening for coupled thermal-structural finite-strain elastoplastic analyses. In *MATEC Web of Conferences*, volume 157, page 06003. EDP Sciences, 2018.
- [7] Écsi L., Fekete B., Ful op T., and P. Ván. A thermodynamically consistent material model for cyclic plasticity. 2017. to be published in a special issue of EnvGeo, related to JETC 2017.
- [8] P. Ván. Galilean relativistic fluid mechanics. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 29(2):585–610, 2017. arXiv:1508.00121 v1- Hungarian; v2- English.
- [9] P. Ván, V. Ciancio, and L. Restuccia. Generalized galilean transformations of tensors and cotensors with application to general fluid motion. *accepted in Atti Accademia Peloritana dei Pericolanti, Proceeding of THERMOCON2016, Messina,19-22 April 2016, 2018.* ar-Xiv:1608.05819.
- [10] P. Kostädt and Mario Liu. Three ignored densities, frame-independent thermodynamics, and broken Galilean symmetry. *Physical Review E*, 58:5535, 1998.
- [11] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. Fluid mechanics. Pergamon Press, London, 1959.
- [12] IE Dzyaloshinskii and GE Volovick. Poisson brackets in condensed matter physics. Annals of Physics, 125(1):67–97, 1980.
- [13] Yu L Klimontovich. On the need for and the possibility of a unified description of kinetic and hydrodynamic processes. *Theoretical and Mathematical Physics*, 92(2):909–921, 1992.

- [14] H. Brenner. Fluid mechanics revisited. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 370(2):190–224, 2006.
- [15] D. Bedeaux, S. Kjelstrup, and H.C. Öttinger. On a possible difference between the barycentric velocity and the velocity that gives translational momentum in fluids. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 371(2):177–187, 2006.
- [16] H. C. Öttinger, H. Struchtrup, and M. Liu. Inconsistency of a dissipative contribution to the mass flux in hydrodynamics. *Physical Review E*, 80(5):056303, 2009.
- [17] P. Ván, M. Pavelka, and M. Grmela. Extra mass flux in fluid mechanics. Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, 42(2):133–151, 2017. arXiv:1510.03900.
- [18] I. Gyarmati. Non-equilibrium Thermodynamics /Field Theory and Variational Principles/. Springer Verlag, Berlin, 1970.
- [19] A. Berezovski and Ván P. Internal Variables in Thermoelasticity. Springer, 2017.
- [20] S. R. de Groot and P. Mazur. *Non-equilibrium Thermodynamics*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962.
- [21] G. A. Maugin. On the thermomechanics of continuous media with diffusion and/or weak nonlocality. Archive of Applied Mechanics, 75:723–738, 2006.
- [22] Peter Ván. Weakly nonlocal non-equilibrium thermodynamics: the Cahn-Hilliard equation. In Generalized Models and Non-classical Approaches in Complex Materials 1, pages 745– 760. Springer, 2018.
- [23] Angelo Morro. Modelling of elastic heat conductors via objective rate equations. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, pages 1–13, 2017.
- [24] R. Penrose. The Road to Reality. Jonathan Cape, 2004.
- [25] Gérard A Maugin. Configurational forces: thermomechanics, physics, mathematics, and numerics. CRC Press, 2011.
- [26] T. Ruggeri. Galilean invariance and entropy principle for systems of balance laws. *Continu-um Mechanics and Thermodynamics*, 1(1):3–20, 1989.
- [27] I. Müller and T. Ruggeri. Rational Extended Thermodynamics, volume 37 of Springer Tracts in Natural Philosophy. Springer Verlag, New York-etc., 2nd edition, 1998.
- [28] P. Ván. Objective time derivatives in non-equilibrium thermodynamics. Proceedings of Estonian Academy of Sciences, 57(3):127–131, 2008. Lecture held at CPEA'07.

NEM-FOURIER HŐVEZETÉSI EGYENLETEK ÉS MEGOLDÁSI MÓDSZEREIK

Lovas Ádám^{1,3} – Rieth Ágnes¹ – Kovács Róbert^{1,2,3} – Fülöp Tamás^{1,3} ¹BME GPK Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, Budapest ²MTA Wigner FK RMI, Elméleti Fizikai Osztály, Budapest ³Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, Budapest

Nem-Fourier hővezetési jelenség többféle módon is jelentkezhet, például alacsony hőmérsékleten hullámformában, vagy szobahőmérsékleten túlcsillapított terjedésként. A jelenségek leírására alkalmas modelleket a nemegyensúlyi termodinamika keretein belül vezetjük le, ezzel egy egységes elméleti hátteret adva a jelenségek modellezésének. Ezek után tárgyaljuk a származtatott általánosított hővezetési egyenletek megoldási módszereit, analitikus és numerikus oldalról egyaránt.

1. BEVEZETÉS

A klasszikus, 1822-ben publikált Fourier-féle hővezetési egyenletnek [7] alapvető szerepe a fizikai és mérnöki tudományterületeteken vitathatatlan. A transzportfolyamatok leírásától kezdve az ipari méretezési feladatokig mindenhol felbukkan.

Ugyanakkor viszont a műszaki tudományterületek nagymértékű fejlődésével egyre kisebb és kisebb méret-, hőmérséklet- és időskálákat értünk el. Az ilyen körülmények között a klasszikus Fourier-egyenlet nem vagy csak nagy pontatlanság révén szolgáltat leírást a folyamatokra.

A probléma két okból fakad. Elsőként, a klasszikus hővezetési egyenlet az energiaegyenlettel kombinálva parabolikus tulajdonságot mutat. Ez paradox módon egy kimondottan nem-fizikai jellegű leírási módot szolgáltat a folyamatra, ahol végtelen jelterjedési sebesség lép fel. Ez a jelenség sok alkalmazási (makroszkopikus) területen nem okoz problémát [8]. Másrészt, kis méret- és időskálákon a problémát a vezető testhez képesti nagy szabad úthossz¹ és a diffúzióhoz képesti sokkal rövidebb időskála okozza.

A nem-Fourier jellegű hővezetési tulajdonság már régóta ismert jelenség a mérnökök és a fizikusok körében. Az első becslések a Fourier-hővezetésen túli jelenségekre már a 20. század elején napvilágot láttak. Lev Landau Nobel-díjas szovjet elméleti fizikus az 1930-as években megjósolt az extrém alacsony hőmérsékletű folyadékokban egy újfajta hullámjelenséget, Tiszával párhuzamosan [10, 11, 12]. Ezt az elméletet Vasily Peshkov szovjet fizikus kísérleti eredményekkel támasztotta alá 1944-ben, amit követően tovább vizsgálta a jelenséget [13]. Az új hullámjelenséget rendkívül alacsony hőmérsékleten, szuperfolyékony héliumban fedezte fel (1.6 K) [10, 14, 15] és elnevezte "második hangnak"². A jelenség felfedezése óta sincs egységesen elfogadott leíró egyenlet a folyamatra, viszont rengeteget fejlődött és finomodott a vizsgálatának és leírásának módja. A legegy-szerűbb leírása a folyamatnak az úgynevezett memóriahatással történő kibővített Fourieregyenlet (ezt később részletesen tárgyaljuk), amit Maxwell–Cattaneo–Vernotte (MCV) egyenletnek neveznek [16, 17, 18].

A következő mérföldkő a jelenség kutatásának történetében, amikor szilárd anyagokban mutatták ki ezt a típusú hullámterjedést. Már az '50-es és '60-as évek elején léteztek elméleti levezetések a szilárd halmazállapotú anyagokban történő "második hang" típusú hőterjedés leírására [19, 20]. Habár a kiterjesztett elméletek előrelépést jelentettek, további kiegészítésükre volt szükség. Guyer és Krumhansl munkássága kellett ahhoz, hogy a jelenség detektálásának lehetőségei kiterjedjenek szilárd közegekre az úgynevezett ablakfeltétel segítségével [21, 22, 23]. Ez támpontot adott ahhoz, hogy milyen körülményekre van szükség a második hang jelenségének kiméréséhez. Van azonban egy harmadik terjedési mód is, az úgynevezett ballisztikus hővezetés, melyet előszőr 1970-ben szilárd héliumban [24], és ugyanabban az évben nátrium-fluoridban [25, 26] mutattak ki, majd két évvel később, 1972-ben, bizmutkristályban [27].

Az elektronikai ipar egyre nagyobb ütemben történő fejlődése járult hozzá a jelenség megfigyelésének következő szakaszához. Az alkatrészeket egyre nagyobb hőterhelés érte, miközben egyre kisebb méretet értek el. A kortárs elektronikai iparral párhuzamosan kifejlődtek olyan új kísérleti területek, ahol szintén számolni kellett a kisebb méretek hővezetési tényezőre gyakorolt hatásával, ilyenek voltak a szén nanocsövek és az úgynevezett nanofolyadékok³ [29, 30]. A méretskálák már a 2000-es években 10–100 nm tartományokat értek el, ahol a termikus vizsgálat számos érdekes eredményt mutatott. Tehát a hővezetés modellezése, és ezzel együtt annak javítása kitüntetett jelentőségű lett.

¹Egy részecske által két ütközés között átlagosan megtett út. A Knudsen-szám a közepes szabad úthossz és a minta karakterisztikus hosszának az aránya [9].

² Ezen típusú hullám nem a nyomással kapcsolatos, mint ahogyan a neve sugallja, besorolása egy úgynevezett kvantummechanikai hőmérséklethullám.

³ A nanofolyadékok olyan szuszpenziók, amikben nanométer tartományú szemcsék vannak jelen. Ezek a folyadékok figyelemreméltó hőtani tulajdonságokat mutatnak [28].

Mind a kísérleti tapasztalatok [31, 32, 33, 34], mind pedig az elméleti kutatások [35, 36, 37] azt mutatták, hogy a vezetési tulajdonságok a makroszkopikus modellektől való eltérést mutatnak az esetek többségében, akár már szobahőmérsékleten is. Ennek azt az okot tulajdonították, hogy a transzportfolyamatokban szerepet vállaló energiahordozók átlagos szabad úthossza összemérhetővé válik a geometriai méretekkel. Az ilyen viselkedés az elektromos vezetés és a különböző részecsketranszportok eseteiben már ismert tulajdonságok.

1.1. Célkitűzés

Ezen eltérések pontosabb megértéséért született az igény, hogy feltárjuk a klasszikus elmélettől való eltéréseket és olyan módszertant találjunk, ami képest ezeket kezelni; ezáltal olyan eszközt adva a tervezők kezébe, amik segítségével pontosabb méretezés érhető el az újabb és újabb technológiákban, amik jellegükből fakadóan jelentős eltéréseket hordozhatnak.

A hővezetésről szóló fejezet első részében az általánosított egyenletek termodinamikai hátterét röviden tárgyaljuk, utalunk a megfelelő irodalmakra, majd bemutatjuk azok numerikus és analitikus megoldási lehetőségeit.

A fejezet második részében a BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékén (EGR) végzett mérések során kapott eredmények bemutatása és elemzése következik. Ennek az írásnak nem tárgya az alacsony hőmérsékletű jelenségek vizsgálata, kizárólag a szobahőmérsékleten is tapasztalható, klasszikustól eltérő jelenségeket bemutatása.

Végezetül az utolsó rész keretében a végeselemes modellezési lehetőségeket vizsgáljuk meg.

2. A HŐVEZETÉSI EGYENLETEK

A hővezetési egyenletek kiterjesztése, vagy más szóval általánosítása azt a szerepet tölti be, hogy az általunk megfigyelt folyamatokat helyesebben írják le. Ez oly módon történik, hogy magasabb rendű mennyiségeket vezetünk be a klasszikus egyenleteinkbe. A kibővítések a termodinamika második főtételére alapozva épülnek be a konstitutív egyenletbe, mely nem mást, mint az entrópiaprodukció pozitivitását fogalmazza meg.

A két fő kiterjesztési irány, melyet e helyütt tárgyalunk, az úgynevezett memória- és a nemlokális hatás. Az általánosítás eredménye a ballisztikus-konduktív modell, amely képes visszaadni az ismert hővezetési egyenleteket, és kielégítően leírni a jelenségeket. Az egyenletek kiterjesztésének részletes háttere az alábbi irodalmakban [38, 43, 44] van tárgyalva.

2.1. Memória- és nemlokális hatások

Fizikai értelmezésük abban testesül meg, hogy az általunk vizsgált anyagi pont környezetétől való függést tételeznek fel. A memóriahatás az időbeli korábbi állapotokat veszi figyelembe, a nemlokális hatás pedig a vizsgált pont és környezete között fellépő kapcsolatra utal.

2.2. A HŐVEZETÉSI ELMÉLET ÁLTALÁNOSÍTÁSA

Az általánosítás során az egyenleteket merev és izotrop anyagra írjuk fel. A levezetés során az indexes jelölésrendszer lesz alkalmazva, az Einstein-féle összegzési konvenció használatával.

A kiinduló egyenletünk a belső energia mérlegegyenlete:

$$\rho \dot{e} + \partial^i q^i = 0, \tag{1}$$

ahol ρ az anyag sűrűsége, e jelöli a fajlagos belső energiát, konstans fajhő esetén e = cT, ahol c és T az izokor fajhő és a hőmérséklet. A ∂^i a térderiváltat jelenti, a q^i pedig a belső energia áramsűrűségének a konduktív része, vagyis a hőáram. A pont a szubsztanciális időderiváltat jelöli. A kiinduláskor tett kikötésünk, miszerint merev közeget tételezünk fel, azt eredményezi, hogy a szubsztanciális időderiválttal, valamint az áramsűrűségnek nincs konvektív része. Továbbá így a sűrűség konstans.

A következő összefüggés az entrópia mérlegegyenlete, ami a termodinamika második főtételének matematikai megfogalmazása:

$$\rho \dot{s} + \partial^i J^i = \sigma \ge 0, \tag{2}$$

ahol s az entrópiasűrűség, J^i pedig az entrópia áramsűrűségének vektora.

 Az entrópiafüggvényt belső változók felhasználásával⁴ a következőképpen definiáljuk:

$$s(e,q^{i},Q^{ij}) = \hat{s}(e) - \frac{m_1}{2}q^{i}q^{i} - \frac{m_2}{2}Q^{ij}Q^{ij}, \qquad (3)$$

ahol m_1 és m_2 pozitív skalár anyagi paraméterek, Q^{ij} pedig egy másodrendű tenzor. Ekkor még nem adunk fizikai interpretációt ennek a tenzornak.

⁴ A klasszikus elméletek kiterjesztésére használt módszer [45].

– Feltételezzük, hogy az entrópia-áramsűrűség zérus, haq = 0 és Q = 0. Ezt a feltételt legegyszerűbben a következő egyenlet elégíti ki,

$$J^i = B^{ij}q^j + C^{ijk}Q^{jk} , (4)$$

ahol B^{ij} egy másodrendű tenzoriális konstitutív függvény, a második tagban szereplő C^{ijk} pedig harmadrendű. Ezek az úgynevezett Nyíri-szorzók [46].

Ezeket behelyettesítve az entrópia (2) mérlegegyenletébe, kapjuk:

$$\sigma = \partial^{i} q^{j} \left(B^{ij} - \frac{1}{T} \delta^{ij} \right) + q^{j} \left(\partial^{i} B^{ij} - m_{1} \dot{q^{i}} \right) + Q^{jk} \left(\partial^{i} C^{ijk} - m_{2} \dot{Q^{ij}} \right) + C^{ijk} (\partial^{i} Q^{jk}) \ge 0, \quad (5)$$

ahol δ^{ij} a Kronecker-szimbólum. Az entrópiaprodukció egyenlőtlenségét leíró egyenletet (5) legegyszerűbben termodinamikai erőkre és áramokra szeparálva [47, 48], és közöttük lineáris kapcsolatot feltételezve tudjuk kielégíteni. Ebben az esetben is a [43] irodalmat követjük, mely szerinti a termodinamikai erők és áramok az első táblázatban olvashatók.

	Klasszikus	Kiterjesztett	Belső változós I	Belső változós II
Áramok	$\dot{q^i} - \partial^i B^{ij}$	$B^{ij} - \frac{1}{T}\delta^{ij}$	$\dot{Q^{jk}} - \partial^i C^{ijk}$	C^{ijk}
Erők	q^i	$\partial^i q^j - Q^{ij}$	$\partial^j q^k - Q^{jk}$	$\partial^i Q^{jk}$

1. TÁBLÁZAT. Termodinamikai erők és áramok.

Ekkor már definiálhatjuk a termodinamikai erők és áramok közötti lineáris kapcsolatokat, az egyenlőségek bal oldalán az áramok, jobb oldalán az erők vannak:

$$m_1 \dot{q^i} - \partial^i B^{ij} = -l_1 q^i, \tag{6}$$

$$m_2 \dot{Q}^{jk} - \partial^i C^{ijk} = -k_1 Q^{jk} + k_{12} \partial^j q^k, \tag{7}$$

$$B^{ij} - \frac{1}{T} \delta^{ij} = -k_{21} Q^{ij} + k_2 \partial^i q^j,$$
 (8)

$$C^{ijk} = n\partial^i Q^{jk}. (9)$$

A második főtétel egyenlőtlenségének teljesülése megköveteli az

$$l_1, k_1, k_2, n \ge 0, \tag{10}$$

$$K = k_1 k_2 - k_{12} k_{21} \ge 0 \tag{11}$$

egyenlőtlenségek teljesülését, ahol $l_1 k_1 k_2 k_{12} k_{21}$ a vezetési együtthatók. Ha elimináljuk a B^{ij} és C^{ijk} konstitutív függvényeket⁵, valamint a Q^{ij} tenzoriális belső változót, akkor

⁵ Ezek ismeretlen függvények, de kiküszöbölhetőek.

az alábbi egyenlethez jutunk (egy térdimenzióban):

$$m_{2}\partial_{xt}\frac{1}{T} - n\partial_{x}^{3}\frac{1}{T} + k_{1}\partial_{x}\frac{1}{T} = m_{1}m_{2}\partial_{tt}q + (m_{2}l_{1} + m_{1}k_{1})\partial_{t}q - (m_{2}k_{2} + nm_{1})\partial_{xxt}q + (nk_{2}\partial_{x}^{4}q - (K + nl_{1})\partial_{xx}q + k_{1}l_{1}q.$$
(12)

Ezen egyenletrendszer szigorú kikötésekkel az alábbi konstitituív egyenletekre redukálható. A redukált egyenletek a dolgozat szempontjából leglényegesebb alakban, azaz hőmérsékletre rendezett formában is bemutatásra kerülnek. Fontosnak tartjuk az egyenletek bemutatása során azok megoldását is szemléltetni. A megoldások közül kitüntetett szerepet töltenek be a hátoldaliak, mivel a mérés során itt mérjük a hőmérsékletek alakulását, és erre a jelalakra történik az egyenlet illesztése. A levezetések és megkötések részletes háttere [38] irodalomban található.

- Fourier-egyenlet: A legegyszerűbb, és a mérnöki alkalmazásokban leginkább elterjedt modell; $n = m_1 = m_2 = k_2 = 0$ és $k_{12} = 0$, ezzel kapjuk:

$$l_1 q = \partial_x \frac{1}{T}.$$
(13)

A jobb oldalon lévő reciprok hőmérséklet deriválását elvégezve és l_1 -el osztva:

$$q = -\frac{1}{l_1 T^2} \partial_x T , \qquad (14)$$

ahol a Fourier-féle hővezetési együtthatóra a $\lambda = \frac{1}{l_1T^2}$ paraméter megfeleltetés elvégezhető és a továbbiakban is alkalmazható, így a konstitutív egyenlet:

$$q + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \tag{15}$$

A belső energia (1) mérlegegyenletét felhasználva kapjuk a hőmérsékletre rendezett formáját:

$$\partial_t T = \alpha \partial_{xx} T,\tag{16}$$

ahol α a hőmérsékletvezetési tényező, azaz $\alpha = \frac{\lambda}{\rho c}$.

Maxwell–Cattaneo–Vernotte-egyenlet (MCV): A modell validitása nagyon alacsony hőmérsékleten – nagyságrendileg 10 K – történő hővezetés esetén helytálló, mivel képes visszaadni a második hang jelenségét, azaz a hővezetés hullámtermészetét. Az erre vonatkozó javaslatot Gyarmati István írta meg [49]. Ha n = k₂ = m₂ = k₁₂ = 0, akkor adódik, hogy

$$m_1\partial_t q + l_1 q = \partial_x \frac{1}{T}.$$
(17)



1. ÁBRA. A Fourier-egyenlet egy jellemző megoldása [38].

Ekkor a hővezetési tényező mellett megjelenik a τ_q relaxációs idő⁶, azaz $\tau_q = \frac{m_1}{l_1}$, ezzel pedig a következő konstitutív egyenletet kapjuk:

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + q + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} = 0.$$
(18)

A hőmérsékletre rendezett formája pedig:

$$\tau_q \partial_{tt} T + \partial_t T = \alpha \partial_{xx} T. \tag{19}$$

Megfigyelhető, ha a τ_q tart nullához, akkor tartunk a Fourier-egyenlet megoldásához (16. egyenlet).



2. ÁBRA. A Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenlet egy jellemző megoldása [38].

⁶Ez a paraméter felelős a megoldás hullámjellegéért.

– **Guyer–Krumhansl-egyenlet** (GK): Érdekessége, hogy képes visszaadni a Fourieregyenlet és az MCV-egyenlet megoldásait is (és az ezekre hasonlító, de alulcsillapított esetet), valamint van a megoldásoknak egy további tartománya – túlcsillapított eset –, ahol a megoldás jellegzetes; $n = m_2 = 0$ paraméterekkel származtatható:

$$-K\partial_{xx}q + m_1k_1\partial_tq + k_1l_1q = k_1\partial_x\frac{1}{T}.$$
(20)

A hőáram második térderiváltjának együtthatójaként megjelenik egy disszipációs paraméter, azaz $\kappa^2 = \frac{K}{k_1 l_1}$, amivel

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + q + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} - \kappa^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0.$$
(21)

A GK-egyenlet hőmérsékletre rendezett formája:

$$\tau_q \partial_{tt} T + \partial_t T = \alpha \partial_{xx} T + \kappa^2 \partial_{txx} T.$$
(22)

Megfigyelhető, hogy nem csak az eredeti Fourier-egyenlet található meg benne, de annak időderiváltja is. Továbbá látható, hogy $\kappa^2 = 0$ esetén visszakapjuk az MCVegyenletet. Ha a paraméter értékét növeljük, akkor jutunk el az előbb említett túlcsillapított esethez $\tau_q > \kappa^2$. Valamint, ha $\tau_q = \kappa^2$, akkor olyan egyenlethez jutunk, amely pontosan a Fourier-egyenlet megoldását adja vissza. A GK-egyenlet megoldásának szemléltetésére a legjobb módszer az előbb említett kettő megoldással való összevetés (3. ábra). A következő fejezetben bemutatott mérések kiértékelése során ezt a típusú egyenletet használjuk.



3. ÁBRA. A Fourier, MCV- és GK-egyenletek megoldásának összehasonlítása [50].

– Ballisztikus-konduktív egyenlet: A (13) egyenletből $n = k_2 = 0$ egyszerűsítéssel kapjuk. Így az egyenletrendszer:

$$\dot{m_1 q^i} - \partial^i B^{ij} = -l_1 q^i, \tag{23}$$

$$m_2 \dot{Q}^{jk} = -k_1 Q^{jk} + k_{12} \partial^j q^k,$$
 (24)

$$B^{ij} - \frac{1}{T} \delta^{ij} = -k_{21} Q^{ij}, (25)$$

valamint a kiküszöbölések utáni egyenlet:

$$m_{2}\partial_{xt}\frac{1}{T} + k_{1}\partial_{x}\frac{1}{T} = m_{1}m_{2}\partial_{tt}q + (m_{2}l_{1} + m_{1}k_{1})\partial_{t}q - K\partial_{xx}q + k_{1}l_{1}q.$$
(26)

A konstitutív egyenletekből álló rendszer:

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + q + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \kappa \frac{\partial Q}{\partial x} = 0, \qquad (27)$$
$$\tau_Q \frac{\partial Q}{\partial t} + Q + \kappa \frac{\partial q}{\partial x} = 0,$$

ahol τ_q és τ_Q a relaxációs idők, a κ pedig a disszipációs együttható. $\tau_Q = 0$ esetében visszakapjuk az előbb bemutatott GK-egyenletet.

A kinetikus elméletből származó fononhidrodinamikai rendszerrel [51] összevetve megállapítható, hogy a *Q* belső változó a disszipatív nyomás, a hőáram árama. Az egyenlet kísérleti adatok alapján történő vizsgálata is megtörtént [52].

AZ EGYENLETEK DIMENZIÓTLAN ALAKJA

Az alábbi paramétereket az úgynevezett hőimpulzus-kísérlethez illesztve, az ott felbukkanó jellemző mennyiségeket alapul véve határoztuk meg. A mérési eljárás részleteiről a későbbi fejezetben lesz szó. Definiáljuk hát az alábbi dimenziótlan paramétereket [38]:

$$\begin{split} \xi &= \frac{x}{L}; \;\; \text{helykoordináta,} \\ \hat{\tau}_q &= \frac{\alpha \cdot \tau_q}{L^2}; \;\; \hat{\tau}_Q = \frac{\alpha \cdot \tau_Q}{L^2}; \;\; \text{relaxációs idők,} \\ \tau_\Delta &= \frac{\alpha \cdot t_p}{L^2}; \;\; \hat{Q} = \sqrt{\frac{k_{12}}{k_{21}}} \bar{q_0}Q; \;\; \text{impulzushossz és a hőáram árama,} \\ \hat{\kappa} &= \frac{\sqrt{\tilde{k_{12}}k_{21}}}{L}; \; \text{keresztcsatolási tényező.} \end{split}$$

Ezeket behelyettesítve az egyenletekbe kapjuk azok dimenziótlan alakját. Ennek előnye, hogy átláthatóbb és könnyebben kezelhető a rendszer a kevesebb anyagi paraméter miatt, könnyebb illeszteni kísérleti eredményekhez. Természetesen adott dimenziótlan paraméterekből visszanyerhető minden adat. Az eddig bemutatott egyenleteket fogjuk átírni dimenziótlan formába, viszont a jelölések könnyebb értelmezhetősége miatt maradunk annál, ahogy bevezettük ezeket az egyenleteket, vagyis az időt *t*-vel, és nem Fo-val fogjuk jelölni, hasonlóan a térkoordinátáknál, ott is az *x*-et preferáljuk. Az összes egyéb paraméter esetében elhagyjuk a kalapos jelölést. Szem előtt kell tartanunk, hogy innentől kizárólag dimenziótlan formákkal foglalkozunk.

- Ballisztikus-konduktív egyenlet:

$$\tau_{q} \frac{\partial q}{\partial t} + q + \tau_{\Delta} \frac{\partial T}{\partial x} + \kappa \frac{\partial Q}{\partial x} = 0, \qquad (28)$$

$$\tau_{Q} \frac{\partial Q}{\partial t} + Q + \kappa \frac{\partial q}{\partial x} = 0.$$

- Fourier-egyenlet: ha $\kappa = \tau_q = 0$,

$$q + \tau_{\Delta} \frac{\partial T}{\partial x} = 0.$$
⁽²⁹⁾

- Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenlet: ha $\kappa = 0$,

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + q + \tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial x} = 0.$$
(30)

- Guyer-Krumhansl-egyenlet: ha $\tau_Q = 0$,

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + q + \tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial x} - \kappa^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0.$$
(31)

- Green-Naghdi-egyenlet: speciális eset, nem követelhetjük meg, hogy q = 0 legyen, mert akkor minden tag kiesik,

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + \tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial x} - \hat{a} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0.$$
(32)

Ezen egyenletek mindegyikéhez csatolni kell a belső energia mérlegegyenletét is:

$$\tau_{\Delta} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0.$$
(33)

A továbbiakban kizárólag dimenziótlan egyenletek megoldásával foglalkozunk.

2.3. HŐTÁGULÁSSAL CSATOLT HŐVEZETÉS ÉS RUGALMASSÁG

Érdekességképp, írásunk fő sodorvonalától némiképp kitérve, ebben a szakaszban egy olyan Fourier-egyenleten túli hővezetés-egyenletet ismertetünk, ahol kezdettől fogva pontosan tudjuk a háttérjelenségeket és az érintett mennyiségek fizikai interpretációját. A "Fourier-törvénytől" (Fourier-féle hővezetési konstitúciós összefüggéstől, Fouriermodelltől) való eltérést sugalló kísérleti adatokra ugyanis számos magyarázat kínálkozik. Ezek közül az egyik legegyszerűbb, és feltétlenül megvizsgálandó lehetőség az, amikor a közeg rugalmas voltát és hőtágulását vesszük figyelembe, Fourier-hővezetés mellett. Hőtágulás nélkül a rugalmassághoz kötődő feszültség és a mechanikai eredetű alakváltozás nem csatolódik a hőmérséklet alakulásához. Hőtágulás figyelembe vételekor azonban az alakváltozásoknak egyszerre kell összhangban lenniük a hőmérséklet alakulásával és a rugalmas feszültség deformáltságfüggésével és közegmozgató hatásával. Ha a hővezetést Fourier-módon modellezzük is, a csatolt egyenletrendszer a kinematikai és mechanikai mennyiségek kiküszöbölésével a hőmérsékletre egy olyan egyenletet eredményez várhatóan, amely a Fourier-egyenlethez képest magasabbrendű idő- és térderiváltakat tartalmaz. Egy ilyen egyenlet látszólagos nem-Fourier-hővezetést valósít meg. Szükséges - és talán hasznos – lenne tehát ennek az egyenletnek a levezetése. Az itt következő pár oldal ezt a levezetést ismerteti.

2.3.1. AZ ALAPEGYENLETEK

Mindenből válasszuk a lehető legegyszerűbbet: kis alakváltozás, Hooke-rugalmas homogén és izotrop közeg, konstans hőtágulási együttható, egy inerciarendszerhez képest lényegében nyugvó közeg. A szilárdközeg-kinematikai, -mechanikai és -termodinamikai mennyiségek és a köztük fennálló kapcsolatok a [39, 40, 41, 42] megközelítés szerint lesznek tekintve, kisdeformáltsági-alakváltozási közelítésben – minden hiányzónak tűnő részletért ld. az idézett műveket.

A Hooke-rugalmas homogén és izotrop közegmodell bármely **r** helyen a σ feszültségtenzor és a **D** rugalmas deformáltságtenzor között a

$$\boldsymbol{\sigma}^{d} = E^{d} \mathbf{D}^{d}, \quad \boldsymbol{\sigma}^{s} = E^{s} \mathbf{D}^{s}, \qquad E^{d} = 2G, \quad E^{s} = 3K, \tag{34}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = E^{\mathrm{d}} \mathbf{D}^{\mathrm{d}} + E^{\mathrm{s}} \mathbf{D}^{\mathrm{s}} = E^{\mathrm{d}} \mathbf{D} + (E^{\mathrm{s}} - E^{\mathrm{d}}) \mathbf{D}^{\mathrm{s}}$$
(35)

konstitúciós összefüggést jelenti, ahol ^d és ^s a tenzorok deviatorikus (nyom nélküli) és gömbi (az **1** egységtenzorral arányos) részét jelölik:

$$\mathbf{D}^{s} = \frac{1}{3} (\operatorname{tr} \mathbf{D}) \mathbf{1}, \quad \mathbf{D}^{d} = \mathbf{D} - \mathbf{D}^{s}; \qquad \text{igy pl.} \quad \mathbf{1}^{s} = \mathbf{1}, \quad \mathbf{1}^{d} = \mathbf{0}.$$
(36)

A feszültség okozza a közeg v sebességmezejének időbeli változási gyorsaságát (időderiváltját), a kis alakváltozásban állandónak vett ρ sűrűséggel felírt

$$\varrho \dot{\mathbf{v}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \overleftarrow{\nabla} \tag{37}$$

egyenlet szerint. Az L sebességgradiensre és szimmetrikus részére

$$\mathbf{L} = \mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla}, \qquad \operatorname{tr} \mathbf{L}^{\operatorname{sym}} = \operatorname{tr} \mathbf{L} = \mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla}, \qquad (\mathbf{L}^{\operatorname{sym}})^{\operatorname{s}} = \frac{1}{3} (\operatorname{tr} \mathbf{L}^{\operatorname{sym}}) \mathbf{1} = \frac{1}{3} \mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla}, \qquad (38)$$

$$\left(\mathbf{L}^{\text{sym}}\cdot\stackrel{\leftarrow}{\nabla}\right)\cdot\stackrel{\leftarrow}{\nabla} = \frac{1}{2}\partial_i\partial_j(\partial_i v_j + \partial_j v_i) = \frac{1}{2}\left[\triangle\left(\stackrel{\rightarrow}{\nabla}\cdot\mathbf{v}\right) + \triangle\left(\stackrel{\rightarrow}{\nabla}\cdot\mathbf{v}\right)\right] = \triangle\left(\mathbf{v}\cdot\stackrel{\leftarrow}{\nabla}\right), \quad (39)$$

$$\left(\mathbf{L}\cdot\overleftarrow{\nabla}\right)\cdot\overleftarrow{\nabla} = \bigtriangleup\left(\mathbf{v}\cdot\overleftarrow{\nabla}\right) \tag{40}$$

adódnak, az Einstein-féle indexöszegzéses indexes írásmódot is alkalmazva. Ugyanezzel az írásmóddal és a Kronecker-delta jelöléssel egy f skalármezőre

$$\partial_j (f \delta_{ij}) = \delta_{ij} \partial_j f = \partial_i f, \qquad (f \mathbf{1}) \cdot \overleftarrow{\nabla} = \overrightarrow{\nabla} f \tag{41}$$

kapható, melyet szintén fel fogunk használni.

A kinematikai mennyiségek közötti összefüggés, a konstansnak tekintett α lineáris hőtágulási együtthatóval és a T abszolút hőmérséklettel

$$\mathbf{L}^{\text{sym}} = \dot{\mathbf{D}} + \alpha \dot{T} \mathbf{1} \,. \tag{42}$$

A *e* fajlagos belső energiára vonatkozó belsőenergia-mérleg a rugalmas e_{el} járulék és a hozzá tartozó rugalmas mechanikai teljesítmény levonása után

$$\varrho \left(e - e_{\rm el} \right)^{\bullet} = \varrho c \dot{T} + E^{\rm s} \alpha T_0 \operatorname{tr} \dot{\mathbf{D}}^{\rm s} = -\mathbf{j}_e \cdot \overleftarrow{\nabla}, \qquad \mathbf{j}_e = -\lambda \overrightarrow{\nabla} T, \qquad (43)$$

ahol c az állandó, nulla feszültséghez tartozó fajhő, egy kezdeti, homogénnek feltételezett T_0 hőmérsékletértékkel helyettesítettük T-t a lineáris (kisalakváltozásos) közelítés érdekében, a \mathbf{j}_e hőáramsűrűségre pedig a konstans λ hővezetési tényezővel vett Fourier-féle konstitúciós összefüggést tekintjük.

2.3.2. A levezetés

A stratégia a következő lesz: σ -t kiküszöböljük **D** "rovására" (segítségével), **D**-t L^{sym} rovására, és örömmel vesszük észre, hogy mind mechanikai, mind termikus irányból $\mathbf{v} \cdot \stackrel{\leftarrow}{\nabla}$ és T között kapunk egyenletet, így $\mathbf{v} \cdot \stackrel{\leftarrow}{\nabla}$ kiküszöbölésével egy csakis T-re vonatkozó összefüggés adódik.

A termikus oldallal kezdve:

$$\varrho c \dot{T} + E^{s} \alpha T_{0} \operatorname{tr} (\mathbf{L}^{\operatorname{sym}} - \alpha \dot{T} \mathbf{1}) = \varrho c \dot{T} + E^{s} \alpha T_{0} \left(\mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) - E^{s} \alpha^{2} T_{0} \dot{T} \cdot 3 = \\
= \left(\underbrace{\varrho c - 3E^{s} \alpha^{2} T_{0}}_{\gamma_{0}} \right) \dot{T} + E^{s} \alpha T_{0} \left(\mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right), \\
= -\mathbf{j}_{e} \cdot \overleftarrow{\nabla} = -\left(-\lambda \overrightarrow{\nabla} T \right) \cdot \overleftarrow{\nabla} = \lambda \Delta T \implies \\
E^{s} \alpha T_{0} \left(\mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) = \lambda \Delta T - \gamma_{0} \dot{T}.$$
(44)

Mechanikai oldalról pedig, a (44) alakkal összhangra törekedve:

$$\begin{split} E^{s} \alpha T_{0} \left(\dot{\mathbf{v}} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) &= E^{s} \alpha T_{0} \frac{1}{\varrho} \left(\dot{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) \cdot \overleftarrow{\nabla} = \\ &= \frac{E^{s} \alpha T_{0}}{\varrho} \left\{ \left[E^{d} \dot{\mathbf{D}} + \left(E^{s} - E^{d} \right) \dot{\mathbf{D}}^{s} \right] \cdot \overleftarrow{\nabla} \right\} \cdot \overleftarrow{\nabla} = \\ &= \frac{E^{s} \alpha T_{0}}{\varrho} \left\{ \left[E^{d} \left(\mathbf{L}^{\text{sym}} - \alpha \dot{T} \mathbf{1} \right) + \right. \\ &+ \left(E^{s} - E^{d} \right) \left(\mathbf{L}^{\text{sym}} - \alpha \dot{T} \mathbf{1} \right)^{s} \right] \cdot \overleftarrow{\nabla} \right\} \cdot \overleftarrow{\nabla} = \\ &= \frac{E^{s} \alpha T_{0}}{\varrho} \left\{ \left[E^{d} \mathbf{L}^{\text{sym}} - E^{d} \alpha \dot{T} \mathbf{1} + \left(E^{s} - E^{d} \right) \frac{1}{3} \left(\mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) \mathbf{1} - \right. \\ &- \left(E^{s} - E^{d} \right) \alpha \dot{T} \mathbf{1} \right] \cdot \overleftarrow{\nabla} \right\} \cdot \overleftarrow{\nabla} = \\ &= \frac{E^{s} \alpha T_{0}}{\varrho} \left[E^{d} \Delta \left(\mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) + \frac{E^{s} - E^{d}}{3} \Delta \left(\mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) - E^{s} \alpha \Delta \dot{T} \right] = \\ &= \frac{E^{s} \alpha T_{0}}{\varrho} \left[\frac{E^{s} + 2E^{d}}{3} \Delta \left(\mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) - E^{s} \alpha \Delta \dot{T} \right] = \\ &= \frac{E^{s} + 2E^{d}}{3\varrho} \Delta \left[E^{s} \alpha T_{0} \left(\mathbf{v} \cdot \overleftarrow{\nabla} \right) \right] - \frac{(E^{s} \alpha)^{2} T_{0}}{\varrho} \Delta \dot{T} = \\ &= \frac{E^{s} + 2E^{d}}{3\varrho} \Delta \left(\lambda \Delta T - \gamma_{0} \dot{T} \right) - \frac{(E^{s} \alpha)^{2} T_{0}}{\varrho} \Delta \dot{T}, \quad \text{másrészt} \\ &= \left(\lambda \Delta T - \gamma_{0} \dot{T} \right) \overset{\cdot}{=} \lambda \Delta \ddot{T} - \gamma_{0} \dddot{T} \quad [\text{Id. (44)}] \end{aligned}$$

(ahol c_{\parallel} a longitudinális rugalmas hullámsebesség); azaz, két különböző alakban is összegezve:

$$\left(\gamma_0 \dot{T} - \lambda \triangle T\right)^{"} = c_{\mathbb{I}}^2 \triangle \left(\underline{\gamma_0} \dot{T} - \lambda \triangle T\right) + \frac{(E^* \alpha)^2 T_0}{\varrho} \triangle \dot{T}, \qquad (46)$$

$$\gamma_0 \left(\ddot{T} - \underline{c_{\parallel}^2} \triangle T \right)^{\bullet} = \lambda \triangle \gamma_0 \left(\ddot{T} - c_{\parallel}^2 \triangle T \right) + \frac{(E^* \alpha)^2 T_0}{\varrho} \triangle \dot{T} \,. \tag{47}$$

Az első alak szerint egy hővezetési egyenlet hullámegyenletét látjuk, csak az utolsó tag elhangolja az egyik hővezetési egyenletet a másikhoz képest; a második alak szerint egy

hullámegyenlet hővezetési egyenletét látjuk, csak az utolsó tag elhangolja az egyik hullámegyenletet a másikhoz képest; mindkét egyenletben aláhúzás jelöli az elhangolódó együtthatót (ha beolvasztanánk az utolsó tagot).

Megjegyzendő, hogy a kinematikai és mechanikai mennyiségekre vonatkozó kezdeti és peremfeltételek a hőmérsékletre is kezdeti és peremfeltételeket örökítenek át ehhez az egyenlethez. Ezeket konkrét alkalmazásokban, a konkrét kezdeti és peremfeltételek ismeretében érdemes származtatni – konkrét alkalmazások vizsgálata a jövő feladata lesz.

3. NUMERIKUS MEGOLDÁSI MÓDSZEREK

3.1. BEVEZETÉS

Visszatérve a fősodorhoz, a korábbiakból tehát jól ismerjük az általánosított egyenletek szerkezetét, és azok hátterét. Fontos kiemelni, hogy ezek parciális differenciálegyenletek, melyek megoldása – akár analitikus, akár numerikus –, lényegesen körülményesebb, mint a közönséges differenciálegyenletek esetén.

A származtatott egyenletek típusát tekintve parabolikus és hiperbolikus egyenletekkel van dolgunk. A kettő közötti alapvető különbség, hogy az egyenlet által leírt jelterjedési sebesség – tisztán matematikai oldalról – vagy véges, vagy végtelen. A parabolikus egyenletek karakterisztikus tulajdonsága a végtelen jelterjedési sebesség, azonban ezzel együtt a megoldásaik is "simábbak"⁷, könnyítve a numerikus megoldások számítását. A hiperbolikus egyenletek pedig ezzel ellentétesen viselkednek, olyan rendszereket írnak le, amelyekhez véges jelterjedési sebesség párosul. Ez fizikai szempontból lényegesen elfogadhatóbb, azonban a numerikus megoldásaik is nehezebbek, mivel itt kialakulhatnak ugrások, hirtelen változások, nagy deriváltakkal együtt.

Kevésbé szokott hangsúlyos szempont lenni a peremfeltételek numerikus módszerhez való illesztése, illetve fordítva: a numerikus módszer peremfeltételhez való illesztése. Az alábbiakban egyaránt mutatunk explicit és implicit eljárásokat is az általánosított hővezetési egyenletek megoldására. Ezekben a diszkretizáció a közös pont: egymáshoz képest térben eltolt mezőket hozunk létre, és a parciális differenciálegyenleteket rendszerként oldjuk meg. Mindkét esetben véges differenciákon alapulnak a sémák.

A témához az is hozzátartozik, hogy a kidolgozott sémák pontosságát megbecsüljük, azok konvergenciáját bizonyítjuk. Emiatt kulcsfontosságú a sémák stabilitási kritériumainak meghatározása is. Az alábbiakban tehát nem csak a sémát írjuk fel, hanem annak vizsgálatát is elvégezzük.

⁷ A megfogalmazás matematikailag pongyola, de fizikailag kifejező: szakadásos-ugrásos megoldást is kisimít, és szakadást nem is alakít ki sima megoldásból.



- 4. ÁBRA. Diszkretizálási eljárás.
 - 3.2. AZ EXPLICIT MÓDSZER

Az egyenletek megoldásához a végesdifferencia-módszert használtuk. Ennek vannak előnyei és hátrányai is:

- Könnyű a diszkretizálás, jól követhető a séma pontossága, peremfeltételtől függetlenül használható, egyszerű leprogramozni.
- Mesterséges numerikus jelenségek, oszcillációk és fázishiba lehetősége merül fel.
 A hirtelen változó megoldásokat körülményes kezelni.

Célunk volt egy könnyen kezelhető explicit sémát írni, mely hasonló szerkezetű egyenletrendszerekre könnyen kiterjeszthető. Mivel a vizsgált hővezetési modellek rendre hasonló struktúrával bírnak, így ez egy fontos szempont, viszont a stabilitás vizsgálata elengedhetetlen. A séma konzisztenciájának a vizsgálatára is szükség van, melynek igazolásával a Lax–Richtmyer-tétel⁸ [1] alapján a séma konvergenciája⁹ is biztosítottá válik. A konzisztenciavizsgálattal együtt a séma hibájára is becslést tudunk majd adni.

3.2.1. DISZKRETIZÁLÁS

A sémánk sajátossága, hogy egymáshoz képest eltolt mezőket alkalmaz, melyet a 4. ábra is szemléltet.

Míg az egyik mező a minta teljes tértartományát lefedi (a fenti, szélesebb), addig a másik $\frac{\Delta x}{2}$ -vel el van tolva. Képzeljük el magunk előtt, hogy a mintát kis darabokra

⁸ Másnéven Lax ekvivalenciatétele.

⁹ Liu [2] is felhívja rá a figyelmet, hogy a különböző diszkretizációs eljárásoknak eltérő a pontossága, konvergenciájának sebessége és a rendszerre jellemző fázissebessége, melynek vizsgálata kevéssé terjedt el.

bontjuk, kontinuumok kölcsönhatását számoljuk. Ezzel a fajta diszkretizálással megkülönböztetünk felület jellegű és térfogat jellegű mennyiségeket, azaz ami a teljes tartományt lefedi, ott a cellák határaira írjuk fel az egyenleteket, az eltolt mező esetén pedig a cellák középpontjára, mint egyfajta átlagként kezelve az adott cellára vonatkozólag. További tulajdonsága, hogy így a térfogati mennyiségekre nem szükséges peremfeltételeket definiálnunk. Ezzel a megfontolással tehát elegendő lesz számunkra a hőáram, mint peremfeltétel, a többi mennyiséget eltoltnak tekintjük. Ez a választás viszont önkényes, ha hőmérsékletet szeretnénk definiálni a peremen, akkor a többi mennyiséget fogjuk eltolni. Vegyes peremfeltétel esetén viszont megfontolandó a választás.

A belső energia mérlegegyenlete minden modellhez szükséges és egységes, ennek diszkretizált formája a hőmérsékletre rendezve:

$$T_{j}^{n+1} = T_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\tau_{\Delta} \Delta x} (q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n}).$$
(48)

Nézzük most modellenként a konstitutív egyenleteket:

- Fourier-egyenlet:

$$q_j^{n+1} = -\frac{\tau_{\Delta}}{\Delta x} (T_j^n - T_{j-1}^n).$$
(49)

- Guyer-Krumhansl-egyenlet:

$$q_{j}^{n+1} = q_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\tau_{q}} q_{j}^{n} - \frac{\tau_{\Delta} \Delta t}{\tau_{q} \Delta x} (T_{j}^{n} - T_{j-1}^{n}) + \frac{\kappa^{2} \Delta t}{\tau_{q} \Delta x^{2}} (q_{j+1}^{n} - 2q_{j}^{n} + q_{j-1}^{n}).$$
(50)

Ebből a Maxwell–Cattaneo–Vernotte modell visszakapható a $\kappa^2 = 0$ paraméter mellett.

- Green-Naghdi-egyenlet:

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\tau_\Delta \Delta t}{\tau_q \Delta x} (T_j^n - T_{j-1}^n) + \frac{\kappa^2 \Delta t}{\tau_q \Delta x^2} (q_{j+1}^n - 2q_j^n + q_{j-1}^n).$$
(51)

- Ballisztikus-konduktív egyenlet:

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\tau_q} q_j^n - \frac{\tau_\Delta \Delta t}{\tau_q \Delta x} (T_j^n - T_{j-1}^n) - \frac{\kappa \Delta t}{\tau_q \Delta x} (Q_j^n - Q_{j-1}^n), \tag{52}$$

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - \frac{\Delta t}{\tau_Q} Q_j^n - \frac{\kappa \Delta t}{\tau_Q \Delta x} (q_{j+1}^n - q_j^n).$$
(53)

A ballisztikus-konduktív modellben nemcsak a hőmérséklet, de a hőáram árama is eltolt mennyiség a diszkretizáció szempontjából. A séma roppant egyszerű, időben előrelépő, térben pedig bal vagy jobb oldali. Ez persze csak a séma szempontjából igaz, fizikailag a diszkretizáció miatt centrális. A sémánk fő hátránya a pontossága, mivel a közelítés mindenhol elsőrendű; de előnye a roppant egyszerű felépítése és kis számításigénye.

3.2.2. KONZISZTENCIA

Egy numerikus séma konzisztens, hogy ha $\Delta x, \Delta t$ tart a nullához, úgy a numerikus megoldás is tart a pontos megoldáshoz. Ennek bizonyításához nem kell mást tenni, mint a séma egyes elemeit Taylor-sorba fejteni, majd visszahelyettesíteni a sémába. Ezzel megkapjuk az egyes hőfizikai mennyiségekre ható numerikus ("diszkrét") operátort. Ezt kivonva az eredeti egyenlet folytonos értékkészletű operátorából nullát kell kapjunk.

Nézzük először a belső energia mérlegegyenletét; írjuk fel az eredeti egyenletet és a sémát az alábbi formákban:

$$\tau_{\Delta}\partial_t T + \partial_x q = 0,$$

$$P_1 = \tau_{\Delta}\frac{\partial}{\partial t}; \qquad P_2 = \frac{\partial}{\partial x},$$
(54)

ahol P_1 és P_2 a hőmérséklet és a hőáram operátorai; diszkretizálva pedig:

$$\tau_{\Delta} \frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} + \frac{q_{j+1}^n - q_j^n}{\Delta x} = 0.$$
 (55)

Fejtsük sorba a T_j^{n+1} és q_{j+1}^n tagokat az alábbi módon:

$$T_j^{n+1} = T_j^n + \Delta t \partial_t T + \frac{\Delta t^2}{2} \partial_{tt} T + O(\Delta t^3),$$
(56)

$$q_{j+1}^{n} = q_{j}^{n} + \Delta x \partial_{x} q + \frac{\Delta x^{2}}{2} \partial_{xx} q + O\left(\Delta x^{3}\right),$$
(57)

majd helyettesítsük az (55) egyenletbe:

$$\tau_{\Delta} \left[\partial_t T + \frac{1}{2} \Delta t \partial_{tt} T + O\left(\Delta t^2\right) \right] + \left[\partial_x q + \frac{1}{2} \Delta x \partial_{xx} q + O\left(\Delta x^2\right) \right] = P_{1_{\Delta t, \Delta x}} T + P_{2_{\Delta t, \Delta x}} q,$$
(58)

ahol $P_{1_{\Delta t,\Delta x}}$ és $P_{2_{\Delta t,\Delta x}}$ diszkrét operátorok. Ezután tartassuk nullához a differenciatagokat, majd vonjuk ki az eredeti egyenletből; az eredmény nulla. A séma a léptékek csökkentésével a valós megoldáshoz tart. A séma konzisztencia rendje 1, így a konvergencia rendje is 1.

Az összes modell közül csak a GK-esetre fejtjük ki a levezetést, mivel egyrészt a szerkezete megegyezik az összes többivel, illetve egyértelműen lehet belőle származtatni is a Fourier- és MCV-modelleket, valamint a GN-egyenlettel is nagy hasonlóságot mutat. Másrészt a ballisztikus modell esetén a diszkretizálás szerkezete teljesen megegyező, ugyanolyan konzisztencia- és konvergenciarend jellemző az összes sémára. Ebben az esetben az alábbi tagok sorfejtésére van szükség:

$$T_{j-1}^{n} = T_{j}^{n} - \Delta x \partial_{x} T + \frac{1}{2} \Delta x^{2} \partial_{xx} T - O(\Delta x^{3}),$$
(59)

$$q_{j-1}^{n} = q_{j}^{n} - \Delta x \partial_{x} q + \frac{\Delta x^{2}}{2} \partial_{xx} q - \frac{\Delta x^{3}}{6} \partial_{x}^{3} q + \frac{\Delta x^{4}}{24} \partial_{x}^{4} q - O(\Delta x^{5}), \qquad (60)$$

$$q_{j+1}^{n} = q_{j}^{n} + \Delta x \partial_{x} q + \frac{\Delta x^{2}}{2} \partial_{xx} q + \frac{\Delta x^{3}}{6} \partial_{x}^{3} q + \frac{\Delta x^{4}}{24} \partial_{x}^{4} q + O(\Delta x^{5}), \qquad (61)$$

$$q_j^{n+1} = q_j^n + \Delta t \partial_t q + \frac{1}{2} \Delta t^2 \partial_{tt} q + O(\Delta t^3).$$
(62)

A hőáram két tagját magasabb rendig kellett sorbafejteni a sémában szereplő másodrendű derivált miatt. Visszahelyettesítve (50) egyenletbe:

$$\tau_{q} \left(\partial_{t}q + \frac{1}{2} \Delta t \partial_{tt}q + O(\Delta t^{2}) \right) + q_{j}^{n} + \tau_{\Delta} \left(\partial_{x}T - \frac{1}{2} \Delta x \partial_{xx}T - O(\Delta x^{2}) \right) - \kappa^{2} \left(\partial_{xx}q + \frac{1}{12} \Delta x^{2} \partial_{x}^{4}q + O(\Delta x^{4}) \right).$$
(63)

Ebből látható, hogy a másodrendű centrális derivált másodrendben pontos, de a séma legalacsonyabb rendje számít, így ennek is 1 a konzisztencia rendje.

Néhány fontos megjegyzés a konzisztenciával kapcsolatban:

- Az előbbiekben bemutatott levezetés a sémánk gyenge ("w-consistent") konzisztenciát bizonyítja. Konvencionális értelemben ezt szokták egy séma konzisztenciája alatt érteni. Ez viszont azzal jár, hogy a differenciaegyenleteink nem biztos, hogy örökölnek minden tulajdonságot, ami a differenciálegyenletekre vonatkozik [3]. Az erős konzisztencia ("s-consistent") bizonyítása lényegesen körülményesebb. Számunkra jelenleg a gyenge konzisztencia is elegendő.
- A már említett Lax–Richtmyer- ekvivalenciaelv pontosabb megfogalmazása: egy kezdetiérték problémára vonatkozó lineáris parciális differenciálegyenlet vele konzisztens véges differenciákkal való közelítése konvergens, ha a séma stabil. A kezdetiérték probléma korrekt kitűzöttségű kell legyen, azaz
 - 1. létezik megoldás,
 - 2. ez a megoldás egyértelmű,
 - 3. a megoldás folytonosan függjön a kezdeti és peremfeltételektől,

ahol az első két pont, a megoldás létezése és unicitása magában foglalja a peremfeltételek ellenőrzését is.

Azaz a konvergencia biztosításához a sémánk stabilitását még bizonyítani kell. Szimmetrikus hiperbolikus rendszerekre könnyen tudunk korrekt kitűzöttségű problémát megadni [4]. Ennek további vizsgálatát, a szükséges tételek bizonyítását és pontosabb matematikai megfogalmazását [5] részletezi.

3.2.3. STABILITÁSVIZSGÁLAT

A numerikus séma akkor marad stabil, ha a közelítés hibája véges marad. Ennek ellenőrzésére a Neumann- és Jury-módszereket alkalmazzuk. Először nézzük a Neumannféle eljárást közelebbről. Tételezzük fel az egyenleteink megoldását az alábbi formában:

$$\phi_j^n = \xi^n e^{ikj\Delta x},\tag{64}$$

ahol *i* a képzetes egység, *k* a hullámszám, $j\Delta x$ a *j*-edik térlépés, *n* pedig az időlépés indexe. A séma stabil, ha a ξ növekményi faktorra igaz, hogy $|\xi| \leq 1$. Ha $|\xi| = 1$, akkor a sémát konzervatívnak nevezzük. Helyettesítsünk vissza a sémákba, kezdjük a belső energia mérlegegyenletével:

$$-T_{j}^{n+1} + T_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\tau_{\Delta} \Delta x} (q_{j+1}^{n} - q_{j}^{n}) = 0,$$
(65)

$$(\xi - 1)T_0 + \frac{\Delta t}{\tau_\Delta \Delta x} \left(e^{ik\Delta x} - 1 \right) q_0 = 0.$$
(66)

Mivel két mennyiséggel, a hőmérséklettel és a hőárammal dolgozunk, ezért egy lineáris algebrai egyenletrendszerre fogunk jutni. A legegyszerűbbel, a Fourier-egyenlettel kezd-jük,

$$\xi q_0 + \frac{\tau_\Delta}{\Delta x} \left(1 - e^{-ik\Delta x} \right) T_0 = 0.$$
(67)

Így a rendszer az alábbi formát ölti:

$$\begin{pmatrix} \xi - 1 & \frac{\Delta t}{\tau_{\Delta} \Delta x} \left(e^{ik\Delta x} - 1 \right) \\ \frac{\tau_{\Delta}}{\Delta x} \left(1 - e^{-ik\Delta x} \right) & \xi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_0 \\ q_0 \end{pmatrix} = 0.$$

A rendszernek akkor van triviálistól különböző megoldása, amikor az együttható mátrix determinánsa zérus. Az egyszerűsítések során felhasználjuk, hogy $e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x} = 2\cos(k\Delta x) - 2$. Ezáltal a rendszer $F(\xi)$ karakterisztikus polinomja a következő:

$$F(\xi) = \xi^2 - \xi - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (2\cos(k\Delta x) - 2) = 0.$$
 (68)

Fontos észrevétel, hogy a polinomot úgy kell rendezni, hogy a legmagasabb fokú tag együtthatója pozitív legyen. A hővezetési modellek vizsgálatakor, amíg a rendszer másodrendű marad, nem okoz gondot. Egyedül a ballisztikus modell harmadrendű, ott ezt feltétlenül figyelembe kell venni, mivel a Jury-kritériumok alkalmazásakor relációt változtat. Továbbá megjegyzendő, hogy a Jury-kritériumok diszkrét rendszerek vizsgálatára alkalmasak, míg a közismertebb Routh-Hurwitz kritériumok folytonos rendszerekre, illetve bilinieáris transzformációval diszkrét rendszerre is alkalmazhatók [6]. A stabilitási kritériumok szerepe, hogy a karakterisztikus polinom együtthatóiból következtethetünk a gyökeire. Amíg a gyökök a komplex számsíkon elhelyezkedő egységkörön belül vannak,
addig a differenciaegyenlet egyensúlya aszimptotikusan stabil. Általános szabály, hogy n-ed rendű polinomhoz n + 1 számú feltétel tartozik.

Most nézzük az általános Jury-feltételeket:

- 1. $F(\xi = 1) \ge 0$,
- 2. $F(\xi=-1)\geq 0,$ ha npáros és $F(\xi=-1)\leq 0,$ ha npáratlan,
- 3. $|a_0| \le a_n$, azaz ha a legmagasabb fokú tag együtthatója 1, úgy a triviális megoldás esetén is biztosítja, hogy a konstans nulladrendű tag ne legyen nagyobb egynél.

Ha ezek a feltételek teljesülnek, akkor a séma stabil, és a növekményi faktorra igaz lesz, hogy $|\xi| \leq 1$. A továbbiakban csak a karakterisztikus polinomot írjuk fel, és a kritérium számára utalunk.

- Fourier-egyenlet: a polinomot már levezettük, nézzük a kritériumokat:
 - 1. $\frac{4\Delta t}{\Delta x^2} > 0$; ez minden esetben teljesül.
 - 2. $1 + \frac{2\Delta t}{\Delta r^2} > 0$; szintén minden paraméter kielégíti.
 - 3. $\Delta t < \frac{\Delta x^2}{4}$; a harmadik Jury-kritérium feltételt szab az időlépésre nézve.
- **Guyer-Krumhansl-egyenlet**: tekintsük a polinomot az $a_2\xi^2 + a_1\xi + a_0 = 0$ alakban, ahol

$$a_{2} = 1,$$

$$a_{1} = \frac{\Delta t}{\tau_{q}} - 2 - \frac{\kappa^{2} \Delta t}{\tau_{q} \Delta x^{2}} \left(2\cos(k\Delta x) - 2 \right),$$

$$a_{0} = 1 - \frac{\Delta t}{\tau_{q}} + \frac{\kappa^{2} \Delta t}{\tau_{q} \Delta x^{2}} \left(2\cos(k\Delta x) - 2 \right) - \frac{\Delta t^{2}}{\tau_{q} \Delta x^{2}} \left(2\cos(k\Delta x) - 2 \right).$$

A $cos(k\Delta x) = -1$ érték jelenti a szélsőértéket, minden esetben ezt vesszük alapul. Ezt figyelembe véve a kritériumokra azt kapjuk, hogy:

- 1. $\frac{4\Delta t^2}{\tau_a \Delta x^2} > 0;$
- 2. $\frac{\Delta x^2}{4} \left(\frac{2\tau_q}{\Delta t} 1 \right) + \frac{\Delta t}{2} > \kappa^2$.
- 3. Az abszolútérték miatt két feltételt kapunk; $\Delta t \frac{\Delta x^2}{4} < \kappa^2$.
 - A másik kritérium pedig $\frac{\Delta x^2}{4} \left(\frac{2\tau_q}{\Delta t} 1\right) + \Delta t > \kappa^2$, mely gyengébb, mint a 2. pontban leírt, mivel $\frac{\Delta t}{2} < \Delta t$.

Az MCV-egyenletre vonatkozó feltételt $\kappa^2 = 0$ mellett kapjuk meg.

– **Green–Naghdi-egyenlet**: a konstitutív egyenletből a GK-esethez képest hiányzik a hőáram nulladrendű deriváltja, így nem meglepő, hogy a $\frac{\Delta t}{\tau_q}$ paraméter fog hiányozni a polinom együtthatóiból, azaz:

$$a_{2} = 1,$$

$$a_{1} = -2 - \frac{\kappa^{2} \Delta t}{\tau_{q} \Delta x^{2}} \left(2\cos(k\Delta x) - 2 \right),$$

$$a_{0} = 1 + \frac{\kappa^{2} \Delta t}{\tau_{q} \Delta x^{2}} \left(2\cos(k\Delta x) - 2 \right) - \frac{\Delta t^{2}}{\tau_{q} \Delta x^{2}} \left(2\cos(k\Delta x) - 2 \right).$$

Így a stabilitás feltételei:

- 1. $\frac{4\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2} > 0$; vagyis ez egyezik a GK-esettel. 2. $\frac{\tau_q \Delta x^2}{2\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} > \kappa^2$.
- 3. Az abszolút érték miatt most is két feltételt kapunk; $\Delta t < \kappa^2$ feltétel kizárja a $\kappa^2 = 0$ esetet, ami összhangban áll a termodinamikai feltételekkel is. A másik kritérium pedig $\frac{\tau_q \Delta x^2}{2\Delta t} + \Delta t > \kappa^2$; most is ez a gyengébb, mivel $\Delta t > \frac{\Delta t}{2}$.
- Ballisztikus-konduktív egyenlet: a rendszer 3 egyenletből áll, így a polinom is harmadfokú, együtthatói a következők:

$$\begin{aligned} a_3 &= 1, \\ a_2 &= \frac{\Delta t}{\tau_q} + \frac{\Delta t}{\tau_Q} - 3, \\ a_1 &= \frac{\Delta t^2}{\tau_q \tau_Q} + 3 - \frac{2\Delta t}{\tau_q} - \frac{2\Delta t}{\tau_Q} - \left(\frac{\kappa^2 \Delta t^2}{\tau_q \tau_Q \Delta x^2} + \frac{\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2}\right) \left(2\cos(k\Delta x) - 2\right), \\ a_0 &= \frac{\Delta t}{\tau_q} + \frac{\Delta t}{\tau_Q} - \frac{\Delta t^2}{\tau_Q \tau_q} - 1 + \left[\frac{\kappa^2 \Delta t^2}{\tau_q \tau_Q \Delta x^2} - \frac{\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2} \left(\frac{\Delta t}{\tau_Q} - 1\right)\right] \left[2\cos(k\Delta x) - 2\right]. \end{aligned}$$

Az eddig szokásos követelményeken kívül szükség van még egy negyedik követelményre is, mégpedig:

$$|b_0| > |b_2|$$
, ahol $b_0 = \begin{vmatrix} a_0 & a_3 \\ a_3 & a_0 \end{vmatrix}$ és $b_2 = \begin{vmatrix} a_0 & a_1 \\ a_3 & a_2 \end{vmatrix}$

Jól láthatóan nagyon gyorsan elbonyolódnak a kritériumok, ennél az esetnél a numerikus kiértékelés javallott. Az első 3 kritériumot még le lehet vezetni analitikusan, de a formulák nem olyan átláthatóak, ahogy eddig, nem szolgáltatnak többlet információt, ezért ezek közlésétől eltekintünk.

Ezzel a stabilitásvizsgálat végére értünk, a sémák konvergenciája biztosított.

3.3. AZ IMPLICIT MÓDSZER

Az explicit esethez hasonlóan az eltolt mezős diszkretizációt használjuk itt is, azonban a sémát némileg eltérő módon építjük fel. Ezt 2 részletben szemléltetjük.

3.3.1. Implicit módszer: I. rész

Az alábbiakban egy olyan diszkretizálást és stabilitás vizsgálati eljárást tárgyalunk, amelyek analóg módon csatlakoznak az eddigekhez, viszont rávilágítanak bizonyos aspektusokra, melyeket eddig nem részleteztünk ki. Tekintsük újra a Fourier-egyenletet, de most a hőmérsékletre rendezett dimenziós formáját, 1 térdimenzióban, elsőfajú peremfeltétellel:

$$\partial_t T = a \partial_{xx} T, \qquad T(x = 0, t) = T_0, \qquad T(x = L, t) = T_N.$$
(69)

Az L pontbeli hőmérséklethez nem véletlenül tartozik N index, ez a numerikus eljárásnál jelölésbeli könnyebbséget fog jelenteni, ugyanis egy mátrix méretét általában $N \times N$ -el jelölik. A kezdeti feltétel legyen homogén módon zérus a teljes tartományon, valamint a jelöli a hőfokvezetési tényezőt. Implicit módszer eléréséhez diszkretizáljunk az alábbiak szerint:

$$T_i^{n+1} - T_i^n = \frac{a\Delta t}{\Delta x^2} \left(T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1} \right).$$
(70)

Vegyük észre, hogy a térderivált közelítése is az új n + 1 időpontbeli értékek alapján történik! Ezt átrendezve T_i^n -re és az $\alpha := \frac{a\Delta t}{\Delta x^2}$ jelölést bevezetve:

$$T_i^n = -\alpha T_{i-1}^{n+1} + (1+2\alpha)T_i^{n+1} - \alpha T_{i+1}^{n+1},$$
(71)

amit mátrixos jelölésmódban úgy írhatunk, hogy

$$(T^{n})_{0\dots N} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & \dots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}_{(0\dots N)\times(0\dots N)} (T^{n+1})_{0\dots N}$$
(72)

ahol az első és utolsó sorok 1 elemei a peremfeltételek megőrzését jelentik, a többi, tridiagonális elemsorozat pedig a másodrendű deriváltat képezi le. Nevezzük el ezt az együtthatómátrixot M-nek, így írhatjuk, hogy

$$M^{-1}(T^n)_{0\dots N} = (T^{n+1})_{0\dots N}$$
(73)

A dolgunk tehát annyi, hogy ezt a mátrixot megfelelő pontosságban invertálva minden k időlépésre kiszámítsuk a (73) egyenletet! Ez a módszer a Θ -módszerhez hasonlóan tovább általánosítható, azaz konvex kombinációját képezzük az explicit és implicit tagoknak az alábbiak szerint:

$$\frac{1}{\Delta t}(T_i^{n+1} - T_i^n) = \frac{a}{\Delta x^2} \left[(1 - \Theta)(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) + \Theta(T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}) \right]$$

$$\implies T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha (1 - \Theta)(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) + \alpha \Theta(T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}).$$
(74)

Ez is átírható mátrixalakra, mégpedig:

$$(T^{n+1})_{0\dots N} = -M^{-1}Q(T^n)_{0\dots N}$$
(75)

ahol M és Q pedig:

 $Q_{(0...N)\times(0...N)} =$

$$M_{(0...N)\times(0...N)} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0\\ \alpha\Theta & -(1+2\alpha\Theta) & \alpha\Theta & 0 & \dots & 0\\ 0 & \alpha\Theta & -(1+2\alpha\Theta) & \alpha\Theta & \dots & \vdots\\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \alpha\Theta & -(1+2\alpha\Theta) & \alpha\Theta\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 \end{pmatrix},$$

``	, , , ,						
_	(1	0	0	0		0	
	$\alpha(1-\Theta)$	$1 - 2\alpha(1 - \Theta)$	$\alpha(1-\Theta)$	0		0	
	0	$\alpha(1-\Theta)$	$1-2\alpha(1-\Theta)$	$\alpha(1-\Theta)$		÷	
	÷	0	·	·	·	0	
	÷	:	·	$\alpha(1-\Theta)$	$1-2\alpha(1-\Theta)$	$\alpha(1-\Theta)$	
	0	0	0	0		1)

Ebben az esetben $\Theta = 1$ visszaadja a teljesen implicit sémát, a $\Theta = 1/2$ esetet pedig Crank-Nicholson sémának nevezzük. A $\Theta = 0$ esetén tisztán explicit sémát kapunk, valamint $\Theta < 1/2$ -ig feltételesen stabil az eljárás, ami az iterációs mátrixok sajátértékeinek vizsgálatával elemezhető.

Összegezve elmondhatjuk, hogy az időléptetés analóg fogalom az iterációs eljárásokkal, melynek szintén levezethető egy iterációs mátrixa, és annak sajátértékei meghatározzák a módszer stabilitását. Ekkor azonban lényeges hangsúlyt kell fektetni az iterációs mátrix inverzének kiszámítására, hogy ez ne befolyásolja, sőt mi több, megkönnyítse esetleg több időlépés egyszerre történő megtételét.

(76)

3.3.2. IMPLICIT MÓDSZER: II. RÉSZ

Ebben az alfejezetben azt nézzük meg, hogy a rendszerre bontott

$$\tau_{\Delta}\partial_t T + \partial_x q = 0,$$

$$\tau_q \partial_t q + q + \tau_{\Delta} \partial_x T = 0,$$

(77)

dimenziótlan Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenletnek hogyan néz ki az implicit, eltolt mezős, Θ -módszerrel felírt diszkretizációja.

Tekintsük a q_0 és q_N pontokat előírtnak a peremfeltételekben, a kezdeti feltételek pedig homogén zérus helyzetet írnak le. Elsőként az energiamérleget diszkretizálva kapjuk, hogy

$$\tau_{\Delta} \frac{1}{\Delta t} (T_i^{n+1} - T_i^n) = -\frac{1}{\Delta x} \left[(1 - \Theta)(q_{i+1}^n - q_i^n) + \Theta(q_{i+1}^{n+1} - q_i^{n+1}) \right],$$
(78)

valamint a konstitutív egyenlet következik:

$$\frac{\tau_q}{\Delta t}(q_i^{n+1} - q_i^n) + \left[(1 - \Theta)q_i^n + \Theta q_i^{n+1}\right] + \frac{\tau_\Delta}{\Delta x}\left[(1 - \Theta)(T_i^n - T_{i-1}^n) + \Theta(T_i^{n+1} - T_{i-1}^{n+1})\right] = 0.$$
(79)

A mátrixokkal történő felírás során figyelembe kell venni, hogy a T és q mezők nem ugyanakkorák az eltolás miatt, a fél térlépéssel eltolt mező egy elemmel kisebb. Legyen így a q mezőre igaz, hogy 0...N, a T mezőre pedig 0...M elemből áll. Nézzük először a (78) energiamérleget:

$$(T^{n+1})_{0...M} = -\frac{\Delta t(1-\Theta)}{\tau_{\Delta}\Delta x} Q_1(q^n)_{0...N} - \frac{\Delta t\Theta}{\tau_{\Delta}\Delta x} Q_1(q^{n+1})_{0...N} + (T^n)_{0...M}, \tag{80}$$

ahol Q_1 képezi a differenciákat a szomszédos térpontok között, így

$$Q_{1,(0\dots M)\times(0\dots N)} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0\\ 0 & -1 & 1 & 0 & \dots & 0\\ 0 & 0 & -1 & 1 & \dots & \vdots\\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0\\ 0 & 0 & \ddots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$
(81)

valamint ezzel analóg módon képezzük a (79) konstitutív egyenletben szereplő mennyiségeket is, azaz

$$(q^{n+1})_{0\dots N} = -D_2^{-1}(\alpha_1 Q_2(T^n)_{0\dots M} + \alpha_2 Q_2(T^{n+1})_{0\dots M} + D_1(q^n)_{0\dots N}),$$
(82)

ahol $\alpha_1 = \frac{\Delta t \tau_\Delta(1-\Theta)}{\tau_q \Delta x}$ és $\alpha_2 = \frac{\Delta t \tau_\Delta \Theta}{\tau_q \Delta x}$ konstansok. A Q_1 és Q_2 szerepe azonos, elemeik azonosak, azonban a Q_2 mérete kisebb, ez a hőmérsékletmezőn képezi a különbségeket.

A D_1 és D_2 mátrixszok pedig a hőáramvektorokat szorozzák, ezért méretük $N \times N$, és elemeik pedig rendre

$$D_{1,(0\dots N)\times(0\dots N)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{\Delta t}{\tau_q}(1-\Theta) - 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta t}{\tau_q}(1-\Theta) - 1 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \frac{\Delta t}{\tau_q}(1-\Theta) - 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

valamint

$$D_{2,(0...N)\times(0...N)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{\Delta t}{\tau_q}\Theta + 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta t}{\tau_q}\Theta + 1 & 0 & \dots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \frac{\Delta t}{\tau_q}\Theta + 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Vegyük észre, hogy mindkettő, (78–79) egyenletben szerepelnek a T^{n+1} és q^{n+1} vektorok. Egyszerű behelyettesítés és átrendezés után például a q^{n+1} vektor kiszámolható, amivel már a hőmérsékletmező értékei is meghatározottak lesznek.

Mindenképp fontos megjegyezni, hogy itt nem egyetlen mátrix hatványaként állítjuk elő az időlépéseket, ahogy azt az implicit módszer I. részében láttuk. Így a sajátértékek vizsgálata nem egyértelmű, mit is jelentene ebben az esetben és pontosan melyik mátrix hogyan járul hozzá a stabilitáshoz. Éppen ezért itt is a Neumann- és Jury-kritériumokkal érünk célt, ezeket fogjuk felhasználni. Mielőtt ezt megtennénk, írjuk még fel a GK és a ballisztikus egyenletek hasonló jellegű diszkretizációját is! A GK-egyenlet esetén a konstitutív egyenlet diszkretizációja a következő:

$$\frac{\tau_q}{\Delta t} (q_i^{n+1} - q_i^n) + ((1 - \Theta)q_i^n + \Theta q_i^{n+1}) + \\
+ \frac{\tau_\Delta}{\Delta x} ((1 - \Theta)(T_i^n - T_{i-1}^n) + \Theta(T_i^{n+1} - T_{i-1}^{n+1})) - \\
- \frac{\kappa^2}{\Delta x^2} \left[(1 - \Theta) (q_{i+1}^n - 2q_i^n + q_{i-1}^n) + \Theta(q_{i+1}^{n+1} - 2q_i^{n+1} + q_{i-1}^{n+1}) \right] = 0.$$
(83)

A ballisztikus konduktív egyenlet esetén pedig 2 konstitutíciós összefüggéssel van

dolgunk, amelyek diszkretizálva a következőek:

$$\frac{\tau_{q}}{\Delta t}(q_{i}^{n+1} - q_{i}^{n}) + ((1 - \Theta)q_{i}^{n} + \Theta q_{i}^{n+1}) + \frac{\tau_{\Delta}}{\Delta x}((1 - \Theta)(T_{i}^{n} - T_{i-1}^{n}) + \Theta(T_{i}^{n+1} - T_{i-1}^{n+1})) + \frac{\kappa}{\Delta x}((1 - \Theta)(Q_{i}^{n} - Q_{i-1}^{n}) + \Theta(Q_{i}^{n+1} - Q_{i-1}^{n+1})) = 0.$$
(84)

$$\frac{TQ}{\Delta t}(Q_i^{n+1} - Q_i^n) + \left((1 - \Theta)Q_i^n + \Theta Q_i^{n+1}\right) + \frac{\kappa}{\Delta x}\left((1 - \Theta)(q_{i+1}^n - q_i^n) + \Theta(q_{i+1}^{n+1} - q_i^{n+1})\right) = 0.$$
(85)

A tisztán explicit esethez hasonlóan, újból a (64) egyenletet használjuk fel. Helyettesítsük be a megfelelő tagokat a (78) egyenletbe, így

$$T_0(\xi - 1) + q_0 \frac{\Delta t}{\tau_\Delta \Delta x} \left[(1 - \Theta) \left(e^{ik\Delta x} - 1 \right) + \Theta \xi \left(e^{ik\Delta x} - 1 \right) \right] = 0,$$
(86)

valamint ugyanezeket a lépéseket kövessük a GK-egyenlet esetén is, azaz

$$q_{0}(\xi - 1) + q_{0}\frac{\Delta t}{\tau_{q}}\left[(1 - \Theta) + \Theta\xi\right] + T_{0}\frac{\tau_{\Delta}\Delta t}{\Delta x\tau_{q}}\left[(1 - \Theta)\left(1 - e^{-ik\Delta x}\right) + \Theta\xi\left(1 - e^{-ik\Delta x}\right)\right] - q_{0}\frac{\kappa^{2}\Delta t}{\Delta x^{2}\tau_{q}}\left[(1 - \Theta)\left(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x}\right) + \Theta\xi\left(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x}\right)\right] = 0.$$
(87)

A két egyenletből képzett együtthatómátrix determinánsát kiszámítva kapjuk az $F(\xi) = a_2\xi^2 + a_1\xi + a_0$ karakterisztikus polinomot. Az egyszerűsítések során szintén felhasználjuk, hogy $e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x} = 2\cos(k\Delta x) - 2$. Így a polinom együtthatói a következők:

$$a_{0} = 1 - \frac{\Delta t}{\tau_{q}} (1 - \Theta) + (2\cos(k\Delta x) - 2)(1 - \Theta) \frac{\Delta t}{\Delta x^{2}\tau_{q}} (\kappa^{2} - \Delta t(1 - \Theta)),$$

$$a_{1} = -2 + \frac{\Delta t}{\tau_{q}} (1 - 2\Theta) + (2\cos(k\Delta x) - 2) \frac{\Delta t}{\Delta x^{2}\tau_{q}} (\kappa^{2}(2\Theta - 1) - 2\Delta t(1 - \Theta)\Theta),$$

$$a_{2} = 1 + \frac{\Delta t}{\tau_{q}} \Theta - (2\cos(k\Delta x) - 2) \frac{\Delta t}{\Delta x^{2}\tau_{q}} \Theta (\kappa^{2} + \Delta t\Theta).$$
(88)

Ellenőrzésképpen látjuk, hogy a $\Theta = 0$ eset azonnal visszaadja a tisztán explicit sémához tartozó együtthatókat. Vizsgáljuk először a tisztán implicit esetet, azaz $\Theta = 1$. Ugyanazokat a Jury-kritériumokat felhasználva kapjuk, hogy

- 1. $\frac{4\Delta t^2}{\tau_a \Delta x^2} > 0$, ez minden esetben teljesül.
- 2. $4 + 2\frac{\Delta t}{\tau_q} + 4\frac{\Delta t}{\tau_q\Delta x^2}(2\kappa^2 + \Delta t) > 0$, azaz minden paraméter esetén teljesül.

3. $1 \le 1 + \frac{\Delta t}{\tau_q} + 4 \frac{\Delta t}{\tau_q \Delta x^2} (\kappa^2 + \Delta t)$, azaz további feltétel nélkül mindig teljesül.

Ez utóbbi relációkból nem kaptunk feltételeket a séma stabilitására vonatkozóan, minden esetben feltétel nélkül teljesülnek a követelmények. Az MCV-egyenlethez tartozó alesetet a $\kappa^2 = 0$ helyettesítéssel kapjuk. A $\Theta = 1/2$ választás egy speciális aleset, ezt szokás Crank–Nicolson-sémának nevezni. Ekkor szintén olyan relációkat kapunk, amelyek teljesülése nem igényel további feltételeket,

- 1. $\frac{4\Delta t^2}{\tau_a \Delta x^2} > 0$, ez minden esetben teljesül.
- 2. Egyszerűsítések után adódik, hogy 4 > 0, azaz bármely paramétertől függetlenül teljesül.
- 3. Átrendezés és egyszerűsítés után adódik, hogy $0 < 1 + \frac{4\kappa^2}{\Delta x^2}$, amely az MCV-egyenletre is mindig teljesül.

A sémák konzisztenciáját illetően az explicit esetnél bemutatott lépéseket újra megtehetjük, de szükségtelen, ugyanis az (56)–(58) egyenletek alapján ezek teljesülése itt is belátható, egyaránt a $\Theta = 1$ és $\Theta = 1/2$ esetekre vonatkozóan.

Utolsó lépésként hasonlítsuk össze a különböző sémákat! A következő négy esetet fogjuk vizsgálni:

- 1. Fourier-egyenlet megoldása ($\tau_q = \kappa^2$),
- 2. MCV-egyenlet megoldása ($\tau_q = 0.02, \kappa^2 = 0$),
- 3. GK-egyenlet megoldása ($\kappa^2 = 10\tau_q, \tau_q = 0.02$),
- 4. Ballisztikus-konduktív egyenlet megoldása,

azonos mellékfeltételek mellett. Alkalmazzunk I = 300 térlépést, és tartsuk konstans értéken a klasszikus anyagi paramétereket, azaz a fajhőt, sűrűséget és a hővezetési tényezőt, valamint a szimulált időintervallum hossza és a peremfeltételek is azonosak maradnak minden esetben.

3.3.3. A FOURIER-EGYENLET MEGOLDÁSA

Ebben az esetben a teljesen implicit sémának elegendő 100 időlépés, amely 0.119 s futási időt igényel, a megoldás a 5. ábrán látható. A $\Theta = 1$ és a $\Theta = 1/2$ esetek között nincsen észrevehető különbség. Ugyanehhez a megoldáshoz a teljesen explicit sémának a stabilitási feltételek betartásával viszont 10⁶ számú időlépésre van szüksége, amelynek a futási ideje 142.9 s. Ez már ezen a szinten is három nagyságrendnyi különbséget jelent!



5. ÁBRA. A Fourier-egyenlet megoldása a teljesen implicit sémával.

3.3.4. AZ MCV-EGYENLET MEGOLDÁSA

Az MCV-egyenlet hiperbolikus jellege miatt jelentős eltérést tapasztalunk a $\Theta = 1$ és a $\Theta = 1/2$ sémák között (6. ábra). Mindkét esetben 10^3 időlépést felhasználva, nagyságrendileg ugyanannyi futási idővel (0.2 s), a hullámfrontok környezete jelentősen eltér egymástól, de az aszimptotika ugyanaz marad.

A két séma közötti különbség csökken (7. ábra), ha a teljesen implicit sémánál növeljük az időlépések számát (10^5 , a futási idő 15.4 s). Az explicit sémának szintén 10^6 időlépésre és 145.45 s-ra van szüksége a megoldáshoz.

3.3.5. GK-EGYENLET MEGOLDÁSA

Itt a túlcsillapított tartomány megoldásaira helyezzük a hangsúlyt, ez a stabilitási feltételek és a kísérletek kiértékelése szempontjából fontos. Erre a tartományra a $\kappa^2 > \tau_q$ reláció a jellemző, és az explicit séma esetén sokkal nagyobb lépésszámot követel meg. Ekkor, ahogy azt a Fourier-egyenlet megoldása során is tapasztaltuk, a $\Theta = 1$ és 1/2 beállítások között nem észlelhető különbség, feltehetően az egyenletek parabolikus jellege miatt. A tisztán implicit és vegyes esetekben 10^3 számú időlépés elegendő, 0.261 s futási idő mellett (8. ábra). Az explicit sémánál 300 térpont esetén nem elegendő a 10^6 számú időlépés, emiatt olyan méretű egyenletrendszerrel van dolgunk, amit ilyen mátrixokkal felírt formalizmus mellett már nem lehet kezelni, és emiatt megoldani sem. Ekkor vagy olyan kódot írunk, amelyben csak minden N-edik időlépésre vonatkozó értékeket mentjük el, vagy csökkentjük a térpontok számát. Ez utóbbi választást megtéve, 100 térpont és 10^6 számú időlépésre 52.6 s az explicit séma futási időigénye. Összehasonlításképpen,



6. ÁBRA. Az MCV-egyenlet megoldása a különböző implicit sémákkal.



7. ÁBRA. Az MCV-egyenlet megoldása a különböző implicit sémákkal. A 6. ábrához képest itt változatlan a $\Theta=1/2$ séma megoldása.



8. ÁBRA. A GK-egyenlet megoldása $\Theta = 1$ implicit sémával.



9. Ábra. A ballisztikus konduktív egyenlet megoldás
a $\Theta=1$ és1/2 implicit sémákkal.

100 térpontot és 1000 időlépést alapul véve az implicit sémának elegendő 0.16 s.

3.3.6. BALLISZTIKUS-KONDUKTÍV EGYENLET MEGOLDÁSA

A paramétereket a NaF kísérletek tapasztalatai [53] alapján meghatározva egy összehasonlítást tárgyalunk a $\Theta = 1$ és 1/2 esetekhez kötődően. Ahogy az MCV-egyenlet esetében is láttuk, a hiperbolikus egyenletekre a Crank-Nicolson-típusú séma pontosabb megoldást ad (9. ábra), ugyanannyi tér és időlépés mellett. Így van ez a ballisztikus-konduktív egyenlet esetén is, a hullámfront környezete lényegesen eltér egymástól a két esetben. Az implicit séma 300 térpont és 5000 időlépés megtételével 1.8 s futási időt igényelt, ugyanehhez a megoldáshoz az explicit sémának 500000 időlépésre és 170.2 s-ra volt szüksége.

4. A GUYER–KRUMHANSL-EGYENLET ANALITIKUS MEGOLDÁSA HŐIMPULZUS PEREMFELTÉTEL ESETÉN

4.1. BEVEZETÉS

A korábbi, elméleti részben láttuk, hogy a Fourier-egyenlet kiterjesztésére milyen termodinamikai módszertan felhasználásával milyen jellegű kiterjesztésekre jutunk. Az általánosított egyenletek közül a Guyer–Krumhansl-egyenlet kitüntetett fontossággal bír, a kísérletekről szóló fejezet ezt alá fogja támasztani. Éppen emiatt fontos, hogy a számításokat megkönnyítsük, legalább a nagy számú kísérletek kiértékelése miatt. Erre mutatunk most be egy analitikus módszert, amely bár a változók szétválasztásán alapul, annál azért technikásabb. Az előlapi peremfeltétel a hőimpulzus-kísérletben is felhasznált időfüggő hőáram-peremfeltételként adott. Az egyszerűség kedvéért a hátfali peremfeltételt tekintsük adiabatikusnak a teljes folyamat során. Habár a valóságban nem létezik adiabatikus peremfeltétel, ez a megoldás így is használható fog maradni, amikor a végeselemes módszer által generált megoldásokat szeretnénk az általánosított hővezetési egyenlettel is kiértékelni. Egy ilyen szimulációs környezetben az összes peremfeltétel jól kontrollálható, így az adiabatikus közelítés immár pontos megoldást jelent. További felhasználása az analitikus megoldásnak, hogy a COMSOL – szintén végeselemes – programkörnyezetben implementált általánosított egyenletek validálására is szolgál.

4.2. FELADAT KITŰZÉSE

Az eddigiek során a Guyer-Krumhansl-egyenletet egyenletrendszerként írtuk fel, melynek innentől csakis az 1-dimenziós formáját tekintjük. Állt egy konstitutív egyen-

letből:

$$\tau_q \dot{q} + q - \lambda T' - \kappa^2 q'' = 0, \tag{89}$$

ahol a felül pontozás az időderiváltat jelöli, a felülvonás pedig a térderiváltat, a τ_q a relaxációs idő, λ a hővezetési tényező, κ^2 pedig a disszipációs paraméter. Ehhez hozzátartozik még a belső energia mérlegegyenlete:

$$\rho c \dot{T} + q' = 0. \tag{90}$$

Ezeket dimenziótlan formába írva kapjuk, hogy

$$\tau_q \dot{q} + q - \tau_\Delta T' - \kappa^2 q'' = 0, \qquad (91)$$

$$\tau_{\Delta}\dot{T} + q' = 0, \tag{92}$$

ahol minden mennyiség dimenziótlan a korábban bevezetett jelöléseknek megfelelően. A peremfeltételeket szintén hőáramként, dimenziótlanul fogalmazzuk meg:

$$q(x=0,t) = q_0(t) = 1 - \cos\left(2\pi \frac{t}{t_p}\right),$$
(93)

ahol t_p a hőimpulzus hossza. A hátfali peremfeltétel pedig adiabatikus állapotot definiál, azaz $q(x = L, t) = q_L(t) = 0$. A kezdeti feltétel szerint pedig q(x, t = 0) = 0 és $\dot{q}(x, t = 0) = 0$.

Továbbá észre kell vennünk, hogy a hagyományos értelemben másodfajúnak tekintett peremfeltételt hőmérsékletileg nem tudjuk megfelelően értelmezni, a peremen adott hőáram nem azonosítható közvetlenül a hőmérséklet gradiensével, ahogy azt a Fourieregyenlettel tennénk. Emiatt célszerű nem a hőmérséklettel, hanem közvetlenül a hőárammal dolgoznunk. Rendezzük át úgy a (91) és (92) egyenleteket, amiben csak a hőáram szerepel! Így a következő egyenletet kell megoldanunk:

$$\tau_q \ddot{q} + \dot{q} = q'' + \kappa^2 \dot{q}''. \tag{94}$$

Ekkor a hőáramra adott peremfeltétel úgy viselkedik, mint egy elsőfajú peremfeltétel.

4.3. MEGOLDÁS

A megoldást időben 2 szakaszra bontjuk. A megoldás első szakasza a t_p időpontig tart, azaz a hőimpulzus végéig. Mivel innentől az előlapi peremfeltétel is zérus, így a t_p utáni időpontokra másképp járunk majd el. Először nézzük tehát az első szakaszt.

Az időfüggő peremfeltétel miatt a q(x,t) függvényt bontsuk fel két részre:

$$q(x,t) = w(x,t) + v(x,t),$$
(95)

ahol w(x,t) segítségével "leválasztjuk" a peremfeltételek időfüggését a v(x,t) inhomogén, de állandó peremfeltételű megoldásról. Helyettesítsük vissza (95) egyenlőséget a (94) egyenletbe:

$$\tau_q(\ddot{w} + \ddot{v}) + \dot{w} + \dot{v} = w'' + v'' + \kappa^2(\dot{w}'' + \dot{v}'').$$
(96)

A w(x,t) alakját mi határozzuk meg, célszerű az egyszerűség kedvéért valamilyen lineáris függvénnyel dolgozni, azaz legyen

$$w(x,t) := q_0(t) + \frac{x}{L} \left(q_L(t) - q_0(t) \right) = \left(1 - \frac{x}{L} \right) q_0(t), \tag{97}$$

mivel a hátfali $q_L(t)$ hőáram azonosan nulla. Ekkor a (96) egyenletben a w'' = 0, és a $\dot{w} = \left(1 - \frac{x}{L}\right)\dot{q}_0(t)$, $\ddot{w} = \left(1 - \frac{x}{L}\right)\ddot{q}_0(t)$. Így v(x,t)-re egy inhomogén egyenletet kaptunk, azonban a rá vonatkozó peremfeltételek időben állandóak,

$$\tau_q \ddot{v} + \dot{v} = v'' + \kappa^2 \dot{v}'' - f(x, t), \tag{98}$$

ahol $f(x,t) = \dot{w} + \tau_q \ddot{w}$. A (95) felbontás megőrzi a kezdeti feltételeket, azaz v(x,t = 0) = 0 és a $\dot{v}(x,t=0) = 0$, a peremfeltételek pedig homogének: v(x=0,t) = 0, v(x=L,t) = 0. A \dot{w} és a \ddot{w} pedig a $q_0(t)$ -ből számolható:

$$\dot{w} = \frac{2\pi}{t_p} \left(1 - \frac{x}{L} \right) \sin\left(2\pi \frac{t}{t_p} \right),\tag{99}$$

$$\ddot{w} = \frac{4\pi^2}{t_p^2} \left(1 - \frac{x}{L}\right) \cos\left(2\pi \frac{t}{t_p}\right). \tag{100}$$

Innentől kihasználhatjuk a változók szétválasztásának módszerét és annak lépéseit, azaz feltételezzük, hogy

$$v(x,t) = \varphi(t)X(x) \tag{101}$$

felbontás megtehető. Mivel a (98) egyenlet inhomogén, ezért azt is fel kell tennünk, hogy a homogén (f(x,t) = 0) esetből adódó sajátfüggvényeket használhatjuk. Az így adódó sajátfüggvényeket fogjuk felhasználni az f(x,t) kifejtésére is ebben a függvénytérben, amelyet az X(x) sajátfüggvények feszítenek ki. Azaz a (101) egyenletet felhasználva a következő átrendezést kapjuk a homogén esetre vonatkoztatva:

$$\frac{\tau_q \ddot{\varphi} + \dot{\varphi}}{\varphi + \kappa^2 \dot{\varphi}} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\beta,$$
(102)

ahol $\beta > 0$. Így a sajátfüggvényeket a

$$X'' + \beta X = 0, \qquad X(x = 0) = 0, \qquad X(x = L) = 0$$
 (103)

egyenletből határozzuk meg, amelynek általános megoldása a

$$X(x) = A\cos\left(\sqrt{\beta}x\right) + B\sin\left(\sqrt{\beta}x\right)$$
(104)

függvény. Az X(x = 0) = 0 peremfeltételből A = 0 adódik, az X(x = L) feltételt kihasználva pedig megkapjuk a sajátértékeket. Mivel $B \neq 0$, ezért $\sin(\sqrt{\beta}x) = 0$. Így

$$\beta_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2,\tag{105}$$

ahol n természetes szám és bármely n > 0 esetén β_n sajátérték lesz. Összegezve tehát elmondhatjuk, hogy

$$X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{106}$$

sajátfüggvénye a $-\frac{d^2}{dx^2}$ operátornak β_n sajátértékekkel. A *B* együtthatót elhagyjuk, később a kezdeti feltételek figyelembevételénél összevonjuk az időbeli részből adódó együtthatóval. A (106) egyenletet felhasználva kapjuk, hogy

$$v(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$
(107)

Ekkor még hátra van $\varphi(t)$ meghatározása, ehhez figyelembe kell vennünk az f(x,t) inhomogén tagot is, mivel

$$-f(x,t) = \tau_q \ddot{v} + \dot{v} - v'' - \kappa^2 \dot{v}'' =$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty} \left[\tau_q \ddot{\varphi}_n + \dot{\varphi}_n + \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \varphi_n + \kappa^2 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \dot{\varphi}_n \right] \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$
(108)

Ezt úgy tudjuk megoldani, ha magát az f(x,t) függvényt is felbontjuk a sajátfüggvények szerint és utána φ_n -re kapunk egy közönséges differenciálegyenletet, amelyet minden *n*-re meg kell oldani.

Tegyük fel, hogy

$$f(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(t) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right),$$
(109)

ahol

$$f_n(t) = \frac{2}{L} \left[\frac{2\pi}{t_p} \sin\left(2\pi \frac{t}{t_p}\right) + \tau_q \frac{4\pi^2}{t_p^2} \cos\left(2\pi \frac{t}{t_p}\right) \right] \int_0^L \left(1 - \frac{x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x. \quad (110)$$

Az integrálást elvégezve kapjuk, hogy

$$f_n(t) = \left[\frac{2\pi}{t_p}\sin\left(2\pi\frac{t}{t_p}\right) + \tau_q \frac{4\pi^2}{t_p^2}\cos\left(2\pi\frac{t}{t_p}\right)\right]\frac{2}{n\pi} = f(t)\frac{2}{n\pi},$$
 (111)

$$f(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} f(t) \frac{2}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right).$$
(112)

Ezzel tehát van egy közönséges differenciálegyenletünk $\varphi_n(t)$ -re, $\varphi_n(0) = 0$ és $\dot{\varphi}_n(0) = 0$ kezdeti feltételekkel:

$$\tau_q \ddot{\varphi}_n + \left[1 + \kappa^2 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\right] \dot{\varphi}_n + \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \varphi_n = -f(t)\frac{2}{n\pi}.$$
(113)

Ennek megoldásával v(x,t) ismert és $q_I(x,t) = w(x,t) + v(x,t)$ első szakasz megoldása teljesen meghatározott. A kezdeti feltételek figyelembevételével az alábbi megoldást kapjuk:

$$\varphi_{n}(t) = \frac{1}{2\sqrt{a^{2} - 4b} \left(a^{2}g^{2} + (b - g^{2})^{2}\right)} e^{-\frac{1}{2}\left(a + \sqrt{a^{2} - 4b}\right)t} \cdot \left[a^{2}c\left(-1 + e^{\sqrt{a^{2} - 4b}t}\right)g - \left(\sqrt{a^{2} - 4b}d\left(1 + e^{\sqrt{a^{2} - 4b}t}\right) + 2c\left(-1 + e^{\sqrt{a^{2} - 4b}t}\right)g\right)\left(b - g^{2}\right) + a\left(\sqrt{a^{2} - 4b}cg + \sqrt{a^{2} - 4b}ce^{\sqrt{a^{2} - 4b}t}g + d\left(b + g^{2}\right) - de^{\sqrt{a^{2} - 4b}t}\left(b + g^{2}\right)\right) + 2\sqrt{a^{2} - 4b}e^{\frac{1}{2}\left(a + \sqrt{a^{2} - 4b}\right)t}\left(\left(bd - g\left(ac + dg\right)\right)\cos(gt) + \left(bc + g\left(ad - cg\right)\right)\sin(gt)\right)\right],$$
(114)

ahol a, b, c, d, g konstansok a következőek:

$$a = \frac{1}{\tau_q} \left(1 + \kappa^2 \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 \right),$$

$$b = \frac{1}{\tau_q} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2,$$

$$c = -\frac{4}{nt_p\tau_q},$$

$$d = -\frac{8\pi}{nt_p^2},$$

$$g = \frac{2\pi}{t_p}.$$
(115)

A megoldás q_{II} második szakaszához az első szakasz t_p időpontbeli értéke szolgál kezdeti feltételként.

4.3.2. II. SZAKASZ

Ekkor ugyanúgy a (94) egyenletet kell megoldanunk, azonban a peremfeltételek most időfüggetlenek és adiabatikusak, azaz q(x = 0, t) = q(x = L, t) = 0. A kezdeti feltételek most bonyolultabbak, a $q_{II}(x, t = 0) = q_I(x, t = t_p)$ és a $\dot{q}_{II}(x, t = 0) = \dot{q}_I(x, t = t_p)$ egyenleteket ki kell elégítenünk.

Az előző q_I megoldástól eltérően az időbeli rész megváltozik, itt nincs f(x,t) inhomogenitás. Szintén feltételezzük a szorzat alakú megoldást:

$$q_{II}(x,t) = \gamma(t)X(x). \tag{116}$$

A térbeli rész, az X(x) sajátfüggvény és a sajátérték ugyanaz, hisz a homogén megoldásra vonatkoznak, így ezeket nem számoljuk újra. Az időbeli részre pedig szintén egy közönséges differenciálegyenletet kell megoldani:

$$\tau_q \ddot{\gamma}_n + \left(1 + \beta_n \kappa^2\right) \dot{\gamma}_n + \beta_n \gamma_n = 0 \tag{117}$$

a $\gamma_n(0)=\varphi_n(t_p)$ és a $\dot{\gamma}_n(0)=\dot{\varphi}_n(t_p)$ kezdeti feltételekkel. Ennek

$$\gamma_n(t) = C_{1n}e^{r_{1n}t} + C_{2n}e^{r_{2n}t} \tag{118}$$

az általános megoldása, az

$$r_{1,2} = \frac{1}{2\tau_q} \left(-1 - \beta_n \kappa^2 \pm \sqrt{(1 + \beta_n \kappa^2)^2 - 4\tau_q \beta_n} \right)$$
(119)

karakterisztikus gyökökkel. A C_{1n} és a C_{2n} együtthatókat a kezdeti feltételekből kell meghatározni :

$$C_{1n} + C_{2n} = \varphi_n(t = t_p),$$

$$C_{1n}r_{1n} + C_{2n}r_{2n} = \dot{\varphi}_n(t = t_p).$$
(120)

Az együtthatók közlésétől azok terjedelme miatt eltekintünk.

4.4. A HŐMÉRSÉKLETMEZŐ MEGHATÁROZÁSA

Az eddigiekben meghatároztuk egyaránt a t_p időtartam előtti és utáni tartományra a hőáramra vonatkozó megoldásokat, amelyeket t_p időpillanatra vonatkozóan illesztettünk a kezdeti feltételek által. A hőmérsékletmező kiszámításához szükségünk van a belső energia mérlegyenletére, amiből integrálással közvetlenül meghatározzuk a hőmérsékletet. Ezt is két szakaszra kell bontani. Ezeket a lépéseket kifejtve:

$$\tau_{\Delta}\dot{T} + q' = 0, \quad \Rightarrow \quad \dot{T} = -\frac{1}{\tau_{\Delta}}q' = -\frac{1}{\tau_{\Delta}}\sum_{n=1}^{\infty}\Gamma_n(t)\frac{n\pi}{L}\cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right),$$
 (121)

$$T = -\frac{1}{\tau_{\Delta}} \int_{0}^{t} \sum_{n=1}^{\infty} \Gamma_{n}(\alpha) \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) d\alpha, \qquad (122)$$

ahol $\Gamma_n(t)$ lehet φ_n vagy γ_n , attól függően, hogy melyik időintervallumra integrálunk, a hőmérsékletre vonatkozó kezdeti feltételt pedig az integrálás és egy konstansnyi határozatlanságot kihasználva vesszük figyelembe. A dimenziótlan hőmérséklet kezdeti feltétele az első szakaszra: $T_I(x, t = 0) = 0$, a második szakaszra: $T_{II}(x, t = 0) = T_I(x, t = t_p)$. Mindez az első szakaszra úgy néz ki, mint

$$T_{I}(x,t) = -\frac{1}{\tau_{\Delta}} \int_{0}^{t} \left[w'(\alpha) + v'(\alpha) \right] d\alpha =$$
$$= -\frac{1}{\tau_{\Delta}} \int_{0}^{t} \left(-\frac{1}{L} q_{0}(\alpha) + \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{n}(\alpha) \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) d\alpha, \qquad (123)$$

$$\int_{0}^{t} w'(\alpha) \mathbf{d}\alpha = \frac{1}{L} \left(-t + \frac{t_p \sin(2\pi t/t_p)}{2\pi} \right),\tag{124}$$

$$\int_{0}^{t} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{n}(\alpha) d\alpha = \sum_{n=1}^{\infty} \Phi_{n}(t) = \frac{1}{g \left(a^{2}g^{2} + (b - g^{2})^{2}\right) (a - R)R(a + R)} \cdot \left((bc + g(ad - cg))(a - R)R(a + R) + g(a + R) \left(a^{2}cg - ad \left(b + g^{2}\right) + acgR - \left(b - g^{2}\right) (2cg + dR)\right) - g(a - R) \left(a^{2}cg - \left(b - g^{2}\right) (2cg - dR) - a \left(d \left(b + g^{2}\right) + cgR\right)\right) - e^{-\frac{1}{2}(a + R)t} \left(e^{Rt}g(a + R) \cdot \left(a^{2}cg - ad(b + g^{2}) + acgR - (b - g^{2})(2cg + dR)\right) - g(a - R) \left(a^{2}cg - \left(b - g^{2}\right) (2cg - dR) - a \left(d \left(b + g^{2}\right) + cgR\right)\right) + e^{\frac{1}{2}(a + R)t} (a - R)R(a + R)((bc + g(ad - cg))\sin(gt) + (-bd + g(ac + dg))\sin(gt))\right),$$
(125)

ahol $R=\sqrt{a^2-4b}.$ Tudjuk továbbá, hogy $\varphi_n(t=0)=0,$ így

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Phi_n(t=0) = 0$$
 (126)

is igaz a t = 0 pontban. Így a kezdeti feltétel automatikusan teljesül (az integrálási konstans $K_{1n} = 0$). A második szakasz esetén illeszteni kell a két hőmérséklet-eloszlás függvényét egymáshoz. Írjuk fel az integrálást az eddigiekhez hasonlóan:

$$T_{II} = -\frac{1}{\tau_{\Delta}} \int_{0}^{t} \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n(\alpha) \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) d\alpha, \qquad (127)$$

$$\int_{0}^{t} \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_{n}(\alpha) d\alpha = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_{1n}}{r_{1n}} \left(e^{r_{1n}t} - 1 \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_{n}(t).$$
(128)

Fontos látnunk, hogy $\Omega_n(t=0)$ helyen zérus értéket vesz fel, azaz nem képes azonnal a $T_I(x, t=t_p)$ értéket felvennie. Az is igaz, hogy az integráláskor mindig rendelkezünk



10. ÁBRA. A hátfali hőmérséklet konvergenciája egyre több tagot figyelembe véve.

egy konstansnyi határozatlansággal, ebben az esetben szintén, azaz létezik K_{2n} konstans, amely nem nulla és az alábbi módon határozzuk meg:

$$T_{II}(x,t=0) = T_I(x,t=t_p) = -\frac{1}{\tau_\Delta} \left(-\frac{t_p}{L} + \sum_{n=1}^\infty \Phi_n(t=t_p) \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) = -\frac{1}{\tau_\Delta} \left(\sum_{n=1}^\infty \Omega_n(t=0) \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \right) + \sum_{n=1}^\infty K_{2n} \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + \frac{t_p}{\tau_\Delta L}, \quad (129)$$

vagyis az utolsó egyenlőség utolsó két tagja jelenti az illesztési együtthatókat:

$$K_{2n} = \Phi_n(t = t_p).$$
 (130)



11. ÁBRA. A hátfali hőmérséklet a Fourier-egyenlet megoldása esetén.



12. ÁBRA. A hátfali hőmérséklet az MCV-egyenlet megoldása esetén.

Mivel a kísérletek kiértékelése szempontjából a hátfali hőmérséklet időbeli lefutása a fontos, ezért nézzük meg, hogyan konvergál az analitikus megoldásban kifejtett végtelen sorozat. A hátfali hőmérsékletet a Fourier-egyenlet ($\tau_q = \kappa^2$) esetén N = 1, 3, 10, 40 tagra összegezve a 10. ábrán látjuk. Először N = 1 és 3 esetén a kezdeti szakasz a negatív tartományban mozog, utána pedig átmegy a pozitív tartományra (N = 10), és végül N = 40 esetén már gyakorlatilag sima. Ebből azt is le tudjuk olvasni, hogy a kezdeti, rövid ideig tartó hőimpulzusszakasz korrekt leírásához elég sok tagot kell figyelembe venni. Hosszabb időtartamra azonban ez a különbség teljesen eltűnik, és elegendő csak az első tagot használni.

4.4.1. AZ IMPLICIT NUMERIKUS MEGOLDÁSSAL VALÓ ÖSSZEVETÉS

Ahhoz, hogy ellenőrizzük az analitikus megoldás helyességét, valamint a numerikus sémánk pontosságát, vessük össze a két megoldást, különböző esetekre ! Először tekintsük a Fourier-egyenlet megoldását azonos anyagi paraméterekre és peremfeltételekre (11. ábra). A numerikus megoldás során 500 térpontot és 10^3 időlépést használtunk fel. A numerikus megoldáshoz 1.84 s idő szükséges, az analitikus megoldáshoz 200 tagot összegezve, 0.001 s-os időlépésekkel, pedig 0.23 s. Bár ez nem tűnik jelentős különbségnek 1 futtatás során, de a kísérleti adatokra való illesztésnél ennél nagyságrendekkel többször kell a megoldást előállítani. Az MCV-egyenlet megoldása során is nagyon jó egyezést mutat mindkét megoldás (12. ábra). Ekkor azonban a $\Theta = 1/2$ -hez tartozó vegyes séma jobban teljesít, mint az analitikus megoldás, 8 s-ra volt szükség a tagok felösszegzésére, szemben a numerikus eljárás 1.89 s-mal. A teljesen implicit séma azonban itt is elmarad az analitikustól, ideje 16 s. A GK-egyenlet túlcsillapított tartományban való megoldása (13. ábra) esetén az analitikus út meglehetősen gyors, ugyanis már 5 tag összegzésével is jól



13. ÁBRA. A hátfali hőmérséklet a GK-egyenlet megoldása esetén.

közelíti a pontos megoldást és ehhez kevesebb, mint 0.1 s is elegendő. Ebben az esetben az implicit numerikus megoldás sem marad le nagyon, a szükséges futási idő 0.3 s.

Köszönetmondás

A kutatást az NKFIH K116197 és K116375 számú pályázata támogatta.

IRODALOM

- [1] P. D. Lax and R. D. Richtmyer. Survey of the stability of linear finite difference equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 9(2):267–293, 1956.
- [2] Y. Liu. Fourier analysis of numerical algorithms for the Maxwell equations. *Journal of Computational Physics*, 124:396–416, 1996.
- [3] P. Amodio, Y. A. Blinkov, V. P. Gerdt, and R. L. Scala. On Consistency of Finite Difference Approximations to the Navier-Stokes Equations. pages 46–60, 2013. arXiv:1307.0914v2.
- [4] I. Müller and T. Ruggeri. Rational Extended Thermodynamics. Springer, 1998.
- [5] P. Brenner. The Cauchy Problem for Symmetric Hyperbolic Systems in Lp spaces. *Mathematica Scandinavica*, 19:27–37, 1966.
- [6] M. N. Mahyuddin. Digital control system. Lecture notes, University Sains Malaysia, 2008.
- [7] J.B.J. Fourier. Théorie Analytique De La Chaleur. 1822. Firmin Didot, Paris.

- [8] M. Noroozi, S. Saedodin, D.D. Ganji. Nonlinear Solution to a Non-Fourier Heat Conduction Problem in a Slab Heated by Laser Source. *Archive of Mechanical Engineering*, 2016. VOL. LXIII, 10.1515/meceng-2016-0007.
- [9] S. Henning. Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows. Springer, 2005.
- [10] A. Livanova, J. B. Sykes. Landau A Great Physicist and Teacher. 1980. Pregamon Press Ltd.
- [11] L.D. Landau. Two-Fuid Model of Liquid Helium II. Journal of Physics, 1941. 5(1):71-90.
- [12] L. Tisza. Transport Phenomena in Helium II. Nature, 1938. 141:913.
- [13] V. Peshkov. Second Sound in Helium II. J. Phys., 381, 1944.
- [14] R. J. Donnelly. The Two-fluid Theory and Second Sound in Liquid Helium. *Physics Today*, pages 34–39, 2009.
- [15] C. T. Lane, A. Fairbank, M. Fairbank. Second Sound in Liquid Helium II. *Physical Review*, 71(9), 1947.
- [16] J. C. Maxwell. On the Dynamical Theory of Gases. Philos. T. R. Soc. Lond, 157:49–88, 1867.
- [17] C. Cattaneo. Sulla Conduzione Del Calore. Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena, 3:83–101, 1948.
- [18] M. P. Vernotte. Le Paradoxes The La Théorie Continue E L'équation De La Chaleur. Comptesrendus Hebdomadaires Des Séances De L'Académie Des Sciences, 246(3154-55), 1958.
- [19] J. C. Ward, J. Wilks. Second Sound and the Thermo-mechanical Effect at Very Low Temperatures. *Phil. Mag*, 42, 1952.
- [20] R. J. Gutfeld, A. H. Nethercot. Heat Pulses in quartz and Sapphire at Low Temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 12, 1964.
- [21] R. A. Guyer, J. A. Krumhansl. Dispersion Relation for Second Sound in Solids. *Phys. Rev*, 133, 1964.
- [22] R. A. Guyer, J. A. Krumhansl. Solution of the Linearized Phonon Boltzmann Equation. *Phys. Rev*, 148, 1966.
- [23] J. A. Krumhansl. R. A. Guyer. Thermal Conductivity, Second Sound And Phonon Hydromechanic Phenomena in Non-metallic Crystals. *Phys. Rev*, 148, 1966.
- [24] C. C. Ackermann, B. Bertman, H. A. Fairbanks, R. A. Guyer. Second Sound in Solid Helium. *Phys. Rev. Lett.*, 16, 1970.
- [25] T. F. McNelly, S. J. Rogers, D. J. Chanin, R. J. Rollefson, W. M. Goubau, G. E. Schmidt, J. A. Krumhansl, R. O. Pohl. Heat Pulses in NaF: Onset of Second Sound. *Phys. Rev. Lett.*, 24, 1970.
- [26] H. E. Jackson, C. T. Walker, T. F. McNelly. Second Sound in NaF. Phys. Rev. Lett., 25, 1970.
- [27] V. Narayanamurti, D. C. Dynes. Observation of Second Sound in Bismuth. *Phys. Rev. Lett.*, 28, 1972.

- [28] Y. Xuan, Q. Li. Heat Transfer Enhancement of Nanofluids. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2000. Volume 21, Issue 1, 58-64.
- [29] S. K. Das, N. Putra, P. Thiesen, W. Roetzel. Temperature Dependence Of Thermal Conductivity Enhancement For Nanofluids. *Journal Of Heat Transfer*, 125(4):567–574, 2003.
- [30] E. Brown, L. Hao, J. C. Gallop, J. C. Macfarlane. Ballistic Thermal and Electrical Conductance Measurements on Individual Multiwall Carbon Nanotubes. *Appl. Phys. Lett.*, 87, 2005. 023107.
- [31] Y. S. Ju, K. E. Goodson. Phonon Scattering in Silicon Films with Thickness of Order 100 nm. *Applied Physics Letters*, 74(20):3005, 1991.
- [32] D.G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson, G. D. Mahan, A. Majumdar, H. J. Maris, R. Merlin, S. R. Phillpot. Nanoscale Thermal Transport. *Journal Of Applied Physics*, 93:793–818, 2003.
- [33] M. Asheghi W. Liu. Phonon-boundary Scattering in Ultrathin Single-crystal Silicon Layers. *Phys. Lett.*, 84, 2004. 3819.
- [34] F. Márkus, K. Gambár. Heat Propagation Dynamics in Thin Silicon Layers. Int. J. Heat and Mass Transfer., page 495, 2013.
- [35] G. D. Mahan, F. Claro. Nonlocal Theory of Thermal Conductivity. Phys. Rev., 38, 1988.
- [36] G. Chen. Ballistic-Diffusive Heat-Conduction Equations. Phys. Rev. Lett., 86(2297), 2001.
- [37] A. S. Henry, G. Chen. Spectral Phonon Transport Properties of Silicon Based on Molecular Dynamics Simulations and Lattice Dynamics. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 5:1–12, 2008.
- [38] R. Kovács. Hővezetés egyenleteinek elmélete, numerikus vizsgálata és kísérleti ellenőrzése. *Tudományos Diákköri Konferencia*, október 2014. Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, témavezető: Ván P.
- [39] Asszonyi, Cs. Csatár, A. Fülöp, T. (2016): Elastic, thermal expansion, plastic and rheological processes – theory and experiment, *Periodica Polytechnica Civil Engineering* 60, 591–601.
- [40] Asszonyi, Cs. Csatár, A. Fülöp, T. (2015): Szilárd anyagok rugalmas, hőtágulási, képlékeny és reológiai folyamatainak termomechanikája – elmélet és kísérlet. In: Fülöp, T. (szerk.), Termodinamikai módszertan – kontinuumfizikai alkalmazások, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 19, Egyesület a Tudomány és Technológia Egységéért, Budapest, 35–56.
- [41] Fülöp, T. Ván, P. (2012): Kinematic quantities of finite elastic and plastic deformation, *Mathematical Methods in the Applied Sciences* **35**, 1825–1841.
- [42] Fülöp, T. (2015): Objective thermomechanics, megjelenés alatt, e-print arXiv:1510.08038 (https://arxiv.org/abs/1510.08038).
- [43] P. Ván R. Kovács. Generalized Heat Conduction in Heat Pulse Experiments. International Journal Of Heat And Mass Transfer, 83:613–620, 2015.
- [44] T. Fülöp P. Ván. Universality In Heat Conduction Theory: Weakly Nonlocal Thermodynamics. Ann. Phys., 8(524):470–478, 2012.

- [45] A. Berezovski, P. Ván. Internal Variables In Thermoelasticity. Springer, 2017.
- [46] B. Nyíri. On The Entropy Current. Journal Of Non-Equilibrium Thermodynamics, 16(2):179–186, 1991.
- [47] J. Verhás. *Thermodynamics And Rheology*. Akadémiai Kiadó, Akadémiai Nyomda, Martonvásár, 1997. ISBN 963057389.
- [48] L. Onsager. Reciprocal Relations In Irreversible Processes. Phys. Rev., 37, 1931.
- [49] I. Gyarmati. On The Wave Approach Of Thermodynamics and Some Problems of Non-Linear Theories. Journal Of Non-Equilibrium Thermodynamics, 2:233–260, 1977.
- [50] P. Ván, R. Kovács, T. Fülöp. Thermodynamics Hierarchies Of Evolution Equations. Proceedings Of The Estonian Academy Of Sciences, pages 389–395, 2015.
- [51] H. Struchtrup W. Dreyer. Heat Pulse Experiments Revisited. *Continuum Mechanics And Thermodynamics*, 5:3–50, 1993.
- [52] R. Kovács, P. Ván. Models Of Ballistic Propagation Of Heat At Low Temperatures. June 16, 2016.
- [53] R. Kovács and P. Ván. Second sound and ballistic heat conduction: NaF experiments revisited. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 117:682-690, 2018.

NEM-FOURIER HŐVEZETÉS KÍSÉRLETI ÉS VÉGESELEMES VIZSGÁLATA

Lovas Ádám^{1,3} – Fodor Tamás¹ – Kovács Róbert^{1,2,3} ¹BME GPK Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, Budapest ²MTA Wigner FK RMI, Elméleti Fizikai Osztály, Budapest ³Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, Budapest

Nem-Fourier hővezetési jelenséget kísérletileg alacsony hőmérsékleten figyeltek meg először, reprodukálható módon. Ugyanez nem mondható el a szobahőmérsékleten zajló kísérletekről, ezidáig. Ebben a munkában a BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékén zajló kísérleteket tárgyaljuk, amelyek reprodukálhatóan, több ízben kimutatták a nem-Fourier hővezetési jelenséget heterogén anyagokban, mint például kőzetek és fémhabok. Ezt követően a kísérleti háttér által ihletett végeselemes modellt mutatjuk be, amely jól prezentálja a mögöttes fizikai elveket, és támpontot adhat további minták tervezéséhez.

1. MÉRÉSI ELJÁRÁS BEMUTATÁSA

A mérések alapgondolatát azok a megfigyelések szolgáltatták [1, 2, 3, 4], miszerint a Fourier-jellegű hőterjedés nem csak a korábban említett szélsőséges körülmények (rendkívül alacsony hőmérséklet, kis idő- és méretskálák) között jelenik meg, hanem akár már szobahőmérsékleten is, ahol a klasszikus elmélet által jósolt hőterjedéstől való eltérést az anyagon belüli heterogenitás okozhatja.

A fejezet első részében szó lesz a mérés során alkalmazott mérési eljárásról (flash módszer) és annak sajátosságairól. Ezt követően pedig a fejezet második felében, a mérésből kapott adatsorok feldolgozása és elemzése kap helyet.

1.1. A FLASH MÓDSZER

A hőfizikai jellemzők¹ meghatározására többfajta mérési módszert dolgoztak ki az utóbbi évtizedekben, amiknek a fejlődése a mai napig is tart. Ezen jellemzők ismerete rendkívül lényeges a különböző anyagok termikus méretezési feladataival kapcsolatban.

A mérési eljárások két fő csoportba sorolhatóak. Az egyik ilyen csoportot képezik az időben **stacionárius** hőmérséklet-eloszláson alapuló mérőberendezések. A másik nagy csoport pedig az **instacionárius** mérési eljárások, azaz ahol a hőmérséklet az idő függvényében változik. Az alkalmazott mérési eljárás az utóbbi csoportba tartozik, aminek lényege, hogy az anyagon belül lezajló, tranziens hővezetéssel kapcsolatos paraméterek mérésén alapszanak. Az ilyen típusú mérőberendezések nagy előnye a gyorsaság, kisebb érzékenység a hőveszteségekre a rövid gerjesztőimpulzusok miatt [5]. A továbbiakban az **impulzusmódszerek** alcsoportban helyet foglaló és széles körben elfogadott, használt **flash mérés** lesz bemutatva.

A flash mérési módszer² a hőmérsékletvezetési tényező meghatározásának egyik legelterjedtebb és legelfogadottabb eljárása [6]. A mérés kidolgozása Parker és társai nevéhez fűződik [7].

A módszer merőben egyszerű gondolatra épül. Lényege, hogy egy területéhez képest vékony mintadarabot egyik felszínén hőimplzussal gerjesztjük, a hátoldalon pedig mérjük a hőfokváltozást (1. ábra). Ebből tudjuk meghatározni a hőmérsékletvezetési tényezőt.



1. ábra. Az ábrán a flash módszer egyszerűsített elve látható. Az elülső felületen hat a gerjesztés, ami hatására hőmérsékletváltozás lép fel a hátoldalon. A vastagság, mint a mintadarab egyik legfontosabb paramétere, az ábrán is fel lett tüntetve.

Ez a fajta eljárás rengeteg előnnyel szolgál [5]:

¹ Hővezetési tényező, hőkapacitás és a hőmérsékletvezetési (hődiffuzivitási) tényező.

² A módszer az úgynevezett kialakuló vagy kezdetiszakasz-módszerek körébe tartozik; mivel a mérés a hőmérsékletmaximum fellépésének idejéig, illetve ezen időtartományig tart.

- Széles mérési tartományt képes átfogni. A legjobb hővezető anyagoktól kezdve a hőszigetelőkig lehetséges a mérés. A minta geometriai méreteinél van csupán megkötés, miszerint a relatíve kis méretű minta megfelelően reprezentálja a vizsgálandó anyag tulajdonságait. A széles mérési tartomány továbbá a hőmérsékletintervallumokon is megmutatkozik. A mai legkorszerűbb ilyen berendezések ultramagas hőmérsékleteken is tudnak mérni, akár 3000 °C hőmérsékletig. Valamint nagyon alacsony hőmérsékleteken, -150 °C-ig [8, 9].
- A kis méretű és egyszerű alakú mintadarab miatt a vizsgálandó anyagból elég csak kevesebb mennyiséget felhasználni a méréshez, továbbá a mintadarab elkészítése viszonylag egyszerű eszközöket igényel.
- A hőtranszport gyors lefolyása miatt a minta felülete és környezete közötti hőcsere szinte teljesen elhanyagolható.
- Méréstechnikai szempontból kedvező, hogy a hőfizikai jellemzők meghatározását időmérésre vissza lehet vezetni³.

Ezen előnyök a kutatás szempontjából jelentős hatással bírnak, mivel széles vizsgálandó anyagválasztékot biztosítanak. A vizsgálat szempontjából viszont a leglényegesebb előnye a flash mérésnek, hogy a Fourier-féle hővezetésen túli jelenségek kimutatására legalkalmasabb módszer a kis karakterisztikus idejű hőimpulzus gerjesztése miatt.

1.2. A mérés elrendezése

A mérések a BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék laborjában történtek, ahol szintén a tanszék által biztosított hőimpulzusmérő berendezés található. Az eszköz az 2. ábrán látható.

A mintatartó mozgatását a mérőberendezésben fiókszerű illeszkedéssel oldjuk meg. A berendezésben villanólámpa szolgáltatta a gerjesztőimpulzust, ami a minta elülső felületét gerjesztette. A hőmérsékletfelfutás⁴ mérése a minta hátoldalán termoelemmel történt (K-típusú). A termoelem kivezetései védőburkolat segítségével el voltak szigetelve a különböző elektromos zajok minimalizálása céljából, továbbá másik lényeges szerepe az volt, hogy a gerjesztő impulzusforrás ne tudjon semmilyen irányú zavarást bevinni a termoelemek áramkörébe. A mérésekhez elengedhetetlen volt az úgynevezett triggerjel beállítása és ismerete, azaz azé a jelé, ami megmutatja, hogy pontosan mikor történt a

³ Ellentétben az olyan eljárásoknál, ahol a hőáramot vagy a hőáramsűrűséget is meg kell határoznunk, ami sokszor körülményes folyamat. Jellemzően ilyenek a stacionárius mérési módszerek [5].

⁴ Nagyon kis hőmérséklet-változások, jellemzően pár Kelvin.



2. ábra. A mérőberendezés, mintatartó tok és az oszcilloszkóp.

gerjesztés. Ezért azt a jelet közvetlenül egy fotovoltaikus érzékelővel (ami a fény hatására feszültségértéket produkál) rögzítettük.

A mért jelek feldolgozása egy PC-oszcilloszkóp felhasználásával valósult meg, ami az előbbi 2. ábrán volt látható a berendezés mellett. A mért jelalakok feldogozásának megkönnyítése érdekében az oszcilloszkóp beállításai lehetőséget biztosítottak a zavarásokból adódó csúcsok csökkentésére aluláteresztő szűrők segítségével.

A minta rögzítése három, szimmetrikusan elhelyezett állítható pozicionáló tűvel valósult meg. A tűk rossz hővezetési tulajdonságú anyagból készültek, keresztmetszetük is a lehető legkisebb volt, hogy így is minimalizálva legyen az általuk elvezetett hő mennyisége. A tok és annak főbb részei a következő 3. ábrán látható.

A minták felületkezelése is fontos tényező volt a mérések elvégzése során. Az elülső



3. ábra. A mintatartó egység és főbb részei.

felület, ami a gerjesztést kapja, fekete grafitfestékkel lett ellátva, hogy a hőimpulzus abszorpciója még jobb legyen. A hátsó felszín, amelyik a termoelemtűkre feküdt fel, vékony ezüstréteggel lett ellátva a galvanikus kapcsolat céljából, attól függően, hogy szigetelő vagy vezető anyagtípust vizsgáltunk.



4. ábra. A mérés sematikus ábrája [2].

A hőveszteségek további minimalizálása céljából, valamint a mérési körülmények jóságának növelése érdekében a mintákat hőszigetelő gallérba helyeztük, ami az oldalukon leadott hőmennyiség minimalizálását szolgálta. A 4. ábrán látható a mérés sematikus rajza, az előbb ismertetett mérési körülmények feltüntetésével.

Látható, hogy a mérési elrendezés során számos faktort kell figyelembe venni, amik

befolyásolhatják és hibával terhelhetik a mérési eredményeinket. Összegyűjtve csak a leglényegesebbeket:

- A befogásánál fellépő hőhíd.
- Minta felszíne és környezete közötti hőcsere.
- Termoelemek hőelvezetése.
- Minta felszínére felvitt vezető, illetve abszorpciót növelő rétegek vizsgálandó anyagtól eltérő termikus tulajdonságai.
- Impulzushőforrás a felszín mentén nem egyenletes.

Ezen tényezőkkel Faludi Árpád doktori értekezésében részletesen foglalkozik [5]. A vizsgálatoknak az lett a konklúziója, hogy ezek a tényezők elhanyagolhatóak vagy minimálisak. Azoknál a részeknél, ahol a hiba felléphet, a tanulmányban meghatározott értékhatárok betartására törekedtünk.

1.3. Mérés kiértékelése

A mérések kiértékelése az alábbi szisztéma szerint zajlott. Az előbb említett PCoszcilloszkóp rögzítette a mért jelalakot. A kapott adatokat MATLAB programkörnyezetben beolvastattuk, majd erre a jelre illesztettük rá első lépésben a klasszikus Fourieregyenlet megoldását. Ha a megoldás nem közelítette elég jól a mért jelet (eltért tőle), akkor a 2. fejezetben ismertetett GK-egyenlet megoldásai következtek. Ez volt az "egyenletek illesztése" fázis, mikor azt kerestük, melyik hővezetési egyenlet írja le a mintához tartozó hőmérséklet-felfutást.

A következő részben mutatjuk be a jelen kötet előző fejezetében tárgyalt hővezetési egyenletek megoldását és a hozzá tartozó módszert.

1.3.1. HŐVEZETÉSI EGYENLETEK MEGOLDÁSA

Az egyenletek megoldása explicit végesdifferencia-módszerrel történt. A módszer előnyei például a könnyű diszkretizálás, jól követhető pontossága és az egyszerű programozhatósága. A használt numerikus módszer tulajdonságai (konvergencia, konzisztencia, numerikus stabilitás, dimenziótlanítás) és részletes tárgyalása jelen kötet előző fejezetében található meg.

Peremfeltételek A hőáramra vonatkozó peremfeltételt a gerjesztőimpulzus szolgáltatta a minta előlapján. A gerjesztés alakját az alábbi módon definiáltuk:

$$q_0(t) = q(0,t) = \begin{cases} q_{\max} \left[1 - \cos\left(2\pi \cdot \frac{t}{t_p}\right) \right], & \text{ha } 0 < t \le t_p \\ 0, & \text{ha } t > t_p. \end{cases}$$

Itt t_p az impulzus szélessége. Az 5. ábrán látható a valós gerjesztés képe és a modellezett alakja. Látható, hogy a modellezett karakterisztikája eltér a valóstól. Viszont a gerjesztés felfutása nagyon gyors, 0,01 s, ezért ilyen időtartam alatt nem játszik fontos szerepet a jel pontos alakja. Másik fontos szempont a numerikus megoldás szempontjából lényeges. Ha a valós gerjesztést használnánk peremfeltételként, akkor lenne benne egy hirtelen ugrás (nulla idő alatt ugrik a maximális értékre, ezért itt a derivált értéke végtelen lenne), amitől a megoldás az elején instabil lenne.



5. ábra. A valós gerjesztési jelalak (bal) és a modellezett jelalak (jobb) [2, 10].

A hátoldalon adiabatikus vagy hűlést leíró peremfeltétel lett leírva, a mérés sajátosságaitól függően. A feltételek az alábbi alakban lettek felvéve; adiabatikus esetben q(x = L, t) = 0, ahol L a minta vastagsága. Hűlés esetén pedig a Newton-féle lehűlési törvény szerint $q(x = L, t) = h(T - T_0)$, ahol h a hőátadási tényező, T_0 pedig a környezeti hőmérséklet.

Kezdeti feltétel Minden mező homogén t = 0-ban. Az egyenletek numerikus megoldásokhoz dimenziótlan formalizmust használtunk, melyet jelen kötet előző fejezetében már bemutattunk. Ez megkönnyíti és kényelmesebbé teszi az egyenletek kezelését.

MÉRÉSEK BEMUTATÁSA

A mérések során több különböző típusú mintán végeztünk méréseket. A minták kiválasztásánál az elsődleges szempont a változatos anyagi felépítés és az alkalmazási területeiknek sokszínűsége volt.

A minták a következőek voltak: kondenzátorok, félvezetők, fémhabok és kőzetek. A következő alfejezetekben ismertetjük a különböző mintadarabok legfontosabb jellemzőit, majd a kiértékelés után kapott adatsorokat. Mindegyik mintacsoport ismertetése után egy összefoglaló táblázatban mutatjuk be az ahhoz tartozó hővezetési paramétereket.

1.4. Kondenzátorminták

A tanszéken végzett klasszikus hővezetési egyenlettől való eltérések megfigyelését célzó kutatások kiindulópontját képezte ez a mintacsoport. Az első sikeres mérés a [2] cikkben lett közölve. Az általunk vizsgált minták közül ez rendelkezik a legjobban jellemezhető heterogén szerkezettel (6. ábra). Itt párhuzamos rétegekben történik a hővezetés, egy minta a mért átmérőtartományokban nagyságrendileg ezer alumínium-polisztirol réteget tartalmaz. A három kondenzátormintához tartozó geometriai adatokat az 1. táblázat tartalmazza.



6. ábra. Kondenzátorminta és nagyított képe. Nagyítást követően még jobban megfigyelhető a réteges szerkezet.

	Befoglaló méret [mm]	Vastagság [mm]
1. kondenzátor	ø19,1	3,69
2. kondenzátor	ø20,25	2,9
3. kondenzátor	ø18,9	3,88

1. táblázat. Kondenzátormintákhoz tartozó geometriai jellemzők.

Első kondenzátorminta: A 7. ábrán látható a mérési adatsor, amelyet a kismértékben zavarással terhelt jel mutat. A szaggatott vonal a hővezetési egyenletekből történő illesztést jelöli. Látható, hogy a felső ábrán a Fourier-egyenlettel történő illesztés nem adja vissza a kapott jelalakot, viszont a GK-egyenlettel történő illesztés teljesen rásimul a görbére.

Harmadik kondenzátorminta: A harmadik kondenzátorminta esetében a 8. ábrán látható, hogy a Fourier-egyenlettel történő illesztés nem tudja visszaadni a jelenséget, viszont a GK-egyenlet igen. A korábbi kutatások is ezt a jelenséget figyelték meg ugyanezen a mintadarabon [2]. Összehasonlításként a publikált eredmény a 9. ábrán látható.

Az egyes mérésekhez tartozó hővezetési paraméterek a jobb átláthatóság szempontjából a 2. táblázatban vannak összefoglalva.



7. ábra. Az első kondenzátormintán mért hátoldali hőmérséklet-felfutás diagramjai láthatóak, valamint az arra történő hővezetési egyenletek illesztése. A felső ábrán a Fourieregyenlettel történő illesztés látható. Az alsón pedig a legjobban illeszkedő GK-egyenlet figyelhető meg. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: L = 3.68 mm, $\alpha_{\text{Fourier}} = 2.2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\alpha_{\text{GK}} = 1.9 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\tau = 0.04 \text{ s}$, $\kappa = 0.8125 \text{ mm}^2$.



8. ábra. A harmadik kondenzátor esetében a hátoldali hőmérséklet-felfutás képei, és az arra történő hővezetési egyenletek illesztése. A felső ábrán a Fourier-egyenlet illesztés látható. Az alsón pedig a legjobb GK-egyenlet illesztése figyelhető meg. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: L = 3.8 mm, $\alpha_{\text{Fourier}} = 5 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\alpha_{\text{GK}} = 4 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\tau = 0.05 \text{ s}$, $\kappa = 0.1155 \text{ mm}^2$.



9. ábra. A harmadik kondenzátor mintadarab [2] cikkben mért diagramja és az arra történő hővezetési egyenletek illesztése. A felső ábrán a Fourier-egyenlettel történő illesztés, az alsón pedig a legjobban illeszkedő GK-egyenletet. A diagram közvetlenül a cikkben foglalt formátumban került megjelenítésre. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: L = 3.9 mm, $\alpha_{\text{Fourier}} = 2.144 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \ \alpha_{\text{GK}} = 1.958 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \ \tau = 0.51 \text{ s}, \ \kappa = 0.153 \text{ mm}^2.$
| | | Fourier | | Guyer-Krumh | ansl | | |
|------------------------------|----------------|---|---|-----------------------|--|----------------------------------|---------------------------------------|
| Mintadarab megnevezése | Vastagság [mm] | Hőfokvezetési
tényező
$10^{-6} \frac{m^2}{s}$ | Hőfokvezetési
tényező
$10^{-6} \frac{m^2}{s}$ | Relaxációs
idő [s] | Disszipációs
paraméter [mm ²] | Hőátadási
tényező (\hat{h}) | Aszimptotikus
hőmérséklet
arány |
| Egyes kondenzátor 09/12/I. | 3.68 | 2.2 | 1.9 | 0.2851 | 0.812544 | - | - |
| Egyes kondenzátor 09/12/II. | 3.68 | 2.2 | 1.9 | 0.2851 | 0.812544 | - | - |
| Egyes kondenzátor 09/12/III. | 3.68 | 2.2 | 1.9 | 0.2851 | 0.812544 | - | - |
| Kettes kondenzátor 09/12/I. | 2.9 | 0.22 | - | - | - | $4 \cdot 10^{-5}$ | 0.95 |
| Kettes kondenzátor 09/12/II. | 2.9 | 0.22 | - | - | - | $4 \cdot 10^{-5}$ | 0.95 |
| Hármas kondenzátor 09/12/I. | 3.8 | 5 | 4 | 0,1805 | 1.1552 | $2 \cdot 10^{-5}$ | 0.985 |
| Hármas kondenzátor 09/12/II. | 3.8 | 5 | 4 | 0,1805 | 1.1552 | - | - |

2. táblázat. Kondenzátorminták hővezetési paraméterei. A mérés ideje a minta neve után van megjelölve hónap/nap formátumban. A római szám a mérés sorszámát jelöli. Ahol nem szerepel érték, ott nem volt indokolt azon paraméter meghatározása. A mérések 2016-ban történtek.

1.5. Félvezetők

A csoportban az első minta a félvezetők (10. ábra), amelyek geometriai méretei a 3. táblázatban láthatóak.



10. ábra. A félvezető lapka és nagyított képe.

	Befoglaló méret [mm]	Vastagság [mm]
Félvezető lapka	12 x 12	1,65

3. táblázat. Félvezető lapka geometriai értékei.

A félvezető mintadarabok minden esetben Fourier-jelleget mutattak, nem volt szükség a GK-egyenlettel történő illesztésre. A 11. ábrán látható a mérés során készült hőmérséklet-felfutás és az arra illesztett Fourier-egyenlet. A klasszikus hővezetési egyenlet nagyon jól visszaadja a mért jelleget.



11. ábra. Félvezető lapkán mért hőmérséklet-felfutás és a rá illeszkedő Fourier-egyenlet. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: $L = 1.65 \text{ mm}, \alpha = 0.28 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \hat{h} = 1.1 \cdot 10^{-4}$.

1.6. Al-globocer fémhab

A következő anyagcsoport a fémhabok voltak. Elsődleges szempont volt a fémhabok esetében, hogy a mintadarab kellően reprezentálja az anyagot általánosan jellemző tulajdonságokat. Az első vizsgált minta egy Al-globocer fémhab (12. ábra) volt, ami viszonylag tömör szerkezete miatt megfelelőnek bizonyult a mérések elvégzéséhez. Geometriai adatok a 4. táblázatban találhatóak.



12. ábra. Alumínium-globocer fémhab nagyított képe. Nagyítás követően még jobban megfigyelhető az inhomogén szerkezet.

	Befoglaló méret [mm]	Vastagság [mm]
Al 99,5 globocer	16,5 x 12,4	4,9

4. táblázat. Al 99,5 globocer fémhab geometriai jellemzői.

A 13. ábrán látható az Al-globocer fémhab mérési adatsora és a rá illesztett hővezetési egyenletek. Megfigyelhető a felső ábrán, hogy a klasszikus egyenlettől az eltérés akkor jelentkezik, amikor az aszimptotikus hőmérsékletre kezdene beállni a minta. A GK-egyenlet viszont ezt a hőmérséklet-felfutást is tudja kezelni.



13. ábra. Az Al-globocer fémhab hőmérsékletfelfutásának mérése és arra történő hővezetési egyenletek illesztése. A felső ábrán a Fourier-egyenlet illesztése látható. Az alsón pedig az a GK-egyenlet figyelhető meg, amely legjobban illeszkedik. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: L = 5.2 mm, $\alpha_{\text{Fourier}} = 9 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\alpha_{\text{GK}} = 7.7 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\tau = 0.053 \text{ s}$, $\kappa = 3.001 \text{ mm}^2$.

1.7. Fémhab

Egy másik típusú fémhabot is vizsgáltunk, amely képe a 14. ábrán látható, a geometriai tulajdonságai pedig az 5. táblázatban szerepelnek. Ez az előbbihez képest ritkább és porózusabb szerkezettel jellemezhető. A hővezetési tulajdonsága nagyon erőteljes eltérést mutatott (15. ábra).

A 15. ábrán látszik, hogy a felfutásnál és a hőmérsékletmaximum-értéknél is eltérés figyelhető meg a klasszikus egyenlettől. A GK-egyenlet viszont a megfelelő paraméterek-





14. ábra. Fémhab és nagyított képe.

	Befoglaló méret [mm]	Vastagság [mm]
Fémhab	19,6 x 12,6	5,2

5. táblázat. Fémhab geometriai jellemzői.

kel vissza tudja adni a mért jelleget.

A következőkben pedig megtalálhatók táblázatos formában (6. táblázat) a vizsgált mintákhoz tartozó hővezetési paraméterek.



15. ábra. A fémhab hőmérséklet-felfutásának mérése és arra történő hővezetési egyenletek illesztése. A felső ábrán a Fourier-egyenlet illesztése látható. Az alsón pedig az a GK-egyenlet figyelhető meg, amely legjobban illeszkedik. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: $L = 5.1 \text{ mm}, \, \alpha_{\text{Fourier}} = 2.2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \, \alpha_{\text{GK}} = 2.2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \, \tau = 0.06 \text{ s}, \, \kappa = 3.38 \text{ mm}^2.$

		Fourier		Guyer-Krumh	ansl		
Mintadarab megnevezése	Vastagság [mm]	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Relaxációs idő [s]	Disszipációs paraméter [mm ²]	Hőátadási tényező (\hat{h})	Aszimptotikus hőmérséklet arány
Félvezető 10/12/II.	1.65	0.28	-	-	-	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.92
Félvezető 10/12/III.	1.65	0.28	-	-	-	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.92
Félvezető 10/12/IV.	1.65	0.28	-	-	-	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.92
Al-globocer fémhab 10/14/I.	5.2	9	7.7	0.1861	3.001	$4.5 \cdot 10^{-5}$	0.97
Al-globocer fémhab 10/14/II.	5.2	9	7.7	0.1861	3.001	$4.5 \cdot 10^{-5}$	0.97
Al-globocer fémhab 10/14/III.	5.2	9	7.7	0.1861	3.001	$4.5 \cdot 10^{-5}$	0.97
Al-globocer fémhab 10/14/IV.	5.2	9	7.7	0.1861	3.001	$4.5 \cdot 10^{-5}$	0.97
Fémhab 02/08/I.	5.1	2.2	2.2	0.06	3.8	$3 \cdot 10^{-4}$	0.76
Fémhab 02/12/II.	5.1	2.5	2.5	0.025	1.96	$3.4 \cdot 10^{-4}$	0.745
Fémhab 02/12/III.	5.1	2.5	2.5	0.025	1.96	$4.7 \cdot 10^{-4}$	0.7

6. táblázat. Félvezető és fémhab minták hővezetési paraméterei. A mérés ideje a minta neve után van megjelölve hónap/nap formátumban. A római szám a mérés sorszámát jelöli. Ahol nem szerepel érték, ott nem volt indokolt azon paraméter meghatározása. A mérések 2016-ban történtek.

1.8. KŐMINTÁK

A következő mintacsalád az előző kettővel szemben jelentősebb szerepet töltött be a mérések során. A kőmintákon végzett mérések folyamán nagyon kedvező eredményeket kaptunk, amelyből cikk is született a kőzetmechanikai konferenciára, és nemzetközi termodinamikai konferencián⁵ is bemutatásra kerültek [1, 11], amelyek után ebben az irányban folytattuk a vizsgálatainkat. A nagyszámú mérési eredményeket többfajta kőzetmintán két fejezetben mutatjuk be. Az első fejezetben kapnak helyet azok a mérések, amelyek alatt csupán a különböző anyagfajták közötti eltéréseket kerestük. A második pedig már célzottan τ , κ anyagi paraméterek vastagságfüggésének kimutatására irányult. Ez oly módon valósult meg, hogy egy típusú kőzetből több különböző vastagságú minta állt rendelkezésünkre, és a vastagság változásával figyeltük a hátoldali hőmérséklet-felfutást.

1.8.1. KŐMINTÁK ANYAGI PARAMÉTEREINEK VIZSGÁLATA

Egy korábbi tanulmány során öt különböző kőmintán végeztünk méréseket, amelyek eredményeit az [1] cikkben közöltük. A minták és geometriai jellemzőik a 7. táblázatban láthatóak.

	Befoglaló méret [mm]	Vastagság [mm]
Kantavári mészkő	Ø8,8	1,4
Villányi mészkő	Ø8,3	1,2
Vöröses ritkaporfíros monzogránit	ø8,4	1,4
Leukokrata slírekkel	Ø8,3	1,75
Bodai vörös agyagkő	ø8,35	1,5

7. táblázat. Kőzetek anyagi paramétereinek vizsgálata közben használt minták geometriai jellemzői.

A kutatás eredménye az lett, hogy az öt mintából négy mutatta egyértelműen a Fourier-egyenlettől való eltérést. Kivételt képzett a Kantavári mészkő (16. ábra), amely további vizsgálat tárgyát jelenti, ugyanis a Fourier-egyenlet a felfutó ágra szépen illesz-kedett, de az aszimptotika elsőre anomálisnak látszik (18. ábra).

A vizsgálatok eredménye tükrében választottuk ki azt a kőzetmintát bemutatásra, amely legjobban szemlélteti a klasszikus egyenlettől való eltérést. Az eredmények azt mutatták, hogy a Villányi mészkő produkálja a legerősebb eltérést a Fourier-egyenlettől (17. ábra).

Annak érdekében, hogy a legprecízebb mérési eredményeket kapjuk ezen minta ese-

⁵14th Joint European Thermodynamics Conference 2017, Budapest



16. ábra. Kantavári mészkő távoli és mikroszkóppal készített képe.



17. ábra. Villányi mészkő távoli és mikroszkóppal készített képe.



18. ábra. A Kantavári mészkőn végzett mérés diagramja és az arra történő Fourieregyenlet-illesztés látható. Az adatsorhoz még csak ennek az egyenletnek az illesztése történt meg. A jelenség alakulása még vizsgálat tárgyát képezi.

tében, itt is több óra telt el a különböző mérési időpontok között, azaz hagytuk a mintát relaxálni a környezetével és a berendezéssel együtt.

A villányi mészkő esetében – a 19. ábrán látható módon – a Fourier-egyenlettel tör-

ténő illesztés sokkal nagyobb eltérést mutat, mint a kondenzátoros minták esetében. A GK-egyenlet viszont ezt is szemmel láthatóan vissza tudja adni. Ugyanerre a megfigyelésre jutottunk a korábbi mérések eredményével (20. ábra).

A 20. ábrán látható mérési eredmény, majdnem teljesen jellegre helyesen tükrözi a mostani mérésekként kapott diagramokat. Továbbá azt is kijelenthetjük, hogy ennél a mintánál jelentősebb mértékben jelent meg a klasszikus Fourier-egyenlettől való eltérés. A különböző kövek hővezetési tulajdonságait jellemző paraméterek a 8. és 9. táblázatban találhatóak.



19. ábra. A Villányi mészkőn mért diagramja és az arra történő hővezetési egyenletek illesztése. A felső ábrán a Fourier-egyenlettel történő illesztés látható. Az alsón pedig a legjobban illeszkedő GK-egyenlet figyelhető meg. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: $L = 1.2 \text{ mm}, \alpha_{\text{Fourier}} = 0.3 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \alpha_{\text{GK}} = 0.2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \tau = 0.12 \text{ s}, \kappa = 0.5096 \text{ mm}^2$.



20. ábra. A Villányi mészkő mérés után megkapott diagramja és az arra történő egyenletek illesztése. A legfelső ábrán a klasszikus Fourier-egyenlettel illesztés, az alsón pedig a legjobban illeszkedő GK-egyenletet látható. A diagram az [1] cikkben foglalt formátumban került megjelenítésre. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: L = 1.4 mm, $\alpha_{\text{Fourier}} =$ $= 0.3 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \alpha_{\text{GK}} = 0.3 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \tau = 1.3$ s, $\kappa = 0.882$ mm².

		Fourier	C				
Minta megnevezése	Vastagság [mm]	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Relaxációs idő [s]	Disszipációs paraméter [mm ²]	Hőátadási tényező (\hat{h})	Aszimptotikus hőmérséklet- arány
Bodai vörös agyagkő 2015/11/22/I.	1.45	0.59	0.59	0.07	0.233	$4 \cdot 10^{-4}$	-
Bodai vörös agyagkő 2015/11/22/II.	1.45	0.64	0.64	0.14	0.378	$3.1 \cdot 10^{-4}$	-
Bodai vörös agyagkő 2016/02/08/I.	1.45	0.1	0.1	0.013	0.073	$1.5 \cdot 10^{-4}$	0.88
Bodai vörös agyagkő 2016/02/08/II.	1.45	0.1	0.1	0.013	0.073	$1.5 \cdot 10^{-4}$	0.88
Bodai vörös agyagkő 2016/02/12/I.	1.45	0.075	0.075	0.017	0.129	-	-
Bodai vörös agyagkő 2016/02/12/II.	1.45	0.078	0.078	0.017	0.135	-	-
Bodai vörös agyagkő 2016/02/12/III.	1.45	0.08	0.08	0.017	0.135	$4 \cdot 10^{-5}$	0.95
Bodai vörös agyagkő 2016/02/22/I.	1.45	0.085	0.085	0.02	0.115	-	-
Bodai vörös agyagkő 2016/02/22/II.	1.45	0.1	0.1	0.02	0.105	-	-
Bodai vörös agyagkő 2016/02/22/III.	1.45	0.075	0.075	0.018	0.105	$5 \cdot 10^{-5}$	0.91
Leukokrata slírekkel 2015/11/22/I.	1.75	0.8	0.8	0.076	0.398	$3 \cdot 10^{-4}$	-
Leukokrata slírekkel 2015/11/22/II.	1.75	0.8	0.8	0.08	0.382	$2.1 \cdot 10^{-4}$	-
Leukokrata slírekkel 2016/02/08/I.	1.75	0.6	0.6	0.12	0.505	-	-
Leukokrata slírekkel 2016/02/08/II.	1.75	0.61	0.61	0.21	0.949	-	-
Leukokrata slírekkel 2016/02/12/I.	1.75	0.46	0.46	0.17	0.980	-	-
Leukokrata slírekkel 2016/02/12/II.	1.75	0.57	0.57	0.17	0.919	$5.5 \cdot 10^{-5}$	-
Leukokrata slírekkel 2016/02/22/I.	1.75	0.5	0.5	0.17	0.918	-	-
Leukokrata slírekkel 2016/02/22/II.	1.75	0.52	0.52	0.17	0.857	-	-
Vöröses ritkaporfílos monzogránit 2015/11/22/I.	1.4	1.2	1.2	0.16	0.421	$5.5 \cdot 10^{-4}$	-
Vöröses ritkaporfílos monzogránit 2016/02/08/I.	1.4	0.9	0.8	0.12	0.332	-	-
Vöröses ritkaporfílos monzogránit 2016/02/22/I.	1.4	0.5	0.5	0.16	0.490	-	-
Vöröses ritkaporfílos monzogránit 2016/02/22/II.	1.4	0.3	0.3	0.1	0.490	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.9
Vöröses ritkaporfílos monzogránit 2016/02/22/III.	1.4	0.45	0.45	0.16	0.490	$4 \cdot 10^{-5}$	0.98
Kantavári mészkő 2016/02/08/I.	1	0.59	-	-	-	$2 \cdot 10^{-4}$	0.95
Kantavári mészkő 2016/02/12/I.	1	0.59	-	-	-	$5 \cdot 10^{-5}$	0.98
Kantavári mészkő 2016/02/12/II.	1	0.64	-	-	-	$5 \cdot 10^{-5}$	0.98
Kantavári mészkő 2016/02/22/I.	1	0.6	-	-	-	-	-
Kantavári mészkő 2016/02/22/II.	1	0.63	-	-	-	-	-

8. táblázat. Kőzetminták hővezetési paraméterei. A mérés ideje a minta neve után van megjelölve hónap/nap formátumban. A római szám a mérés sorszámát jelöli. Ahol nem szerepel érték, ott nem volt indokolt azon paraméter meghatározása. A mérések 2016-ban történtek.

		Fourier	(Guyer-Krumha	nsl		
Minta megnevezése	Vastagság [mm]	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Relaxációs idő [s]	Disszipációs paraméter [mm ²]	Hőátadási tényező (\hat{h})	Aszimptotikus hőmérséklet- arány
Villányi mészkő 2016/02/08/I.	1.4	0.36	0.36	0.2	0.882	-	-
Villányi mészkő 2016/02/12/I.	1.4	0.3	0.3	0.2	0.882	-	-
Villányi mészkő 2016/02/12/II.	1.4	0.3	0.3	0.2	0.882	$1.85 \cdot 10^{-4}$	0.85
Villányi mészkő 2016/02/22/I.	1.4	0.26	0.26	0.14	0.664	-	-
Villányi mészkő 2016/02/22/II.	1.4	0.26	0.26	0.14	0.664	-	-
Villányi mészkő 2016/02/26/I.	1.4	0.3	0.2	0.12	0.509	7.10^{-5}	0.915
Villányi mészkő 2016/02/26/II.	1.4	0.3	0.2	0.12	0.509	7.10^{-5}	0.915
Villányi mészkő 2016/02/26/III.	1.4	0.3	0.2	0.12	0.509	7.10^{-5}	0.915
Villányi mészkő 2016/02/26/IV.	1.4	0.3	0.2	0.12	0.509	7.10^{-5}	0.915

9. táblázat. Kőzetminták hővezetési paraméterei. A mérés ideje a minta neve után van megjelölve hónap/nap formátumban. A római szám a mérés sorszámát jelöli. Ahol nem szerepel érték, ott nem volt indokolt azon paraméter meghatározása. A mérések 2016-ban történtek.

1.8.2. KŐMINTÁK HŐVEZETÉSI TULAJDONSÁGAINAK VASTAGSÁGFÜGGÉSE

A következő mérések során többfajta kőzettípus hővezetési tulajdonságait vizsgáltuk a vastagság függvényében. Az ugyanolyan átmérőjű minták nagymértékben megkönnyítették a gallérok előkészítését, mivel elég volt csak egyfajta gallért használni az összes mintához. A megelőző próbamérések során a vulkanizált gumigallérra esett a választás, annak formálhatósága, rugalmassága és nagy hőszigetelő tulajdonságai miatt. A vizsgálatok során a mérés további finomítása is szerepet játszott. Ez abban mutatkozott meg, hogy a mérőberendezés elektronikája által keltett hő kiküszöbölése végett a berendezést tovább tartottuk kikapcsolt állapotban. Ennek segítségével a mérés közbeni melegedés hatása jelentősen csökkent. Továbbá a mérések periódusa is sokkal pontosabban lett kivitelezve. Harminc, illetve negyven perc elteltével történtek a mérések a berendezés visszakapcsolása után. Ez a gerjesztő fényforrás egyenletes erősségért volt felelős. Ezen kettő finomításnak köszönhetően az illesztési feladat egyszerűbben történt, ellenben nagyban megnövelte a mérés idejét.

Az alábbi ábrákon láthatóak a különböző minták, továbbá a hozzájuk tartozó kinagyított képen lehet megfigyelni a jellemző szerkezetüket.



21. ábra. Sárgásfehér mészkő. Származási hely: Máriagyűdi kőbánya.



22. ábra. Szürke középszemcsés homokkő. Származási hely: Közép-magyarországi mélyfúrás.



23. ábra. Világosszürke gránátos csillámpala. Származási hely: Közép-magyarországi mélyfúrás.



24. ábra. Vörösesbarna aleurolit. Származási hely: BAF-2 fúrás.



25. ábra. Sötétszürke bazalt. Származási hely: Máriagyűdi kőbánya.



26. ábra. Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő. Származási hely: Középmagyarországi mélyfúrás.



27. ábra. Világosszürke dácit. Származási hely: Közép-magyarországi mélyfúrás.

	Befoglaló méret [mm]	Vastagság [mm]
Sárgásfehér mészkő	ø24,53	3,85
Sárgásfehér mészkő	ø24,5	2,85
Sárgásfehér mészkő	ø24,61	2,65
Sárgásfehér mészkő	ø24,59	2,15
Szürke középszemcsés homokkő	ø24,53	3,71
Szürke középszemcsés homokkő	ø24,58	2,74
Szürke középszemcsés homokkő	ø24,6	1,91
Világosszürke gránátos csillámpala	ø24,6	3,8
Világosszürke gránátos csillámpala	ø24,45	2,75
Világosszürke gránátos csillámpala	ø24,59	1,9
Vörösesbarna aleurolit	ø24,45	3,74
Vörösesbarna aleurolit	ø24,48	2,31
Vörösesbarna aleurolit	ø24,6	1,96
Sötétszürke bazalt	ø24,71	3,84
Sötétszürke bazalt	ø24,46	2,75
Sötétszürke bazalt	ø24,6	1,86
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő	ø24,88	3,9
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő	ø24,55	3,8
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő	ø24,62	3,05
Világosszürke dácit	ø24,66	3,82
Világosszürke dácit	ø24,42	2,74
Világosszürke dácit	ø24,46	1,9

10. táblázat. Kőzetek anyagi paramétereinek vizsgálata közben használt minták geometriai jellemzői.

Az eredmények kiértékelése során a Sötétszürke bazalt és a Szürke középszemcsés homokkő mutatott a Fourier-egyenlettől való eltérést; előbbi nagyobb mértékben. A többi mintáról általánosan elmondható, hogy a klasszikus egyenlet jól vissza tudta adni a mért jelalakokat.



28. ábra. A Sötétszürke bazalt mérés után kapott diagramja és az arra történő egyenletek illesztése. A legfelső ábrán a klasszikus Fourier-egyenlettel illesztés, az alsón pedig a legjobban illeszkedő GK-egyenlet látható. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: L = 1.86 mm, $\alpha_{\text{Fourier}} = 0.7 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \, \alpha_{\text{GK}} = 0.5 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}, \, \tau = 0.18 \text{ s}.$

A Sötétszürke bazalt hőmérséklet-felfutását és az arra történő illesztéseket a 28. ábra mutatja. Látható, hogy a hőmérsékletfelfutás maximumértékénél ad eltérő eredményt a klasszikus egyenlet, viszont a GK pontosan le tudja írni a mért jelet.

A másik érdekes eredmény a Sárgásfehér mészkő esetében született. Itt megvizsgáltuk a különböző gallérok tulajdonságát és annak fontosságát. Gallér nélkül a mintadarab hűlése közben láthatunk egyfajta oszcillációt. Ilyen fajta kiugró esetet egyedül ezen a mintadarabon rögzítettünk. A mérések ismétlésével is feltűnik az oszcilláció (29. ábra). A jelenség magyarázata lehet a műszerben lévő kazettásan elhelyezett mintatartó, ami körül a bennlévő hő cirkulál.



29. ábra. A Sárgásfehér mészkő mérés után kapott diagramja és az arra illesztett GKegyenlet. Látható a bejelölt részen az említett hőcirkulációból adódó hőmérséklethullámzás hűlés közben. Az adatsorhoz tartozó paraméterek: L = 2.85 mm, $\alpha_{\text{Fourier}} = 1.3 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\alpha_{\text{GK}} = 1 \cdot 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$, $\tau = 0.053 \text{ s}$.

A következő 11., 12. és 13. táblázatban három oldalon vannak összefoglalva az egyes mérési eredmények hővezetési paraméterei.

		Fourier	Guyer-Krumhansl				
Minta megnevezése	Vastagság [mm]	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Relaxációs idő [s]	Disszipációs paraméter [mm ²]	Hőátadási tényező (\hat{h})	Aszimptotikus Hőmérséklet- arány
Sárgásfehér mészkő 09/27/I.	2.15	1.3	-	-	-	$6.5 \cdot 10^{-5}$	0.985
Sárgásfehér mészkő 09/27/II.	2.15	1.3	-	-	-	7.10^{-5}	0.985
Sárgásfehér mészkő 09/27/III.	2.15	1.3	-	-	-	7.10^{-5}	0.985
Sárgásfehér mészkő 09/27/I.	2.65	1.35	-	-	-	$4.5 \cdot 10^{-5}$	0.96
Sárgásfehér mészkő 09/27/II.	2.65	1.35	-	-	-	$4.5 \cdot 10^{-5}$	0.97
Sárgásfehér mészkő 09/27/III.	2.65	1.35	-	-	-	$4.5 \cdot 10^{-5}$	0.97
Sárgásfehér mészkő - gallér nélkül 09/27/I.	2.85	1.3	1	0.053	-	$4.2 \cdot 10^{-5}$	0.945
Sárgásfehér mészkő - gallér nélkül 09/27/II.	2.85	1.3	1	0.053	-	$4.2 \cdot 10^{-5}$	0.945
Sárgásfehér mészkő - gallér nélkül 09/27/III.	2.85	0.9	-	-	-	$3 \cdot 10^{-5}$	0.975
Sárgásfehér mészkő 09/27/I.	2.85	1	-	-	-	-	-
Sárgásfehér mészkő 09/27/II.	2.85	1	-	-	-	-	-
Sárgásfehér mészkő 09/27/III.	2.85	1	-	-	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.98
Sárgásfehér mészkő 09/27/I.	3.85	1.2	-	-	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.99
Sárgásfehér mészkő 09/27/II.	3.85	1.2	-	-	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.99
Sárgásfehér mészkő 09/27/III.	3.85	1	1.1	0.18	-	$-1.1 \cdot 10^{-5}$	1.04
Sötétszürke bazalt 10/03/I.	1.86	0.7	0.5	0.18	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.945
Sötétszürke bazalt 10/03/II.	1.86	0.7	0.5	0.18	-	$9.5 \cdot 10^{-5}$	0.925
Sötétszürke bazalt 10/03/III.	1.86	0.7	0.5	0.18	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.94
Sötétszürke bazalt 10/03/I.	2.75	0.7	0.6	0.14	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.98
Sötétszürke bazalt 10/03/II.	2.75	0.7	0.6	0.14	-	$4 \cdot 10^{-5}$	0.98
Sötétszürke bazalt 10/03/III.	2.75	0.7	0.6	0.14	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.99
Sötétszürke bazalt 10/03/I.	3.84	0.7	0.7	0.14	-	-	1.05
Sötétszürke bazalt 10/03/II.	3.84	0.7	0.7	0.14	-	$1 \cdot 10^{-5}$	1.03
Sötétszürke bazalt 10/03/III.	3.84	0.7	0.7	0.14	-	1.10^{-5}	0.99

11. táblázat. Kőzetminták vastagságfüggése közben vizsgált mintadarabok hővezetési paraméterei. A mérés ideje a minta neve után van megjelölve hónap/nap formátumban. A római szám a mérés sorszámát jelöli. Ahol nem szerepel érték, ott nem volt indokolt azon paraméter meghatározása. A mérések 2017-ben történtek.

		Fourier	Guyer-Krumhansl				
Minta megnevezése	Vastagság [mm]	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Hőfokvezetési tényező $10^{-6} \frac{m^2}{s}$	Relaxációs idő [s]	Disszipációs paraméter [mm ²]	Hőátadási tényező (\hat{h})	Aszimptotikus Hőmérséklet arány
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/I.	1.9	0.7	-	-	-	7.10^{-5}	0.97
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/II.	1.9	0.7	-	-	-	$8 \cdot 10^{-5}$	0.97
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/III.	1.9	0.7	-	-	-	$8 \cdot 10^{-5}$	0.97
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/I.	2.75	1	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.97
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/II.	2.75	1	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.99
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/III.	2.75	1	-	-	-	$8 \cdot 10^{-5}$	0.99
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/I.	3.8	0.55	-	-	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.97
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/II.	3.8	0.55	-	-	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.97
Világosszürke gránátos csillámpala 09/28/III.	3.8	0.55	-	-	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.965
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/I.	1.91	1	0.9	0.14	-	$8 \cdot 10^{-5}$	0.945
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/II.	1.91	1	0.9	0.14	-	$8 \cdot 10^{-5}$	0.95
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/III.	1.91	1	0.9	0.14	-	$7 \cdot 10^{-5}$	0.965
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/I.	2.74	1.4	-	-	-	$8 \cdot 10^{-5}$	0.965
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/II.	2.74	1.4	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.965
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/III.	2.74	1.4	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.965
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/I.	3.71	1.4	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.95
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/II.	3.71	1.4	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.95
Szürke középszemcsés homokkő 10/05/III.	3.71	1.4	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.95
Világosszürke dácit 10/14/I.	3.82	0.6	-	-	-	60	1.09
Világosszürke dácit 10/14/II.	3.82	0.6	-	-	-	60	1.09
Világosszürke dácit 10/14/III.	3.82	0.6	-	-	-	60	1.09

12. táblázat. Kőzetminták vastagságfüggése közben vizsgált mintadarabok hővezetési paraméterei. A mérés ideje a minta neve után van megjelölve hónap/nap formátumban. A római szám a mérés sorszámát jelöli. Ahol nem szerepel érték, ott nem volt indokolt azon paraméter meghatározása. A mérések 2017-ben történtek.

		Fourier	Guy	er-Krumh	ansl		
	Vectorofe	Hőfokvezetési	Hőfokveze-	Relaxá-	Disszipációs	Hőátadási	Aszimptoti-
Minta megnevezése	vastagsag	tényező	tési tényező	ciós	paraméter	tényező	kus hőmér-
	[11111]	$10^{-6} \frac{m^2}{s}$	$10^{-6} \frac{m^2}{s}$	idő [s]	$[mm^2]$	(\hat{h})	sékletarány
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/I.	3.05	1.45	-	-	-	$5.5 \cdot 10^{-5}$	0.96
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/II.	3.05	1.45	-	-	-	$5 \cdot 10^{-5}$	0.96
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/III.	3.05	1.45	-	-	-	$5 \cdot 10^{-5}$	0.96
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/I.	3.8	1.1	-	-	-	$1 \cdot 10^{-5}$	-
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/II.	3.8	1.1	-	-	-	$5 \cdot 10^{-5}$	0.96
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/III.	3.8	1.1	-	-	-	$4 \cdot 10^{-5}$	0.97
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/I.	3.9	1.2	-	-	-	$1.8 \cdot 10^{-5}$	0.985
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/II.	3.9	1.2	-	-	-	$1.8 \cdot 10^{-5}$	0.985
Szürke közép- és durvaszemcsés homokkő 09/27/III.	3.9	1.2	-	-	-	$4.5 \cdot 10^{-5}$	0.97
Vörösesbarna aleuorit 10/03/I.	2.31	0.8	-	-	-	4.10^{-5}	1
Vörösesbarna aleuorit 10/03/II.	2.31	0.8	-	-	-	$4 \cdot 10^{-5}$	1
Vörösesbarna aleuorit 10/03/III.	2.31	0.8	-	-	-	$4 \cdot 10^{-5}$	1
Vörösesbarna aleuorit 10/03/I.	3.74	0.8	-	-	-	$4 \cdot 10^{-5}$	0.98
Vörösesbarna aleuorit 10/03/II.	3.74	0.8	-	-	-	$2 \cdot 10^{-5}$	0.98
Vörösesbarna aleuorit 10/03/III.	3.74	0.8	-	-	-	7.10^{-5}	0.92
Vörösesbarna aleuorit 10/03/I.	1.96	0.8	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.965
Vörösesbarna aleuorit 10/03/II.	1.96	0.8	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.965
Vörösesbarna aleuorit 10/03/III.	1.96	0.8	-	-	-	$6 \cdot 10^{-5}$	0.965
Vörösesbarna aleuorit - részleges ezüstfestékkel 10/03/I.	2.31	0.8	0.8	0.14	-	$4 \cdot 10^{-5}$	0.97
Vörösesbarna aleuorit - részleges ezüstfestékkel 10/03/II.	2.31	0.8	-	-	-	$4 \cdot 10^{-5}$	0.99
Vörösesbarna aleuorit - részleges ezüstfestékkel 10/03/III.	2.31	0.8	0.8	0.14	-	$4 \cdot 10^{-5}$	0.97

13. táblázat. Kőzetminták vastagságfüggése közben vizsgált mintadarabok hővezetési paraméterei. A mérés ideje a minta neve után van megjelölve hónap/nap formátumban. A római szám a mérés sorszámát jelöli. Ahol nem szerepel érték, ott nem volt indokolt azon paraméter meghatározása. A mérések 2017-ben történtek.

1.9. Eredmények összefoglalása

Az előbbiekben részletesen bemutattuk az egyes mintacsaládokhoz tartozó klasszikus hővezetési egyenlettől eltérő viselkedést mutató mintadarabokat, viszont mindenképp szükséges a jelenség jobb megértése érdekében egy összefoglalás keretében a közöttük lévő kapcsolatról és a mintadarabok egymás közötti összefüggéséről általános következtetéseket levonni, amely még további munkálatokat igényel.

A kondenzátorok és a félvezetőktől kezdve, amely minták jellemezhetőek a legismertebb szerkezettel, haladtunk egyre heterogénebb minták felé. Láthattuk, hogy míg a kondenzátor három mintájából kettő mutatott eltérést a Fourier-egyenlettől, addig a félvezető0 és a második kondenzátormintát nagyon jól kezelte a klasszikus egyenlet. Jellemzően azok a minták, amelyek eltérést produkáltak, nagyobb vastagsággal rendelkeztek. Tehát ezen minták esetében a vastagság csökkentésével egyre jobban a Fourier-egyenlet által leírt viselkedést kaptuk vissza.

Fémhabok esetén szintén a vastagság növelésével nőtt az eltérés. A másik tényező jellemzően a szerkezetüket leírható heterogenitás erősödése. Az anyagon belüli hőtranszport nemcsak vezetéssel, de más módon is létrejöhet, ami további komplexitást társít vizsgálatainkhoz.

A kőzetek esetében is látható volt, hogy a vastagság szintén fontos szerepet töltött be a hővezetési tulajdonságok esetében. Amíg a kevesebb számú első mérés során, amikor csak az anyagi tulajdonságokat vizsgáltuk, hatból öt minta mutatta az eltérést. A második mérés során pedig a vastagabb minták nem tértek el minden esetben. Kivételt képez a Sötétszürke bazalt és a Szürke középszemcsés homokkő. De a vastagság növekedésével ezek esetében is csökkent az eltérés. Másik lényeges észrevétel, hogy az egy kőzetcsaládban lévő típusok is eltérő hővezetési viselkedést mutatnak. A Villányi mészkő esetében találtunk a klasszikus egyenlettől való eltérést, amíg a Sárgásfehér mészkőt a Fourier-egyenlet jól kezelte.

Vizsgálatainkból általánosan elmondható, hogy a minta vastagsága lényeges szerepet tölt be a jelenség alakulásában. Másik fontos paraméter az anyagi heterogenitás és az anyagi szerkezet, ami azonos anyagcsaládba tartozó minták esetében is eltérhet.

Az eddigi mérési eredményeket az [1, 11] cikkekben publikáltuk.

2. VÉGESELEMES SZIMULÁCIÓK

A szimulációk alapját az előző fejezetben ismertetett kondenzátorminta ihlette. A vizsgálatok során abból indulunk ki, hogy hőtanilag egy vezető és egy szigetelő anyagpár alkotja a kondenzátormetszeteket, amik párhuzamosan helyezkedtek el egymáshoz



képest. Kétféle modellkialakítást, egy korong és egy hasáb elrendezést vizsgáltunk.

30. ábra. A szimulációk során a modellek kialakításai és jellemzőik.

A 30. ábrán láthatjuk a különböző kialakításokhoz tartozó geometriai méreteket és a hőáram belépését. A két modell eltérő vastagsága miatt a kapott eredmények csak kismértékben hasonlíthatóak össze. A két eltérő geometria viszont a kutatások folytatásához és a jövőbeli mintaválasztáshoz adhat támpontot. A hőáram, mint gerjesztés modellezése kitüntetett része volt a szimulációknak. Az előző fejezetben részletezett probléma, miszerint, ha a valós gerjesztési jelalakot használjuk a szimulációkhoz (nulla időpont alatt ugrik maximális értékre) a megoldás nagy hibával terhelt lenne. Ennek érdekében, az ott definiált gerjesztő jelet használtuk mint peremfeltételt (31. ábra).



31. ábra. A gerjesztési peremfeltétel alakja.

_	Sűrűség [$\frac{kg}{m^3}$]	Hővezetési tényező [^W / _{mK}]	Fajhő [J/kgK]
Szigetelő réteg Cermaic5	4900	4,5	800
Vezető réteg Réz	8933	400	385
Ezüst	10500	429	235
Alumínium	2689	237,5	951

14. táblázat. A végeselem-vizsgálat során használt anyagok.

A vizsgálatoknál alkalmazott szigetelő anyag és a jó hővezető anyagok jellemzőit a 14. táblázat mutatja. A vezető réteghez a réz anyag lett rendelve. A másik jó hővezető anyag (ezüst) pedig a minta alján létrehozott vékony síklap anyagát képezte⁶. Ez a réteg kapcsolta össze a rétegeket, ami jó hővezető képessége révén már egy eredő hőmérséklet-felfutást tudott a program számolni. A jelenség vizsgálata során a hővezető réteg hőveze-tési tényezőjét állítottuk alacsony értékről egyre magasabb értékre.

A rétegszám volt a másik fontos paraméter a szimulációk során. A legegyszerűbb kettő rétegtől egészen az ötven rétegig történtek futtatások.

A végeselem-vizsgálatokkal részletesebben korábbi munkáinkban foglalkozunk, ahol a háló- és időfüggetlenséget is ellenőriztük. A szimulációs vizsgálatok hosszú evolúciós utat jártak be, ahogy egyre jobban finomítottunk a módszeren. A különböző peremfeltételektől kezdve a háromdimenziós modellektől a kettő dimenzióra való áttérésig. A módszertan fejlesztése jelenleg is zajlik.

2.1. Kétrétegű korong

A kétrétegű korong esetében fontos meghatározó paraméter volt, hogy melyik réteget választjuk vezetőnek és melyiket szigetelő anyagnak. Ennél a modellnél mind a két eredményt közöljük, mert a többréteges minták esetében már nem tapasztaltunk különbséget a külső és belső anyag megválasztásában.

A 32. ábrán látható a kétrétegű korong végeselemmodellje és annak hálózása.



32. ábra. Kétrétegű korong végeselemmodellje. Bal oldali képen a vezető ezüst réteg hálójának több rétegre történő sűrítése látható. Jobb oldali ábrán a teljes modell hálózását mutatja.

A hővezetési tényezők állításával kapott diagramokat a következő két ábra (33. és 35.) mutatja. Az adatsorokra illesztett Fourier hővezetési egyenlet a 34. és 36. ábra mutatja.

⁶ Analóg módon a mérések során használt ezüst réteghez.



33. ábra. Kétrétegű korong jó belső hővezető réteggel rendelkező hőmérséklet-felfutása különböző hővezetési tényező értékeknél.



34. ábra. Kétrétegű korong jó belső hővezető réteg hőmérséklet-felfutására illesztett Fourier-egyenlet dimenziótlanítás után. A szaggatott vonal jelöli az illesztés eredményét, a folytonos vonal pedig az adatsort. Az előbbi hőmérséklet-felfutásokhoz tartozó legnagyobb hővezetési tényező értékre történt az illesztés.



35. ábra. Kétrétegű korong jó külső hővezető réteggel rendelkező hőmérséklet-felfutása.



36. ábra. Kétrétegű korong jó külső hővezető réteggel rendelkező hőmérséklet-felfutására illesztett Fourier-egyenlet dimenziótlanítás után. A szaggatott vonal jelöli az illesztés eredményét, a folytonos vonal pedig az adatsort. Az előbbi hőmérséklet-felfutásokhoz tartozó legnagyobb hővezetésitényező-értékre történt az illesztés.

A kétrétegű korongok vizsgálata érdekes jelenségeket mutatott. Attól függően, hogy melyik réteg a szigetelő, nagymértékben függött a hőmérséklet-felfutás a minta hátoldalán. Ha viszont a belső vezető réteg hővezetési tényezőjét még jobban növeltük, akkor a 37. ábrán látható jelalakot kaptuk. Ez a jelenség jellegre hasonlított a kantavári mészkőn mért hőmérséklet felfutásra (38. ábra).



37. ábra. Kétrétegű korong belső, jó vezető rétegének hőmérséklet-felfutása és az arra történő Fourier-egyenlet illesztése réz hővezetésitényező-értékénél. A szaggatott vonal jelöli az illesztetéshez tartozó görbét, a folytonos pedig az adatsort.



38. ábra. A kantavári mészkő hőmérséklet-felfutása.

2.2. Húszrétegű korong

A húszrétegű korong esetében már új hálózási metódust is be kellett vezetni a rétegek jobb lefedése miatt. Ezt a multizone eljárás szolgáltatta. A modellt és a hálót a 39. ábra mutatja. A szimuláció során kapott diagramokat a 40. ábra szemlélteti. A kapott adatsorokra illesztett Fourier-egyenlet csak kis mértékben tért el a szimulációs eredményektől, az eltérés elhanyagolható volt a kétrétegű mintákhoz képest.



39. ábra. Húszrétegű korong végeselemmodellje.



40. ábra. Húszrétegű korong hőmérséklet-felfutása különböző hővezetési tényezők esetén.

2.3. Ötvenrétegű korong

Az ötvenrétegű korong eredményeinek bemutatásával zárjuk a szimulációk bemutatását. Ezen modell esetében olyan jelenségre bukkantunk, ami szembe megy az előbb bemutatottakkal. A hővezetési tényező értékének növelése a hőmérsékletfelfutásokat másik irányba mozdítja el. A multizone hálózási metódust ennél a modellnél is használtuk a koncentrikus rétegek miatt. A modellt és a hálót a 41. ábra mutatja.



41. ábra. Ötven rétegű korong végeselemmodellje.

A szimuláció során kapott diagramokat a 42. ábra szemlélteti.



42. ábra. Ötvenrétegű korong hőmérséklet-felfutása különböző hővezetési tényezők esetén.

2.4. HASÁBOS SZERKEZETŰ MINTÁK

A korongmintákhoz hasonlóan történt a szimulációk felépítése, ugyanazokkal a peremfeltételekkel és kezdeti feltételekkel. A különbség itt az, hogy csak kétrétegű mintákat vizsgáltunk. A minták hosszát és a rosszabbik hővezető réteg hővezetési tényezőjét kezeltük paraméterként 0.01 $\frac{W}{mK}$ -től 20, 40, 60...400 $\frac{W}{mK}$ értékeken át, 20-as léptékben, míg a jó hővezető képességű anyag a réz jellemzőivel bírt. A legkisebb minta hossza 1 mm, a leghosszabbé 15 mm. Ezek közül a mérőkészülékben elhelyezhető, reális körülmények

között elkészíthető minták kiértékelését mutatjuk be. Az eredmények egyértelmű közös jellemzője, hogy a Fourier-egyenlettől való eltérés függ a minta méretétől is, nemcsak az egyes anyagpárok jellemzőitől. Minden olyan esetben, ahol a kiterjesztett egyenletre volt szükség, ott az pontosan vissza tudta adni a kapott jelalakot.

– 2 mm-es minták. Ebben az esetben az eltérés csak a 20 $\frac{W}{mK}$ hővezetési tényező esetén jelentkezett, ezt az adatsort a Fourier- és a GK-egyenletekkel kiértékelve eltérő hőfokvezetési tényezőt kapunk, azaz $\alpha_F = 2 \cdot 10^{-5} \frac{m^2}{s}$ és $\alpha_{GK} = 1.85 \cdot 10^{-5} \frac{m^2}{s}$, továbbá a GK-esetben $\tau_q = 0.22$ és $\kappa^2 = 0.33$ dimenziótlan paramétereket használtuk. A kiértékelést a 43. és 44. ábrák mutatják.



43. ábra. Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának Fourier-egyenlettel való kiértékelése.



44. ábra. Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának GK-egyenlettel való kiértékelése.

3 mm-es minták. Ekkor már nemcsak 1, hanem 2 esetben is szükség volt a kiterjesztett, GK-egyenlettel való kiértékelésre, azaz a 20 és 40 ^w/_{mK}-hez tartozó anyagok esetén. Az első esetre vonatkozó eredményeket szemléltetik a 45. és 46. ábrák.



45. ábra. Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának Fourier-egyenlettel való kiértékelése, $\alpha_F = 2.7 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.



46. ábra. *Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának GK-egyenlettel való kiértékelése*, $\alpha_{\rm GK} = 2.1 \cdot 10^{-5} \frac{\rm m^2}{\rm s}, \tau_q = 0.25, \kappa^2 = 0.38.$

– 4 és 5 mm-es minták. Gyakorlatilag a 3 mm-es esetben tapasztaltak jelennek meg újra és újra, azonban a τ_q relaxációs idő körülbelül azonos maradt, a κ^2 paramétert kellett változtatni. Az indokolja a különböző hosszúságú mintákhoz tartozó eredmények összevonását, hogy bár eltérő a hosszuk, de azonos anyagpárokra ugyanazok a τ_q és κ^2 paraméterek adódnak. Két illesztést mutat a 47. és 48. ábra, a rosszabbik hővezetési tényező ekkor 20 $\frac{W}{mK}$, a hasáb hossza 4 mm.



47. ábra. Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának Fourier-egyenlettel való kiértékelése, $\alpha_F = 2.9 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.



48. ábra. *Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának GK-egyenlettel való kiértékelése*, $\alpha_{\rm GK} = 2.9 \cdot 10^{-5} \frac{\rm m^2}{\rm s}, \tau_q = 0.27, \kappa^2 = 0.5.$

– 6 mm-es minták. Ekkor az előzőektől eltérően, a 20 $\frac{W}{mK}$ -es esetre már nem tapasztalható eltérés a Fourier-egyenlettől, azonban a 40 $\frac{W}{mK}$ esetre megmaradt, és a 60 $\frac{W}{mK}$ és 80 $\frac{W}{mK}$ beállítások esetén pedig megjelent az eltérés. Az illesztések mindhárom esetre ugyanazt a $\tau_q = 0.25$ értéket adták eredményül, a κ^2 értéke változott, sorrendben: 0.45, 0.4, 0.28. Az alábbi 49. és 50. ábrák a 60 $\frac{W}{mK}$ -es esetre mutatnak példát.



49. ábra. Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának Fourier-egyenlettel való kiértékelése, $\alpha_F = 6 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.



50. ábra. *Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának GK-egyenlettel való kiértékelése*, $\alpha_{\rm GK} = 4 \cdot 10^{-5} \frac{\rm m^2}{\rm s}, \tau_q = 0.25, \kappa^2 = 0.4.$

– 7 mm-es minták. Habár a 6 mm-es esetben a 20 $\frac{W}{mK}$ -es esetben nem tapasztaltunk eltérést, ez a mostani 7 mm-es esetben már nem igaz, további érdekesség pedig, hogy lényegében az 5 mm-es esetben használt dimenziótlan paraméterek adódnak (51. és 52. ábrák).



51. ábra. Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának Fourier-egyenlettel való kiértékelése, $\alpha_F = 6.8 \cdot 10^{-5} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.



52. ábra. *Kétrétegű hasáb hátfali hőmérséklet-felfutásának GK-egyenlettel való kiértékelése*, $\alpha_{\rm GK} = 3.8 \cdot 10^{-5} \frac{\rm m^2}{\rm s}, \tau_q = 0.25, \kappa^2 = 0.5.$

2.4.1. KÖVETKEZTETÉSEK

A végeselem-szimulációk összegzéseként elmondható, hogy a mérésekkel párhuzamosan szintén tapasztaltunk eltéréseket a klasszikus esettől, melyeket a Fourieregyenlettel történő illesztések is jól mutatnak. Az alapgondolat a mérések és a szimulációk között ugyanaz: két különböző időskálájú rendszer dolgozik össze. Ezt legegyszerűbben a kondenzátormintákhoz hasonló elrendezésen lehet szemléltetni, azonban a mögöttes tartalom ennél jóval általánosabb. Ugyanezt tapasztaltuk a kőzetek és a fémhabok esetén is, melyeket egyáltalán nem lehet ilyen párhuzamos rétegezéssel értelmezni. Ez természetesen nem zárja ki annak lehetőségét, hogy esetleg egy minta komponenseinek pontos ismeretében ne lehetne visszavezetni a kiértékelést ilyen párhuzamosan kapcsolt rendszerek eredőjére.

Bár a görbék néhol hullámterjedési jelenségre engednek következtetni, ez azonban ellentmond az eddigi szemléletnek és tapasztalatnak, ezért mindenképp a modellek további fejlesztésén kell dolgozni. Ezek a modellek jó kiindulópontot jelentenek későbbi minták tervezéséhez a kísérletek számára és az effektív módon detektálható jelenség pontosabb megismerésére. Ennek birtokában már lehetne olyan kompozit anyagokat tervezni és gyártani, ahol ezt a jelenséget gyakorlati szempontok szerint érvényesítve ki lehetne használni.

Köszönetmondás

A kutatást az NKFIH K116197 és K116375 számú pályázata támogatta.

IRODALOM

- R. Kovács, Á. Lovas. Nem-Fourier hővezetés a kőzetmechanikában. Mérnökgeológia-Kőzetmechanika 2016, Szerk: Á. Török, P. Görög, B. Vásárhelyi, Hantken Kiadó, Budapest, 2016.
- [2] S. Both, B. Czél, T. Fülöp, Gy. Gróf, Á. Gyenis, R. Kovács, P. Ván, J. Verhás. Deviation from the Fourier Law in Room-temperature Heat Pulse Experiments. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 41:41–48, 2016.
- [3] W. Kaminski. Hyperbolic Heat Conduction Equations for Materials with a Nonhomogeneous Inner Structure. *Journal of Heat Transfer*, 112:555–560, 1990.
- [4] J. Antaki. New Interpretation of Non-Fourier Heat Conduction in Processed Meat. J. Heat Transfer, 2005. 127(2), 189-193.
- [5] Á. Faludi. Hőmérsékletvezetési tényező gyors mérése, 1985.
- [6] Gy. Gróf. Homogén és kétrétegű minták hőmérsékletvezetési tényezőjének mérése flash módszerrel, 2002.
- [7] W. J. Parker, R. J. Jenkins, C. P. Butler, G. L. Abott. Flash Method for Determining Thermal Diffusivity. *Journal of Applied Physics*, 32, 1961.
- [8] https://advance-riko.com/en/categories/thermal-conductivity-measurement -system-en/. Technical report. 2017.10.02.
- [9] https://www.netzsch-thermal-analysis.com. Technical report. 2017.10.02.
- [10] R. Kovács. Hővezetés egyenleteinek elmélete, numerikus vizsgálata és kísérleti ellenőrzése. *Tudományos Diákköri Konferencia*, október 2014. Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, témavezető: P. Ván.

- [11] P. Ván, A. Berezovski, T. Fülöp, Gy. Gróf, R. Kovács, Á. Lovas, J. Verhás. Guyer-Krumhansl-Type Heat Conduction at Room Temperature. 2017. 119, 50005.
- [12] P. Lebrun. Superfluid Helium as a Technical Coolant. 1997. European Organization For Nuclear Research, European Laboratory For Particle Physics, LHC Project Report 125.
- [13] L. Kovács, E. Mészáros, F. Deák, G. Somodi, K. Máté, A. Jakab (Kőmérő Kft.), B. Vásárhelyi (Vásárhelyi és Társa Kft.), J. Geiger (SZTE), Gy. Dankó, F. Korpai, Gy. Mező, K. Darvas (Golder Zrt.), P. Ván, T. Fülöp, Cs. Asszonyi (Montavid Termodinamikai Kutatócsoport). 2012. A Geotechnikai Értelmező Jelentés (GÉJ) felülvizsgálata és kiterjesztése. Kézirat – Kőmérő Kft. Pécs, RHK Kft. Irattár, RHK-K-032/12.
- [14] I. Kukkonen. Temperature Dependecies of Thermal Properies of Olkiluoto Rocks Measured with the Flash Method. 2015. University Of Helsinki, Posiva OY.
- [15] M.M. Tung, M. Trujillo, J.A. Molina, M.J. Rivera, E.J. Berjano. Modeling the Heating of Biological Tissue Based in the Hyperbolic Heat Transferequation. *Mathematical And Computer Modelling*, (50):665–672, 2009.
- [16] K. Liu, P. Cheng, Y. Wang. Analysis of Non-Fourier Thermal Behaviour for Multi-layer Skin Model. *Thermal Science*, (15):61–67, 2011.
SZILÁRD KÖZEGEK REOLÓGIÁJA A GENERIC NEMEGYENSÚLYI TERMODINAMIKAI LEÍRÁSBAN

Szücs Mátyás

BME ENERGETIKAI GÉPEK ÉS RENDSZEREK TANSZÉK, BUDAPEST Montavid Termodinamikai Kutatócsoport, Budapest

A szilárd közegek reológiai viselkedésének leírására az irreverzibilis termodinamika belső változós formalizmusával, egyetlen szimmetrikus, másodrendű tenzori belső változó használatával egy elméletileg és kísérletileg is kitüntetett reológiai modellcsaládot, a Kluitenberg–Verhás modellcsaládot nyerjük. A GENERIC (General Equation for Nonequilibrium Reversible–Irreversible Coupling) egy általános formalizmus a nemegyensúlyi termodinamikai problémák leírására. Ebben a tanulmányban bemutatjuk, hogy a Kluitenberg–Verhás modellcsalád hogyan ágyazható be a GENERIC keretrendszerbe.¹

1. BEVEZETÉS

A modern mérnöki és fizikai problémák szükségessé teszik a disszipatív rendszerek matematikai leírását és az így származtatott egyenletek megoldását. Hétköznapjainkból is jól ismert jelenség, amikor egy zavartalanul hagyott rendszer bizonyos idő múlva egy egyensúlyi állapotba kerül, majd mindaddig marad ebben az egyensúlyi helyzetben, amíg valamiféle újabb hatás ki nem téríti onnan. Tekintsünk például egy ingát. Ha világunk leegyszerűsítően ideális lenne, akkor a kitérített helyzetéből indítva az inga az idők végéig (vagy amíg meg nem állítjuk) azonos amplitúdóval lengne, azonban az inga és a felfüggesztés kapcsolata nem ideális, súrlódnak egymáson, valamint a közegellenállás is csillapítja a mozgást. Ezen hatások disszipálják az energiát, így az inga lassan csillapodó lengéseket végez, majd bizonyos idő után megáll. Folytonos közegek – kontinuumok – modellezésekor a disszipáció még nagyobb szerephez jut. A szilárd közegeknek csak kis

¹ Szücs Mátyás azonos című diplomamunkájának [1] bővített változata, konzulens: Fülöp Tamás, témavezető: Szekeres András.

része írható le az ideális – rugalmas – anyagi viselkedéssel. Gondoljunk például a műanyagokra, a kőzetekre, az aszfaltokra, a különböző szivacsokra vagy memóriahabokra, ezen anyagok a külső mechanikai terhelésre adott választ csak késleltetve és csillapítva adják. Ezt a viselkedést reológiai vagy viszkoelasztikus viselkedésnek nevezzük. Folyadékoknak is csak szűk köre modellezhető ideálisként, a folyadékok belső súrlódására is több lehetőség ismeretes (newtoni és nem-newtoni modellek). A disszipáció tehát általános, univerzális jelenség.

Az elmúlt években a termodinamikai szemléletű anyagi viselkedés modellezése egyre népszerűbb lett. Ezek közül az egyik leggyakoribb a kontinuum-termodinamika Clausius– Duhem-egyenlőtlenségén alapuló megközelítés [2], ennél tágabb érvényű megközelítést ad az irreverzibilis, és a kiterjesztett irreverzibilis termodinamika [3], és az egyik legáltalánosabb a nemegyensúlyi termodinamika belső változós módszertanán alapuló modellezés [4]. A belső változók alkalmazása a klasszikus, makroszkopikus elméletek egy univerzális modellezési eszköze, ugyanis a módszer jellegzetessége és előnye, hogy minimális feltevéseket tesz a modellezendő jelenségek fizikai mechanizmusáról, tehát az így elért eredmények mindaddig érvényesek, amíg a mezoszkopikus vagy mikroszkopikus háttérfolyamatok kielégítik az alkalmazott termodinamikai elveket: egy további állapotváltozó jelenlétét a konstitutív függvényekben, a mérlegegyenleteket és a második főtételt.

Egy másik, szintén a nemegyensúlyi termodinamika inspirálta módszer a GENERIC (General Equation for the Nonequilibrum Reversible–Irreversible Coupling) formalizmus, mely a rendszer dinamikáját – azaz az állapotváltozók időfejlődését – egy reverzibilis és egy irreverzibilis rész összegeként keresi [5, 6]. A keretrendszert eredetileg komplex folyadékok modellezéséhez fejlesztették ki, mára azonban alkalmazási köre sokkal szélesebb: alkamazták gázok, klasszikus és relativisztikus folyadékok, szilárd közegek modellezésére, sőt termodinamikailag intelligens numerikus megoldó módszerek származtatására is.

A közelmúltban több érdekes publikáció is született a szilárd kontinuumok modellezéséről a GENERIC formalizmusban, ld. például [7, 8, 9]-et. A belső változós módszertan GENERIC-be történő beágyazását azonban ezeddig nem vizsgálták. Dolgozatomban ezzel foglalkozom: [10]-ben az egy belső változó alkalmazásával levezethető ún. Kluitenberg–Verhás-féle, termodinamikailag konzisztens reológiai modellcsalád leíró egyenleteit valósítom meg a GENERIC segítségével, majd hasonlítom össze a már ismert megközelítéssel.

A 2. szakaszban ismertetem a GENERIC keretrendszert és a hozzá vezető utat, kiindulva a klasszikus mechanika Hamilton-elvéből, kitérve a kanonikus egyenletekre, a Poisson-zárójelekre, valamint ezek kontinuumokra történő általánosítására. A teljesség igénye nélkül 2.4. alszakaszban ismertetek a disszipatív rendszerek leírására szolgáló néhány elméletet, megemlítve a disszipációs potenciálokban rejlő lehetőségeket és korlátokat is. Ezután a 3. szakaszban bemutatom az egy belső változóval nyerhető, Kluitenberg– Verhás-féle reológiai modellcsaládot és ennek beágyazását a GENERIC formalizmusba, saját eredményeimet a 3.1.4. és 3.2.4. alalszakaszban mutatom be, a 4. szakaszban pedig a kapott eredményeket értékelem ki.

2. A GENERIC FORMALIZMUS ÉS A HOZZÁ VEZETŐ ÚT

A klasszikus mechanikai elméletek többsége nemdisszipatív rendszerekre vonatkozik. Az elmúlt bő évszázadban azonban több elmélet is született a disszipatív rendszerek leírására, melyek egy részét már az irreverzibilis termodinamika inspirálta. Ilyen például a GENERIC keretrendszer. Ebben a fejezetben ezt a módszert és a hozzá vezető utat mutatom be. A GENERIC a rendszer dinamikáját egy reverzibilis és egy irreverzibilis rész időfejlődésének összegeként származtatja. A reverzibilis rész hamiltoni dinamikának tesz eleget, ahol az általánosított Poisson-zárójelekre is teljesül a Jacobi-azonosság. Mindezen fogalmak felidézéséhez ebben a fejezetben bemutatom a hamiltoni dinamikát leíró kanonikus egyenleteket és a hozzájuk kapcsolódó Poisson-zárójeleket. Ezután röviden említést teszek a történelmi szempontból fontos disszipatív rendszerek leírására szolgáló elméletekről, majd a GENERIC formalizmus ismertetésével zárom ezt a szakaszt. A 2.1.–2.3. alszakaszban leírtakat [11, 12, 13] alapján foglaltam össze.

2.1. A HAMILTON-ELV

A fizikai problémákat matematikailag differenciálegyenletekkel tudjuk leírni. Általános érvényű módszer nincs arra, hogy ezeket az egyenleteket hogyan származtathatjuk. A kísérleteken alapuló egyenletszármaztatás mellett egy valamelyest univerzálisnak tekinthető módszer a variációszámítás, azonban a klasszikus variációs elvek csak nemdisszipatív rendszerekre működnek.

A klasszikus mechanika legalapvetőbb variációs elve a Hamilton-elv – más néven a legkisebb hatás elve, melynek szokásos tárgyalása a következő. Tekintsünk egy holonom, szkleronom, tömegpontokból álló rendszert, ennek egyértelmű leírására az L Lagrangefüggvényt – vagy más néven kinetikus potenciált – használhatjuk, melynek változói a q_k általános koordináták és a \dot{q}_k általános sebességek, tehát $L = L(q_k, \dot{q}_k)^2$. Bevezethető az

$$I := \int_{t_1}^{t_2} L(q_k, \dot{q}_k) \mathrm{d}t \tag{1}$$

² Általános esetben a Lagrange-függvény a t időtől is függhet, ekkor $L = L(q_k, \dot{q}_k, t)$.

hatásfunkcionál. A Hamilton-elv kimondja, hogy a megvalósuló mozgásra a hatásfunkcionálnak stacionárius pontja³ van, tehát

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_k, \dot{q}_k) \mathrm{d}t = 0.$$
⁽²⁾

Jelölje a variált mozgáshoz tartozó koordinátákat

$$\bar{q}_k(t) := q_k(t) + \delta q_k(t), \tag{3}$$

ahol $q_k(t)$ jelöli a megvalósuló mozgáshoz tartozó koordinátát, míg $\delta q_k(t)$ az ehhez tartozó infinitezimális eltérést – azaz a variációt. A hatás variációja a variált és az eredeti hatás különbsége, azaz

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \left[L \left(q_k + \delta q_k(t), \dot{q}_k + \delta \dot{q}_k(t) \right) - L (q_k, \dot{q}_k) \right] \mathrm{d}t.$$
(4)

(4)-et első rendig sorfejtve a

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{k=0}^{n} \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k(t) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k(t) \right) \mathrm{d}t \tag{5}$$

kifejezésre jutunk, majd parciálisan integrálva a második tagot az

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_{k=0}^n \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k(t) \mathrm{d}t + \sum_{k=0}^n \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta q_k(t) \right]_{t_1}^{t_2} = 0 \tag{6}$$

összefüggést találjuk. Mivel fix végpontú variációkat tekintünk, így az "időperemeken"

$$\delta q_k(t_1) = \delta q_k(t_2) = 0, \tag{7}$$

tehát (6) második tagja nulla. Így

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_{k=0}^n \left(\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k \mathrm{d}t = 0, \tag{8}$$

melynek minden időpillanatban teljesülnie kell, ebből adódóan az integrandus nulla. Mivel a δq_k variációk tetszőlegesek, így

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0, \qquad k = 1, \dots, n, \qquad (9)$$

³ Hagyományosan a hatásfunkcionál extremumát szokás megkövetelni, azonban ez nem feltétlenül lesz extremum.

melyeket Euler–Lagrange-egyenleteknek nevezünk, ahol n a rendszer szabadsági fokainak számával egyezik meg. (9) levezethető a Newton-egyenletekből a D'Alembert-elv és a virtuális-teljesítmény elvének segítségével is, az így nyert egyenletet pedig másodfajú Lagrange-egyenletnek nevezzük. Belátható, hogy (9) egyenlet az előírt q_k^0 és \dot{q}_k^0 kezdeti feltételekkel együtt a probléma egyértelmű megoldását biztosítja.

Az imént bemutatott gondolatmenetet szemléletesen az $n \to \infty$ átmenettel kontinuumokra is általánosíthatjuk. Egy általánosabb, térelméleti tárgyalásmódon keresztül mutatom be a térmennyiségekre vonatkozó mozgásegyenletek származtatását. Tekintsünk egy általános mezőt, melyet a $\varphi_k = \varphi_k(r_i, t)$ (k = 1, ..., m, i = 1, ..., d) térmennyiségek jellemeznek. A rendszer dinamikáját az \mathcal{L} Lagrange-sűrűségfüggvénnyel írjuk le, mely általános esetben a térmennyiségeknek, azok tér- és időderiváltjainak⁴ függvénye, valamint néhány esetben expliciten függhet a térkoordinátáktól és az időtől is. Most tekintsük a legegyszerűbb esetet, amikor a Lagrange-sűrűségfüggvény csak a térmennyiségektől, és azok *első* tér- és időderiváltjaitól függnek, azaz

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}(\varphi_k, \partial_i \varphi_k, \partial_t \varphi_k), \tag{10}$$

melyből a Lagrange-függvényt a tekintett V tértartományra történő integrálással kapjuk:

$$L = \int_{V} \mathcal{L} \mathrm{d}V. \tag{11}$$

A Hamilton-elv szerint a megvalósuló mozgásra a hatásnak stacionárius pontja van, tehát

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_{V} \mathcal{L} dV dt = 0.$$
(12)

A variált mozgáshoz tartozó térmennyiségekre ismét a

$$\bar{\varphi}_k(r_i, t) := \varphi_k(r_i, t) + \delta \varphi_k(r_i, t), \tag{13}$$

jelölést használjuk, analógan az előző jelölésekkel. Megint fix végpontú variációt használunk, azaz a peremeken $\forall t$ esetén, illetve a t_1 és t_2 időpillanatokban $\forall r_i$ esetére a mennyiségek variációja zérus, azaz

$$\delta\varphi_k(r_i, t)|_{\partial V} = 0, \tag{14}$$

$$\delta\varphi_k(r_i, t_1) = \delta\varphi_k(x_i, t_2) = 0.$$
(15)

Ezek szerint a hatás variációja:

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} \int_{V} \left[\mathcal{L}(\varphi_k + \delta \varphi_k, \partial_i \varphi_k + \delta(\partial_i \varphi_k), \partial_t \varphi_k + \delta(\partial_t \varphi_k)) - \mathcal{L}(\varphi_k, \partial_i \varphi_k, \partial_t \varphi_k) \right] \mathrm{d}V \mathrm{d}t.$$
(16)

⁴ A továbbiakban $\partial_i := \nabla$ és $\partial_t := \frac{\partial}{\partial t}$ jelölést használjuk a tér- ill. időderiváltakra.

Az integrandust első rendig sorfejtve

$$\delta I = \sum_{k=1}^{m} \int_{t_1}^{t_2} \int_{V} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k} \delta \varphi_k + \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} \delta(\partial_i \varphi_k) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \varphi_k)} \delta(\partial_t \varphi_k) \right] \mathrm{d}V \mathrm{d}t.$$
(17)

(13)-ból könnyen belátható, hogy a variálás a tér- és időderiválással felcserélhető, azaz:

$$\partial_i(\delta\varphi_k) = \delta(\partial_i\varphi_k), \qquad \partial_t(\delta\varphi_k) = \delta(\partial_t\varphi_k).$$
 (18)

Parciálisan integrálva (17) második tagját, és felhasználva, hogy d $V = dr_1 \dots dr_d$:

$$\int \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} \partial_i (\delta \varphi_k) \mathrm{d}r_i = \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} \delta \varphi_k(r_i, t) \right]_{\partial V_i} - \int \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} \delta \varphi_k \mathrm{d}r_i, \tag{19}$$

ugyanígy járunk el (17) harmadik tagjában is:

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \varphi_k)} \partial_t (\delta \varphi_k) dt = \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \varphi_k)} \delta \varphi_k(r_i, t) \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \varphi_k)} \delta \varphi_k dt, \quad (20)$$

továbbá felhasználva a variációk nulla voltát a peremen, visszahelyettesítve (17)-be a

$$\delta I = \sum_{k=1}^{m} \int_{t_1}^{t_2} \int_{V} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k} - \sum_{i=1}^{d} \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \varphi_k)} \right] \delta \varphi_k \mathrm{d}V \mathrm{d}t = 0$$
(21)

egyenlet adódik. Mivel a variációk tetszőlegesek, és az egyenletnek $\forall r_i, t$ -re teljesülnie kell, így a mozgásegyenletek a

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k} - \sum_{i=1}^d \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} - \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \varphi_k)} = 0, \qquad k = 1, \dots, m$$
(22)

formában adódnak. Hasonlóan, mint a pontmechanikai tárgyalásnál is megjegyeztük, a (22) egyenlet a tartomány peremére előírt peremfeltételekkel, valamint a kezdeti feltételekkel együtt egyértelműen megoldható. Általános esetben, amikor a Lagrangesűrűségfüggvény magasabbrendű tér- és időderiváltakat is tartalmaz, a mozgásegyenletek a

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k} - \sum_{\mu} \partial_{\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\mu} \varphi_k)} + \sum_{\mu,\nu} \partial_{\mu} \partial_{\nu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\mu} \partial_{\nu} \varphi_k)} - \sum_{\mu,\nu,\eta} \partial_{\mu} \partial_{\nu} \partial_{\eta} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_{\mu} \partial_{\nu} \partial_{\eta} \varphi_k)} + \dots = 0$$
(23)

alakot öltik, ahol a tér- és időváltozókat egy közös vektorba rendeztük, melynek komponenseit μ, ν, η, \ldots szimbólumokkal jelöljük.

2.2. A HAMILTON-FÉLE KANONIKUS EGYENLETEK

Tekintsük először ismét a pontmechanikai formalizmust. A (9) egyenletben jelenlévő $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$ mennyiségek jelölésére bevezethetők a

$$p_k := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}, \qquad \qquad k = 1, \dots, n \tag{24}$$

ún. általános impulzusok, a fenti összefüggésből kifejezhetők az általános koordinátasebességek az általános koordináták, az általános impulzusok, valamint az idő függvényében, azaz $\dot{q}_k = \dot{q}_k(q_k, p_k, t)$. Ezekből a Lagrange-függvény Legendre-transzformáltjaként a

$$H(q_k, p_k, t) := \sum_{k=1}^{n} p_k \dot{q}_k - L(q_k, \dot{q}_k, t) \bigg|_{\dot{q}_k = \dot{q}_k(q_k, p_k, t)}$$
(25)

Hamilton-függvényt nyerjük, melynek változói a q_k általános koordináták, a p_k általános impulzusok és a t idő. A (q_k, p_k, t) változókat Hamilton-féle vagy kanonikus változóknak hívjuk. Vegyük (25) p_k szerinti parciális deriváltját, erre a

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \dot{q}_k + \sum_{j=1}^n \left(p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_k} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_k} \right)$$
(26)

kifejezést kapjuk, ahol (24) alapján a szummás tag zérus, így a

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \dot{q}_k \tag{27}$$

összefüggésre jutunk. Elvégezve (25) q_k szerinti parciális deriválását is:

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = \sum_{j=1}^n \left(p_j \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_k} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k},\tag{28}$$

(24) felhasználásával a szummás tag most is nulla, valamint (9) alapján

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k},\tag{29}$$

majd ismét az általános impulzusok (24) definíciója alapján

$$\frac{\partial H}{\partial q_k} = -\dot{p}_k. \tag{30}$$

Így a mozgásegyenletek a (27) és (30) 2n darab elsőrendű differenciálegyenletetre vezetnek. A

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k},\tag{31}$$

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k},\tag{32}$$

egyenleteket Hamilton-féle kanonikus egyenleteknek nevezzük. A bemutatott gondolatmenet szerint (31)–(32) szemléletesen a másodfajú Lagrange-egyenletek fizikai tartalmú Cauchy-átírásának⁵ is tekinthetők. A teljesség kedvéért megemlítem, hogy a Hamiltonés Lagrange-függvény között a

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \tag{33}$$

összefüggés áll fenn. Belátható, hogy a kanonikus változók függvényeként felírt Hamilton-függvény, előírt q_k^0 és p_k^0 kezdeti feltételekkel a probléma egyértelmű megoldását biztosítja.

Mezők esetén is bevezethetők a kanonikus egyenletek. Az általános impulzusok analógiájára bevezethetők az általános impulzussűrűségek:

$$\pi_k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \varphi_k)},\tag{34}$$

ezeket felhasználva a Hamilton-függvényt már funkcionálként reprezentáljuk, mely a

$$H(u_k, \pi_k) = \int\limits_V \left(\sum_{k=1}^m \pi_k \dot{\varphi}_k - \mathcal{L}\right) \mathrm{d}V$$
(35)

képlettel számítható, hasonlóan, mint a Lagrange- és a Lagrange-sűrűségfüggvény között a Hamilton- és a Hamilton-sűrűségfüggvény között a

$$H = \int_{V} \mathcal{H} \mathrm{d}V \tag{36}$$

összefüggés áll fenn, tehát

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^{m} \pi_k \dot{\varphi}_k - \mathcal{L}.$$
(37)

A \mathcal{H} Hamilton-sűrűség a térmennyiségeknek, ezek első térderiváltjainak és az impulzussűrűségeknek a függvénye, azaz $\mathcal{H}(\varphi_k, \partial_i \varphi_k, \pi_k)$. Képezzük \mathcal{H} teljes differenciálját:

$$\mathbf{d}\mathcal{H} = \sum_{k=1}^{m} \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_k} \mathbf{d}\varphi_k + \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} \mathbf{d}(\partial_i \varphi_k) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_k} \mathbf{d}\pi_k \right]$$
(38)

másrészről (37) alapján

$$\mathbf{d}\mathcal{H} = \sum_{k=1}^{m} \left[\pi_k \mathbf{d}\dot{\varphi}_k + \dot{\varphi}_k \mathbf{d}\pi_k - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k} \mathbf{d}\varphi_k - \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \varphi_k)} \mathbf{d}(\partial_i \varphi_k) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \varphi_k)} \mathbf{d}\dot{\varphi}_k \right], \quad (39)$$

⁵ Cauchy-átíráson magasabbrendű differenciálegyenletek elsőrendű egyenletrendszerre történő transzformálást értjük.

(34) felhasználásával ez

$$\mathbf{d}\mathcal{H} = \sum_{k=1}^{m} \left[\dot{\varphi}_k \mathbf{d}\pi_k - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k} \mathbf{d}\varphi_k - \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} \mathbf{d}(\partial_i \varphi_k) \right],\tag{40}$$

összefüggésre egyszerűsödik. A megváltozások együtthatóit (38)–(40)-ben összehasonlítva a következő relációkra jutunk:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_k} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k}, \qquad \sum_{i=1}^d \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} = -\sum_{i=1}^d \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)}, \qquad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_k} = \dot{\varphi}_k, \qquad (41)$$

(22) egyenletből pedig

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi_k} - \sum_{i=1}^d \partial_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_i \varphi_k)} = \partial_t \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \varphi_k)} = \dot{\pi}_k, \tag{42}$$

mely (41) szerint

$$\dot{\pi}_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_k} + \sum_{i=1}^d \partial_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_i \varphi_k)}.$$
(43)

Eszerint a térelmélet kanonikus egyenletei a \mathcal{H} Hamilton-sűrűséggel felírva (41) utolsó egyenlete, valamint (43), azaz

$$\dot{\varphi}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_k},\tag{44}$$

$$\dot{\pi}_k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_k} + \sum_{i=1}^d \partial_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_i \varphi_k)}.$$
(45)

Könnyen belátható, hogy az $\mathcal{H}(\varphi_k, \partial_i \varphi_k, \pi_k)$ sűrűség térintegrálásával adódó HHamilton-függvény φ_k szerinti funkcionálderiváltja⁶

$$\frac{\delta H}{\delta \varphi_k} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_k} - \sum_{i=1}^d \partial_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial (\partial_i \varphi_k)},\tag{46}$$

 π_k szerinti funkcionálderiváltja pedig

$$\frac{\delta H}{\delta \pi_k} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_k},\tag{47}$$

mivel \mathcal{H} független az impulzussűrűségek gradiensétől, így a kanonikus egyenleteket a

$$\dot{\varphi}_k = \frac{\delta H}{\delta \pi_k},\tag{48}$$

$$\dot{\pi}_k = -\frac{\delta H}{\delta \varphi_k} \tag{49}$$

alakban írhatjuk.

⁶ A funkcionálderivált fogalmáról ld. az A Függeléket.

2.3. A POISSON-ZÁRÓJELEK

Tekintsük egy $F = F(q_k, p_k, t)$ kanonikus változóktól függő tetszőleges fizikai mennyiség időbeli változását:

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial F}{\partial p_k} \dot{p}_k \right).$$
(50)

Ebbe a (31)–(32)-ből visszahelyettesítve az általános koordináták és általános impulzusok időderiváltjait a

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right)$$
(51)

összefüggést kapjuk. A második tagra bevezetjük a következő jelölést, melyet az F és H Poisson-zárójelének nevezünk:

$$\{F,H\} := \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right), \tag{52}$$

ekkor a fizikai mennyiség időbeli változását a

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}$$
(53)

kifejezéssel írhatjuk kompakt formában.

Az általános koordinátákat és impulzusokat egy közös

$$\boldsymbol{\eta} := \begin{pmatrix} q_k \\ p_k \end{pmatrix} \tag{54}$$

vektorba rendezzük, mellyel a kanonikus egyenletek ún. szimplektikus formája, (31)–(32) szerint,

$$\dot{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}},\tag{55}$$

ahol

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix},\tag{56}$$

(57)

$$\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\eta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial q_k} \\ \frac{\partial H}{\partial p_k} \end{pmatrix}.$$
(58)

szimplektikus formában az említett F tetszőleges fizikai mennyiség időbeli változására a

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \dot{\eta}$$
(59)

kifejezést kapjuk, amely (55) szerint a

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \eta}$$
(60)

formában adódik, így a Poisson-zárójelek a szimplektikus nyelven a

$$\{F,H\} = \frac{\partial F}{\partial \eta} \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \eta}$$
(61)

alakban írhatóak. A Poisson-zárójelek tetszőleges A, B, C fizikai mennyiségek és $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ esetén

- antiszimmetrikusak: $\{A, B\} = -\{B, A\}$, (speciálisan: $\{A, A\} = 0$),
- \mathbb{R} -bilineárisak: $\{A, c_1B + c_2C\} = c_1\{A, B\} + c_2\{A, C\},\$
- kielégítik a Leibniz-szabályt: $\{A, B \cdot C\} = \{A, B\}C + \{A, C\}B$,
- kielégítik a Jacobi-azonosságot: $\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0.$

Vizsgáljuk (53) alapján a Hamilton-függvény időfejlődését:

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t} + \{H, H\},\tag{62}$$

az előbbiek szerint $\{H, H\} = 0$, így

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t},\tag{63}$$

azaz a megvalósuló mozgásra a Hamilton-függvény totális idő szerinti deriváltja megegyezik a parciális időderiváltjával. A kanonikus változók Poisson-zárójeleire a

$$\{q_j, q_k\} = 0,$$
 $\{q_j, p_k\} = \delta_{jk},$ (64)

$$\{p_j, q_k\} = -\delta_{jk}, \qquad \{p_j, p_k\} = 0 \tag{65}$$

kifejezések adódnak, ahol δ_{jk} a Kronecker-szimbólum. Ezek alapján a kanonikus változók Poisson-zárójele a szimplektikus formában

$$\{\boldsymbol{\eta}_j, \boldsymbol{\eta}_k\} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}_{jk}.$$
 (66)

Amennyiben egy fizikai mennyiség nem függ expliciten az időtől, azaz $F = F(q_k, p_k)$, akkor (53) szerint

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \{F, H\}.\tag{67}$$

Ekkor ha $\frac{dF}{dt} = 0$, akkor F nem változik az időben, azaz F mozgásállandó. Ezek alapján azt mondhatjuk, ha egy mennyiség Hamilton-függvénnyel vett Poisson-zárójele zérus, akkor a mennyiség mozgásállandó. A Poisson-tétel szerint, ha egy rendszerben létezik F_1 és F_2 mozgásállandó, akkor a két állandó Poisson-zárójele is megmaradó mennyiség.

A Poisson-zárójelek szintén általánosíthatók a térelméleti leírásra is. Tekintsük ismét az F fizikai mennyiséget, mely az \mathcal{F} sűrűségéből ismét a teljes térfogaton történő térintegrálásból állítható elő:

$$F = \int_{V} \mathcal{F} \mathrm{d}V. \tag{68}$$

Az egyszerűség kedvéért ismét feltesszük, hogy \mathcal{F} csak a térmennyiségektől és azok első tér- és időderiváltjaitól függ, tehát $\mathcal{F}(\varphi_k, \partial_i \varphi_k, \pi_k, t)$. Ekkor ennek a tetszőleges Fmennyiségnek az időbeli változása

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \int_{V} \sum_{k=1}^{m} \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \varphi_{k}} \dot{\varphi}_{k} + \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial (\partial_{i} \varphi_{k})} \partial_{t} (\partial_{i} \varphi_{k}) + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \pi_{k}} \dot{\pi}_{k} \right] \mathrm{d}V, \tag{69}$$

az integrál második tagjában a hely és idő szerinti integrálást felcserélhetjük, majd ezt a tagot parciálisan integrálva a

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \int_{V} \sum_{k=1}^{m} \left[\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \varphi_{k}} \dot{\varphi}_{k} - \sum_{i=1}^{d} \partial_{i} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial (\partial_{i} \varphi_{k})} \right) \dot{\varphi}_{k} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \pi_{k}} \dot{\pi}_{k} \right] \mathrm{d}V, \tag{70}$$

kifejezést nyerjük. A (46)-ban elmondott gondolatmenet szerint, valamint kihasználva a kanonikus egyenletek (48)–(49) alakját a

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \int_{V} \sum_{k=1}^{m} \left(\frac{\delta F}{\delta\varphi_{k}} \frac{\delta H}{\delta\pi_{k}} - \frac{\delta F}{\delta\pi_{k}} \frac{\delta H}{\delta\varphi_{k}} \right) \mathrm{d}V,\tag{71}$$

összefüggésre jutunk. A pontmechanikai logika alapján eszerint a térelméletben F és H Poisson-zárójelét az

$$\{F,H\} = \int_{V} \sum_{k=1}^{m} \left(\frac{\delta F}{\delta \varphi_{k}} \frac{\delta H}{\delta \pi_{k}} - \frac{\delta F}{\delta \pi_{k}} \frac{\delta H}{\delta \varphi_{k}}\right) \mathrm{d}V$$
(72)

alakban definiálhatjuk. A térmennyiségeket és általános impulzussűrűséget ismét egy η vektorba rendezve, az F és H Poisson-zárójele hasonlóan (61)-hez

$$\{F,H\} = \int_{V} \frac{\delta F}{\delta \eta} \mathbf{J} \frac{\delta H}{\delta \eta} \mathbf{d} V$$
(73)

alakban írhatók.

Mindezek a szerkezetek a GENERIC formalizmusban is alkalmazást nyernek.

2.4. DISSZIPATÍV RENDSZEREK LEÍRÁSA

Ebben az alfejezetben a teljesség igénye nélkül megemlítek néhány tudománytörténeti szempontból fontos elméletet, melyek a disszipatív rendszerek leírását hivatottak szolgálni.

A 2.1. alszakaszban ismertetettek szerint nemdisszipatív rendszerek leíró egyenleteit származtathatjuk valamiféle variációs elvből. Azonban felmerülhet bennünk a kérdés, mikor tekinthető ekvivalensnek egy differenciálegyenlet és egy variációs elv? A Helmholtz-Volterra–Vainberg-tétel [14] szerint ha a $\hat{\Theta}\varphi = 0$ differenciálegyenletben fellépő $\hat{\Theta}$ differenciáloperátor szimmetrikus, akkor az egyenlethez létezik Hamilton-elv. Ez a tétel tekinthető a klasszikus potenciálelmélet egyfajta általánosításának, miszerint az erőmező potenciálos, ha örvénymentes; ugyanígy $\hat{\Theta}$ is örvénymentes, mely a szimmetrikusságát jelenti. De hogyan tudunk variációs elveket konstruálni nemszimmetrikus operátorokhoz? Erre alapvetően két módszer létezik, a hamiltoni módszerek és a nem-hamiltoni módszerek. Előbbiek matematikai transzformációk segítségével hozzák megfelelő alakra az egyenleteket, ilyenek például az integráló operátorok, a változótranszformációk módszere, bevezethetünk további változókat, vagy az operátort adjungáltjával szorozzuk. Ezek a módszerek azonban nem egyértelműek, attól függően, hogy melyiket használjuk, a fizikai interpretáció más és más. A nem-hamiltoni módszerek közé tartoznak a módosított operátorok módszere (ezt használta például Prigogine, ő funkcionálintegrálással a differenciálegyenletből származtatta a variációs problémának megfelelő Lagrange-függvényt), illetve a módosított függvényterek módszere, ilyenkor a variálást általában csak a változók egy részében végzik – vagy a tér- vagy az időváltozóban –, nem a teljes függvénytéren.

Egy ilyen módosított függvénytéren alapuló módszer a Gyarmati-elv [15, 16]. Tekintsünk egy a extenzív és egy Γ intenzív fizikai mennyiséget, az a extenzív mennyiség mérlegegyenlete

$$\varrho \dot{a}(\Gamma) + \nabla \cdot \mathbf{j} = \pi, \tag{74}$$

ahol ϱ a tömegsűrűséget, **j** az *a* mennyiséghez tartozó áramsűrűséget, π pedig a forrástagot jelöli, valamint a kvázilineáris konstitúciós egyenlőség

$$\mathbf{j} = \mathbf{L}\nabla\Gamma,\tag{75}$$

ahol pedig L az onsageri vezetési mátrix. (75)-öt (74)-be helyettesítve a

$$\varrho \dot{a}(\Gamma) + \nabla \cdot (\mathbf{L} \nabla \Gamma) = \pi \tag{76}$$

egyenletre jutunk, melyet az

$$\mathcal{L}^{G}(\Gamma, \mathbf{j}) = \pi(\Gamma, \mathbf{j}) - \Phi(\Gamma, \mathbf{j}) - \Psi(\Gamma, \mathbf{j})$$
(77)

potenciálból származtathatunk, ahol $\Phi(\Gamma, \mathbf{j}) = \frac{1}{2}\mathbf{j} \cdot \mathbf{L}^{-1} \cdot \mathbf{j}$ és $\Psi(\Gamma, \mathbf{j}) = \frac{1}{2}\nabla\Gamma \cdot \mathbf{L} \cdot \nabla\Gamma$ Rayleigh-féle disszipációs potenciálok. Az ezekből képzett funkcionálból a leszűkített függvénytérre vett variációval származtathatók (74)–(75) egyenletek. A variálást csak a térváltozókban kell elvégezni, így

$$\delta_{\mathbf{j}}I(\Gamma,\mathbf{j}) = \delta_{\mathbf{j}}\int_{V} \left[\mathbf{j}\cdot\nabla\Gamma - \frac{1}{2}\mathbf{j}\cdot\mathbf{L}^{-1}\cdot\mathbf{j} - \frac{1}{2}\nabla\Gamma\cdot\mathbf{L}\cdot\nabla\Gamma\right] \mathrm{d}V = \nabla\Gamma - \mathbf{L}^{-1}\mathbf{j} = 0, \quad (78)$$

$$\delta_{\Gamma} I(\Gamma, \mathbf{j}) = \delta_{\Gamma} \int_{V} \left[\mathbf{j} \cdot \nabla \Gamma - \frac{1}{2} \mathbf{j} \cdot \mathbf{L}^{-1} \cdot \mathbf{j} - \frac{1}{2} \nabla \Gamma \cdot \mathbf{L} \cdot \nabla \Gamma \right] \mathrm{d}V = \nabla \cdot \left(\mathbf{j} - \mathbf{L} \nabla \Gamma \right) = 0 \quad (79)$$

összefüggéseket találjuk. Vegyük észre, hogy ezen egyenletek nem függetlenek egymástól, valamint (79) visszaadja a konstitutív egyenletet. A (74)-et mint kényszert vesszük figyelembe, ezt (79)-be helyettesítve a

$$-\varrho\dot{a} - \nabla \cdot (\mathbf{L}\nabla\Gamma) + \pi = 0 \tag{80}$$

transzportegyenletet kapjuk. Így tehát a disszipatív rész dinamikáját egy Lagrangefüggvénnyel analóg mennyiségből származtattuk.

Megjegyzendő, hogy a disszipációs potenciálok alkalmazása nem univerzális érvényű, a problémáknak csak egy bizonyos része kezelhető így [17].

2.5. A GENERIC FOMALIZMUS

A 2.1–2.3. alszakaszban bemutattam néhány módszert, melyekkel nemdisszipatív rendszerek mozgásegyenletei származtathatók, a 2.4. alszakaszban pedig a disszipatív dinamika származtatására alkalmas elveket ismertettem. A GENERIC a reverzibilis és az irreverzibilis dinamikát egyszerre származtatja, ebben az alszakaszban ezen formalizmus alapötletét és megfogalmazását mutatom be, végig Öttinger [5] gondolatmenetét követve.

A klasszikus – egyensúlyi, reverzibilis – termodinamika első lépése a munka és hő fogalmának bevezetése, melyek különböző, de egymáshoz szorosan kapcsolódó fogalmak. Ezekkel a termodinamikai rendszerek közötti energiacserét a

$$dE = dW + dQ \tag{81}$$

formában írhatjuk. A termodinamika első főtétele szerint az energia megmaradó mennyiség, így csak úgy változhat egy rendszerben, ha egy másik rendszerrel vagy a környezettel valamilyen formájában energiát cserél. Az energiaváltozás munka részét jól érthető mechanikai tagokkal reprezentáljuk, mint egy bizonyos nyomás okozta térfogatváltozás -pdV, ill. egy bizonyos kémiai potenciál okozta részecskeszám változása μdN , továbbá minden nem termikus mennyiségekkel összefüggő eneregiaváltozást (pl. elektromos, mágneses,...) is hasonló taggal reprezentálhatunk, így a

$$dE = -pdV + \mu dN + dQ \tag{82}$$

összefüggésre jutunk. A termodinamika második főtétele definiálja az S entrópiát és a T abszolút hőmérsékletet, miszerint dQ = TdS, így a klasszikus termodinamika Gibbs-féle fundamentális összefüggésére jutunk:

$$dE = -pdV + \mu dN + TdS, \tag{83}$$

mely a termodinamikai rendszert a V, N, S termodinamikai változókon értelmezett geometriai struktúrán értelmezi.

Amennyiben a rendszer nincs egyensúlyban, akkor vizsgáljuk a rendszer időfejlődését az egyensúlyba kerülésig. Míg az egyensúlyi tárgyalásmódnál a rendszerek közötti energiacserét a rendszeren végzett munka és az átadott hő összegeként írtuk fel, addig a nemegyensúlyi esetben az állapotváltozók időfejlődését egy reverzibilis és egy irreverzibilis tag időfejlődésének összegeként keressük, azaz

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t} = \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{rev}} + \dot{\mathbf{x}}_{\mathrm{irr}},\tag{84}$$

ahol x a nemegyensúlyi rendszer állapotát jellemző független változókból alkotott vektor. Feltételezzük, hogy a reverzibilis rész – hasonlóan, mint az egyensúlyi tárgyalásmódnál a munka rész – mechanikai jellegű, így ennek a tagnak egy jól értelmezett struktúrája van, mely a hamiltoni dinamikához kapcsolódó Poisson-struktúra. Így az \mathbf{x}_{rev} időfejlődését egy Hamilton-függvényből származtatjuk, melyet gondolhatunk a rendszer energiafüggvényének, melyhez egy hamiltoni vektormező társul. Erre a klasszikus mechanikában már alkalmazott geometriai struktúrák megfelelnek, mint a Poisson-, vagy a szimplektikus struktúra, melyek az energiafüggvény gradienséből származtatják az állapotváltozók időfejlődését. Ezek a struktúrák azonban korlátozottak, így a nem mechanikai kölcsönhatások okozta folyamatokat nem tudjuk ezekkel leírni. Ahhoz, hogy ezeket is figyelembe tudjuk venni, egy sokkal általánosabb Poisson-struktúrát kell vennünk, melyeken bevezethetünk egy nemtriviális entrópiafüggvényt, mely állandó minden hamiltoni dinamika vezette esetben. Ezzel eljutottunk az utolsó lépéshez, amivel dQ = T dS analogonját keressük. Egy természetes feltételezés, ahogyan mint az energiafüggvény gradiense vezérli a reverzibilis rész időfejlődését, úgy az entrópiafüggvény gradiense vezérelje az irreverzibilis rész időfejlődését, így ehhez is bevezethetünk egy operátort (mint a hamiltoni dinamikánál volt a J mátrix, később látjuk majd, hogy csak abban az egyszerű esetben adható meg egység- és nullmátrixokkal), mely az entrópiafüggvény gradienséből származtatja az irreverzibilis rész időfejlődését. Megjegyzendő, hogy az entrópia az extenzív állapotváltozók függvényében konkáv kifejezés. Így elérkezünk egy általános, nemegyensúlyi rendszerek időfejlődését leíró egyenlethez, melyet GENERIC-nek (General Equation for the Nonequlibrium Reversible–Irreversible Coupling) neveztek el:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{M}_{-}(\mathbf{x}) \cdot \frac{\delta E(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} + \mathbf{M}_{+}(\mathbf{x}) \cdot \frac{\delta S(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}},\tag{85}$$

ahol $E(\mathbf{x})$ és $S(\mathbf{x})$ az állapotváltozókkal kifejezett energia- és entrópiafunkcionálok, az $\mathbf{M}_{-}(\mathbf{x})$ és $\mathbf{M}_{+}(\mathbf{x})^{7}$ a reverzibilis ill. irreverzibilis operátormátrix, melyek a geometriai struktúrát és a disszipatív anyagjellemzőket reprezentálják operátorok formájában. Általában a \mathbf{x} állapotváltozók vektora helyfüggő mezőket tartalmaz, így a $\frac{\delta}{\delta \mathbf{x}}$ általában funkcionálderiválást jelöl, amennyiben viszont az állapotváltozók – a tömegpontmechanikához hasonlóan – véges dimenziós térben leírhatók (ld. például [18] által ismertetett termorugalmas ingát), akkor a funkcionálderiválás helyett parciális deriválást kell használnunk.

A GENERIC-es modellezés alapvető része az állapotváltozók megválasztása. Mivel nem léteznek univerzális nemegyensúlyi állapotváltozók, így ezek megválasztása a modellezendő jelenségtől függően, intuitívan választandók meg, azonban ezek rossz megválasztása esetén a módszer nem vezethet sikerre.

Mivel (85)-ben a reverzibilis és irreverzibilis rész időfejlődését egymástól függetlennek tekintettük, így további két kiegészítő, degeneráltsági követelményt fogalmazhatunk meg:

$$\mathbf{M}_{-}(\mathbf{x}) \cdot \frac{\delta S(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} = 0, \tag{86}$$

$$\mathbf{M}_{+}(\mathbf{x}) \cdot \frac{\delta E(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} = 0.$$
(87)

(86) azt fejezi ki, hogy a reverzibilis dinamikát generáló $\mathbf{M}_{-}(\mathbf{x})$ operátor nincs hatással az entrópia megváltozására. (87) egy zárt rendszer teljes energiájának megmaradását fejezi ki az irreverzibilitás hozzájárulásával, a disszipált mechanikai energia belső energiává alakul át. A hamiltoni dinamika szerint az $\mathbf{M}_{-}(\mathbf{x})$ reverzibilis operátormátrix szükségszerűen antiszimmetrikus, míg az entrópiaprodukció pozitív definitsége miatt az $\mathbf{M}_{+}(\mathbf{x})$ irreverzibilis operátormátrix szimmetrikus és pozitív szemidefinit. Ezek a megállapítások még hasznunkra válnak : modellezéskor e két mátrixot elő kell állítanunk, azonban ennek menete bonyodalmas, ezen feltételek segíteni fogják a mátrixok megkonstruálását.

A hamiltoni mechanikán keresztül ismertettem a reverzibilis rész mögötti geometriai struktúrát, a Poisson-struktúrát, mely szerint két A, B funkcionál antiszimmetrikus

⁷ Hagyományosan a GENERIC-ben az $\mathbf{M}_{-}(\mathbf{x})$ reverzibilis operátormátrixot $\mathbf{L}(\mathbf{x})$ -szel jelölik és Poisson-mátrixnak, $\mathbf{M}_{+}(\mathbf{x})$ irreverzibilis operátormátrixot pedig $\mathbf{M}(\mathbf{x})$ -szel jelölik és súrlódási mátrixnak nevezik, azonban mi az L jelölést a Lagrange-függvény jelölésére tartjuk fenn. Az általunk preferált jelölésben a – és + jelek az indexben az operátor szimmetriájára utalnak.

zárójele⁸ és az $M_{-}(x)$ reverzibilis operátormátrix között az

$$[A,B]_{-} = \int_{V} \frac{\delta A(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} \cdot \mathbf{M}_{-}(\mathbf{x}) \cdot \frac{\delta B(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} dV$$
(88)

összefüggés áll fenn, az antiszimmetrikus zárójelekre vonatkozó tulajdonságok megegyeznek a 2.3. alszakaszban ismertetett tulajdonságokkal.

Az antiszimmetrikus zárójelekre vonatkozó Jacobi-azonossággal megmutatható az időfejlődési invariancia. Definiáljunk időfüggő A_t operátorokat, mint a következő tisztán reverzibilis

$$\frac{\mathrm{d}A_t}{\mathrm{d}t} = [A_t, E]_{-} \tag{89}$$

egyenlet megoldásait az $A_0 = A$ kezdeti feltétellel, és tekintsük a $C = [A, B]_{-}$ mennyiség időfejlődését tetszőleges A, B funkcionálokkal. A reverzibilis dinamika feltételezett időinvarianciája C időfejlődéséhez hasonlóan megfogalmazható az A_t, B_t mennyiségekre is:

$$\frac{\mathrm{d}C_t}{\mathrm{d}t} = \left[\left[A_t, B_t \right]_{-}, E \right]_{-},\tag{90}$$

melynek jobb oldala a Leibniz-szabály és (89), valamint B_t -re felírt alakja szerint a

$$\left[[A_t, B_t]_{-}, E \right]_{-} = \left[[A_t, E]_{-}, B_t \right]_{-} + \left[A_t, [B_t, E]_{-} \right]_{-}$$
(91)

alakban is írható. Kihasználva az antiszimmetrikus zárójelek antiszimmetriáját, ezt a

$$\left[E, [A_t, B_t]_{-}\right]_{-} + \left[A_t, [B_t, E]_{-}\right]_{-} + \left[B_t, [E, A_t]_{-}\right]_{-} = 0$$
(92)

alakban is írhatjuk. A Jacobi-azonosság szerint tehát az időfejlődés konzisztens, melyet az energiafunkcionál generál.

Az antiszimmetikus zárójel mellé bevezethetjük a szimmetrikus⁹ zárójelet, mely az $\mathbf{M}_+(\mathbf{x})$ irreverzibilis operátormátrixhoz társul:

$$[A,B]_{+} = \int_{V} \frac{\delta A(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} \cdot \mathbf{M}_{+}(\mathbf{x}) \cdot \frac{\delta B(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} dV.$$
(93)

Az $\mathbf{M}_+(\mathbf{x})$ szimmetriája miatt a szimmetrikus zárójel is szimmetrikus¹⁰:

$$[A,B]_{+} = [B,A]_{+}, \tag{94}$$

⁸ Antiszimmetrikus zárójel alatt az általánosított Poisson-zárójelet értjük, azonban ezek már nem csak a kanonikus változókat tartalmazzák, így nem célszerű Poisson-zárójelnek hívni.

⁹ A hagyományos GENERIC irodalom disszipatív vagy irreverzibilis zárójel néven tartja számon.

¹⁰ Ezért is választottuk a szimmetrikus zárójel megnevezést.

valamint $\mathbf{M}_{+}(\mathbf{x})$ pozitív szemidefinitsége miatt

$$[A, A]_{+} \ge 0, \tag{95}$$

(93)–(95)-ben A, B tetszőleges funkcionálok.

Tekintsük az A funkcionál időfejlődését, melyet a

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{\delta A(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} \cdot \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t}$$
(96)

egyenlettel fejezhetünk ki. Az imént bevezetett antiszimmetrikus és szimmetrikus zárójelekkel

$$\frac{dA}{dt} = [A, E]_{-} + [A, S]_{+},$$
(97)

mely (85) következménye. Vizsgáljuk meg ez alapján az energiafunkcionál időfejlődését. Eszerint

$$\frac{dE}{dt} = [E, E]_{-} + [E, S]_{+} = 0,$$
(98)

ahol felhasználtuk (87) degenerációs feltételt, valamint egy mennyiség önmagával vett antiszimmetrikus zárójelének nulla voltát. Ez az egyenlet az energiamegmaradást fejezi ki. Amennyiben az entrópiafunkcionál időfejlődését vizsgáljuk, a

$$\frac{dS}{dt} = [S, E]_{-} + [S, S]_{+}$$
(99)

egyenletre jutunk, melynek első tagja (86) alapján nulla, míg második tagja $\mathbf{M}_+(\mathbf{x})$ pozitív szemidefinitsége miatt

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = [S,S]_+ \ge 0,\tag{100}$$

mely a termodinamika második főtételét fejezi ki, azaz az entrópia az időben nem csökken. Tekintsük azt a két speciális esetet, melyek egyben a GENERIC keretrendszert motiválták. Amennyiben a folyamatok reverzibilisek, visszakapjuk a már ismertetett Hamilton-formalizmust. A hamiltoni mechanikához járuló irreverzibilis részt a kritikus dinamika (ld. fázisátmenetek) leírására használt Ginzburg–Landau-egyenlet motiválta. Továbbra is Öttingert [5] követve, tekintsük az $F(\mathbf{x}, T) = E(\mathbf{x}) - TS(\mathbf{x})$ Helmholtz-féle szabadenergiafüggvényt, melyben T konstans paraméter, melyet a stacionárius végállapot egyensúlyi hőmérsékletével azonosíthatunk, melyet az $F(\mathbf{x}, T)$ függvény gradiensének eltűnésével definiálhatunk. A Ginzburg–Landau-egyenlet szerint az egyensúlyi állapot irreverzibilis megközelítése a

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{M}_{+}(\mathbf{x})\frac{\delta S(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}} = \frac{1}{T}\mathbf{M}_{+}(\mathbf{x})\frac{\delta [E(\mathbf{x}) - F(\mathbf{x})]}{\delta \mathbf{x}}$$
(101)

egyenlettel írható le, felhasználva a (87) degenerációs feltételt, a

$$\frac{\mathbf{d}\mathbf{x}}{\mathbf{d}t} = -\frac{1}{T}\mathbf{M}_{+}(\mathbf{x})\frac{\delta F(\mathbf{x})}{\delta \mathbf{x}}$$
(102)

egyenletet kapjuk.

2.6. A GENERIC NÉHÁNY HASZNOS ÖSSZEFÜGGÉSE

Amint az a 2.5. alszakaszban is szerepelt, a nemegyensúlyi állapotváltozók megválasztása intuitívan történik, így ezek megválasztása a GENERIC formalizmussal történő modellezés kritikus lépése. Ugyanakkor különböző változókombinációkkal is célt érhetünk, avagy az elmélet kiépítése szempontjából egyfajta kombinációt, az alkalmazásokhoz pedig egy másikat célszerű választanunk. Az is lehetséges, hogy a reverzibilis és az irreverzibilis rész dinamikáját különböző állapotváltozókban célszerű felírni, majd az egyesített egyenletetnél átjátszani az egyik változócsoportot a másikra. Ehhez nyújt segítséget a változótranszformáció.

Legyen az egyik esetben alkalmazott állapotváltozóink vektora **x**, a másik tekintett kombináció pedig **y**, ezek között az $\mathbf{y}(\mathbf{x})$ összefüggés áll fenn. A változótranszformáció levezetéséhez áttérünk az indexes írásmódba, valamint az Einstein-féle összegzési konvenciót használjuk, mely szerint az azonos "felső" és "alsó" indexekre összegzés történik. Eszerint (85) a

$$\frac{\mathrm{d}x^{i}}{\mathrm{d}t} = M_{-}^{ij}(\{x^{p}\})\frac{\delta E(\{x^{p}\})}{\delta x^{j}} + M_{+}^{ij}(\{x^{p}\})\frac{\delta S(\{x^{p}\})}{\delta x^{j}}$$
(103)

alakban írható. Írjuk fel ugyanezt az egyenletet a y állapotváltozókra is:

$$\frac{\mathrm{d}y^{i}}{\mathrm{d}t} = \hat{M}_{-}^{ij}(\{y^{p}\})\frac{\delta E(\{y^{p}\})}{\delta y^{j}} + \hat{M}_{+}^{ij}(\{y^{p}\})\frac{\delta S(\{y^{p}\})}{\delta y^{j}}.$$
(104)

Másrészről mivel az y és az x állapotváltozók között függvényszerű kapcsolat van, így (104) (103) segítségével tovább írható a

$$\frac{\mathrm{d}y^{i}}{\mathrm{d}t} = \frac{\delta y^{i}}{\delta x^{j}} \frac{\mathrm{d}x^{j}}{\mathrm{d}t} = \frac{\delta y^{i}}{\delta x^{j}} \left\{ M_{-}^{jk}(\{x^{p}\}) \frac{\delta E(\{y^{p}\})}{\delta y^{m}} \frac{\delta y^{m}}{\delta x^{k}} + M_{+}^{jk}(\{x^{p}\}) \frac{\delta S(\{y^{p}\})}{\delta y^{m}} \frac{\delta y^{m}}{\delta x^{k}} \right\}$$
(105)

alakba. Ezek után már (104) és (105) egyenlőségéből a változótranszformációra érvényes összefüggések leolvashatók:

$$\hat{M}_{-}^{ij}(\{y^p\}) = \frac{\delta y^i}{\delta x^k} M_{-}^{km}(\{x^p\}) \frac{\delta y^j}{\delta x^m},$$
(106)

$$\hat{M}_{+}{}^{ij}(\{y^p\}) = \frac{\delta y^i}{\delta x^k} M_{+}{}^{km}(\{x^p\}) \frac{\delta y^j}{\delta x^m},$$
(107)

melyeket invariáns alakban írva a

$$\hat{\mathbf{M}}_{-}(\mathbf{y}) = \frac{\delta \mathbf{y}}{\delta \mathbf{x}} \mathbf{M}_{-}(\mathbf{x}) \left(\frac{\delta \mathbf{y}}{\delta \mathbf{x}}\right)^{\mathrm{T}},$$
(108)

$$\hat{\mathbf{M}}_{+}(\mathbf{y}) = \frac{\delta \mathbf{y}}{\delta \mathbf{x}} \mathbf{M}_{+}(\mathbf{x}) \left(\frac{\delta \mathbf{y}}{\delta \mathbf{x}}\right)^{\mathrm{T}}$$
(109)

kifejezésekre jutunk. Behelyettesítéssel könnyen megmutatható, hogy a változótranszformációk az antiszimmetrikus és a szimmetrikus zárójeleket invariánsan hagyják, így ha az egyik állapotvoltozóink gyűjteményében teljesül a Jacobi-azonosság, akkor a másikban is.

A GENERIC egyik legalapvetőbb követelménye az antiszimmetrikus zárójelekre vonatkozó Jacobi-azonosság teljesülése. Ameddig a klasszikus mechanikában ez a struktúra egy következménye, addig a GENERIC keretrendszerben ez csak egy klasszikus mechanikai általánosítás, így a Jacobi-azonosság teljesülését ellenőriznünk kell. Ez bonyodalmas feladat, azonban a következő tételek bizonyos esetekben ezt megkönnyítik.

Egyszerű – ugyanakkor hosszadalmas – számításokkal belátható, hogy az A és B funkcionálok antiszimmetrikus zárójelének funkcionálderiváltjára a

$$\frac{\delta[A,B]_{-}}{\delta x^{p}} = \frac{\delta A}{\delta x^{k}} M_{-}^{kl} \frac{\delta^{2} B}{\delta x^{l} \delta x^{p}} + \frac{\delta^{2} A}{\delta x^{k} \delta x^{p}} M_{-}^{kl} \frac{\delta B}{\delta x^{l}} + \frac{\delta A}{\delta x^{k}} \frac{\partial M_{-}^{kl}}{\partial x^{p}} \frac{\delta B}{\delta x^{l}}$$
(110)

összefüggést kapjuk.

Tétel: Ha az \mathbf{M}_{-} reverzibilis operátormátrix független az \mathbf{x} állapotváltozók vektorától, akkor \mathbf{M}_{-} antiszimmetriája implikálja a Jacobi-azonosság teljesülését.

Bizonyítás: Első lépésként írjuk fel az A, B és C funkcionálok hármas antiszimmetikus zárójelét:

$$\left[A, \left[B, C\right]_{-}\right]_{-} = \int_{V} \left\{ \frac{\delta A}{\delta x^{k}} M_{-}^{kl} \frac{\delta \left[B, C\right]_{-}}{\delta x^{l}} \right\} \mathrm{d}V.$$
(111)

A tétel szerint a reverzibilis operátormátrix független az állapotváltozóktól, eszerint (110) harmadik tagja ekkor zérus lesz. Beírva így (110)-et (111)-be, majd csoportosítva a tagokat az

$$\left[A, \left[B, C\right]_{-}\right]_{-} = \int\limits_{V} \left\{ M_{-}^{kl} M_{-}^{pq} \left[\frac{\delta A}{\delta x^{k}} \frac{\delta B}{\delta x^{p}} \frac{\delta^{2} C}{\delta x^{q} \delta x^{l}} + \frac{\delta A}{\delta x^{k}} \frac{\delta^{2} B}{\delta x^{p} \delta x^{l}} \frac{\delta C}{\delta x^{q}} \right] \right\} \mathrm{d}V.$$
(112)

összefüggésre jutunk. Ezek után felírva a hármas zárójelek összegét, indexcserék után, majd a másodrendű tagok szerint rendezve a kifejezéseket:

$$\begin{split} \left[A, \left[B, C\right]_{-}\right]_{-} + \left[B, \left[C, A\right]_{-}\right]_{-} + \left[C, \left[A, B\right]_{-}\right]_{-} = \\ &= \int_{V} \left\{ \frac{\delta^{2}A}{\delta x^{q} \delta x^{l}} \left[M_{-}^{kl} M_{-}^{pq} \frac{\delta B}{\delta x^{k}} \frac{\delta C}{\delta x^{p}} + M_{-}^{kl} M_{-}^{qp} \frac{\delta B}{\delta x^{p}} \frac{\delta C}{\delta x^{k}} \right] \right\} \mathrm{d}V + \\ &+ \int_{V} \left\{ \frac{\delta^{2}B}{\delta x^{q} \delta x^{l}} \left[M_{-}^{kl} M_{-}^{pq} \frac{\delta C}{\delta x^{k}} \frac{\delta A}{\delta x^{p}} + M_{-}^{kl} M_{-}^{qp} \frac{\delta C}{\delta x^{p}} \frac{\delta A}{\delta x^{k}} \right] \right\} \mathrm{d}V + \\ &+ \int_{V} \left\{ \frac{\delta^{2}C}{\delta x^{q} \delta x^{l}} \left[M_{-}^{kl} M_{-}^{pq} \frac{\delta A}{\delta x^{k}} \frac{\delta B}{\delta x^{p}} + M_{-}^{kl} M_{-}^{qp} \frac{\delta C}{\delta x^{p}} \frac{\delta A}{\delta x^{k}} \right] \right\} \mathrm{d}V. \end{split}$$

$$(113)$$

Mivel $M_{-}^{qp} = -M_{-}^{pq}$, valamint a kapcsos zárójelek második tagjaiban sorra a *B* és *C*, a *C* és *A*, valamint az *A* és *B* funkcionálok deriváló indexeit felcserélhetjük, így a szögletes zárójelekben lévő tagok nullák, eszerint az antiszimmetrikus zárójelekre a Jacobiazonosság ekkor valóban teljesül.

Következmény: Az antiszimmetrikus zárójelekre vonatkozó Jacobi-azonosság ellenőrzéséhez elegendő az

$$M_{-}^{pq}\frac{\partial M_{-}^{kl}}{\partial x^{p}} + M_{-}^{kp}\frac{\partial M_{-}^{lq}}{\partial x^{p}} + M_{-}^{lp}\frac{\partial M_{-}^{qk}}{\partial x^{p}} = 0$$
(114)

azonosság belátása.

Bizonyítás: Írjuk fel a hármas zárójelek összegét, majd vegyük figyelembe, hogy az előző tétel szerint (110) első két tagja a hármas zárójelekben nulla lesz, így az

$$\begin{bmatrix} A, [B, C]_{-} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} B, [C, A]_{-} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} C, [A, B]_{-} \end{bmatrix}_{-} = \\ = \frac{\delta A}{\delta x^{q}} M_{-}^{qp} \frac{\delta B}{\delta x^{k}} \frac{\partial M_{-}^{kl}}{\partial x^{p}} \frac{\delta C}{\delta x^{l}} + \frac{\delta B}{\delta x^{q}} M_{-}^{qp} \frac{\delta C}{\delta x^{k}} \frac{\partial M_{-}^{kl}}{\partial x^{p}} \frac{\delta A}{\delta x^{l}} + \frac{\delta C}{\delta x^{q}} M_{-}^{qp} \frac{\delta A}{\delta x^{k}} \frac{\partial M_{-}^{kl}}{\partial x^{p}} \frac{\delta B}{\delta x^{l}}$$
(115)

összefüggést találjuk. Ezek után indexcseréket végzünk a szükséges tagokban, majd az A, B és C funkcionálok deriváltjait kiemelve az

$$\begin{bmatrix} A, [B, C]_{-} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} B, [C, A]_{-} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} C, [A, B]_{-} \end{bmatrix}_{-} = \\ = \frac{\delta A}{\delta x^{q}} \frac{\delta B}{\delta x^{k}} \frac{\delta C}{\delta x^{l}} \left(M_{-}^{pq} \frac{\partial M_{-}^{kl}}{\partial x^{p}} + M_{-}^{kp} \frac{\partial M_{-}^{lq}}{\partial x^{p}} + M_{-}^{lp} \frac{\partial M_{-}^{qk}}{\partial x^{p}} \right)$$
(116)

kifejezésre jutunk, mely csak úgy teljesülhet tetszőleges A, B és C funkcionálokra, ha a zárójelben lévő kifejezés zérus.

3. Belső változós szilárdtest-reológia

Viszkoelasztikus anyagmodellek származtathatók mechanikai vagy termodinamikai irányból. A pusztán mechanikai szemszögből felvett anyagmodellek esetlegesen sérthetik a termodinamika második főtételét, az irreverzibilis termodinamika belső változós mód-szertana ellenben termodinamikailag konzisztens anyagmodellek levezetésére nyújt lehe-tőséget.

A belső változós módszertan a klasszikus, makroszkopikus elméletek egy univerzális modellezési eszköze. A módszer jellegzetessége és előnye, hogy minimális feltevéseket tesz a modellezendő jelenségek fizikai mechanizmusáról, nem szükséges ismernünk a mikroszkopikus és mezoszkopikus háttérfolyamatokat, az így nyert elméletek mindenhol

használhatók, ahol a makroszkopikus folyamatok kielégítik az alkalmazott termodinamikai elveket: egy további állapotváltozó jelenlétét a konstitutív függvényekben, a mérlegegyenleteket és a második főtételt.

A módszertan szerint veszünk egy ismert kiindulási rendszert, melyet kibővítünk egy feltételezett extra – ún. belső¹¹ – változóval, ennek a változónak egy konkáv kifejezésével eltoljuk az entrópiát¹², majd az entrópiaprodukció pozitív definitségét onsageri egyenle-tekkel biztosítjuk.

A belső állapotváltozó tenzori rendjét, illetve további tulajdonságait (szimmetrikusság, stb.) attól függően választjuk meg, hogy milyen jelenség szempontjából keresünk kiterjesztést, például skalár belső változót használhatunk károsodás ill. tönkremenetel leírására (úm. károsodás foka) [19, 20, 21, 22], vektori belső változót a hővezetés kiterjesztésére (a hőáramsűrűség vektor korrekciójaként) [23, 24], más jelenségek modellezéséhez pedig szimmetrikus vagy antiszimmetrikus másodrendű tenzort, vagy magasabbrendű tenzort választhatunk, sőt lehetőségünk van egyszerre több belső változó, illetve ezek gradiensének létezését is feltételeznünk.

Miután felírtuk a kiterjesztett makroszkopikus rendszerre vonatkozó egyenleteket, az egyik tanulságos vizsgálati mód a belső változó kiküszöbölése, és az eredmény összevetése korábbról ismert modellekkel. Egy másik lehetőség az egyenletrendszer GENERIC keretrendszerbe történő beágyazása. Ennek előnye, hogy itt az állapotváltozók időfejlődését egy explicit, elsőrendű időbeli differenciálegyenlettel írjuk le, míg a probléma helyfüggését az operátoregyütthatók vezérlik. A GENERIC-es átfogalmazás lehetőséget nyújt újfajta megoldási módszerek (pl. variációs jellegűek, függvényrendszer szerinti kifejtések) alkalmazására.

A továbbiakban először [10] alapján ismertetem egy olyan belső változós modellcsalád levezetését, melyet a belső változó kiküszöbölésével kapunk. Ez a Kluitenberg– Verhás-modellcsalád, mely mind elméletileg, mind kísérletileg kitüntetett szilárdtestreológiai modell.

Ezután a megfelelő GENERIC-es leírást mutatom be. A gyakorlatban ugyan az általános, három térdimenziós tárgyalásmóddal kell dolgoznunk, azonban az egyszerűség kedvéért, valamint hogy a lényegi szempontokra figyelhessünk, először a lényegesen egyszerűbb, egydimenziós tárgyalásmódon keresztül mutatom be a belső változós szilárdtestreológia GENERIC keretbe történő beágyazását, majd azonos logika alapján megadom az általános, három térdimeziós egyenleteket is.

A levezetéseket a mérnöki gyakorlatban sokszor megengedhető, kis deformációs kö-

¹¹ Általánosabb elnevezése: dinamikai [4], hiszen nem szükségképpen belső természetű.

¹² Megjegyzendő, hogy az entrópia belső változóval történő eltolása helyett eltolhatjuk a belső energiát is, vagy akár egyszerre végezhetjük ezt az eltolást az entrópiában és a belső energiában egyaránt.

zelítésben fogjuk látni. Ekkor a sebességgradiens-tenzor szimmetrikus része közelítőleg megegyezik az alakváltozás időderiváltjával ($\dot{\varepsilon}$), valamint a ρ tömegsűrűség állandónak tekinthető.

3.1. AZ EGY TÉRDIMENZIÓS TÁRGYALÁSMÓD

3.1.1. A KIINDULÁSI RENDSZER

Az egyszerűség kedvéért, valamint, hogy a lényegi szempontokra összpontosíthassunk, először tekintsünk egy egytengelyű feszültségi állapotú feladatot. Ekkor a feszültségtenzor, az alakváltozási tenzor és a sebesség egyaránt egy-egy komponenssel reprezentálható.

Tekintsük a v sebességet, az ε alakváltozást és a T hőmérsékletet a kiterjesztetlen rendszer leírására szolgáló állapotváltozóknak, melyeket az

/ \

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} v \\ \varepsilon \\ T \end{pmatrix}$$
(117)

vektorba gyűjtünk. Mint már elhangzott, kisdeformációs tárgyalásmódban a ρ sűrűség konstansnak tekinthető, amennyiben ez a feltétel nem igaz, akkor szükséges ρ -t is felvenni az állapotváltozók közé. Itt megjegyezném, hogy a GENERIC nem ad semmiféle előírást, feltételt vagy követelményt az állapotváltozók meghatározására, így ezeket szabadon választhatjuk meg, egyedüli feltétel, hogy a későbbiekben meghatározott reverzibilis és irreverzibilis operátormátrixra vonatkozó előírások (melyeket a 2.5. alszakaszban ismertettem) teljesüljenek. A GENERIC szokásos megközelítésében ugyan a hőmérséklet helyett a belső energiát vagy entrópiát szokás használni, ez viszont valamelyest megbonyolítaná a további tárgyalásmódot (pl. hőtágulás elhanyagolása, állandó fajhő).

Kiindulásként homogén, izotrop, lineárisan rugalmas anyagi viselkedést tételezünk fel, ekkor a σ_{el} feszültség és az ε fajlagos alakváltozás közötti kapcsolatot a

$$\sigma_{\rm el}(\mathbf{x}) = \sigma_{\rm el}(\varepsilon) = E^{\parallel}\varepsilon \tag{118}$$

Hooke-törvény adja meg, ahol E^{\parallel} a Young-modulus z^{13} .

A kisdeformációs közelítésben, valamint elhanyagolva mindennemű nem tisztán rugalmas (pl. a hőtágulást vagy a képlékeny) mechanikai változásokat az egydimenziós tárgyalásmódban a

$$\dot{\varepsilon} = v' \tag{119}$$

¹³ A \parallel jelölés arra utal, hogy az E^{\parallel} Young-modulusz a hosszirányú feszültség és alakváltozás közötti arányszám. Vegyük észre, hogy az E jelölés a GENERIC-ben már foglalt, ld. energiafunkcionál.

kinematikai összefüggésünk van. A kisdeformációs közelítés további technikai bonyodalmaktól is mentes, ekkor ugyanis nem szükséges az anyagi sokaságon illetve a téridőn vett leírás megkülönböztetése [25].

Mivel a kiterjesztetlen rendszer tisztán rugalmas, így a Cauchy-féle mozgásegyenlet a

$$\varrho \dot{v} = \sigma' = \sigma'_{\rm el} \tag{120}$$

alakban írható, a térfogati erők elhanyagolásával. A teljes mechanikai teljesítményt a

$$(\sigma_{\rm el}v)' = \sigma_{\rm el}'v + \sigma_{\rm el}v' = \varrho v \dot{v} + E^{\parallel} \varepsilon \dot{\varepsilon} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\varrho}{2}v^2\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{E^{\parallel}}{2}\varepsilon^2\right) = \varrho \dot{e}_{\rm kin} + \varrho \dot{e}_{\rm el} \quad (121)$$

formában írhatjuk, mely a fajlagos kinetikus és rugalmas energia időderiváltjaival arányos, ahol a fajlagos kinetikus energia

$$e_{\rm kin} = \frac{1}{2}v^2,\tag{122}$$

a fajlagos rugalmas energia pedig

$$e_{\rm el} = \frac{E^{\parallel}}{2\varrho} \varepsilon^2. \tag{123}$$

A rendszer fajlagos belső energiájának hőmérsékletfüggő tagját az egyszerűség kedvéért az

$$e_{\rm th} = cT \tag{124}$$

módon választjuk, ahol c konstans fajhő. A fajlagos összenergia pedig az

$$e_{\rm tot} = e_{\rm kin} + e_{\rm el} + e_{\rm th} = \frac{1}{2}v^2 + \frac{E^{\parallel}}{2\varrho}\varepsilon^2 + cT$$
 (125)

összeg.

A termodinamika első főtétele (azaz a belső energia mérlegegyenlete) a

$$\rho \dot{e}_{\text{tot}} = -j'_e + (\sigma_{\text{el}}v)' \tag{126}$$

alakban írható, ahol j_e a hőáramsűrűség. Mivel a mechanikai szempontokra szeretnénk fókuszálni, a hővezetést elhanyagoljuk – ennél fogva $j_e = 0$ –, így (126) a

$$\varrho(\dot{e}_{\rm kin} + \dot{e}_{\rm el} + \dot{e}_{\rm th}) = (\sigma_{\rm el}v)' \tag{127}$$

alakra egyszerűsödik, melyből (121) felhasználásával a fajlagos termikus energiára az

$$\dot{e}_{\rm th} = c\dot{T} = 0 \tag{128}$$

összefüggést kapjuk. Az entrópia mérlegegyenlete

$$\varrho \dot{s} = -j'_s + \pi_s, \tag{129}$$

viszont a nemegyensúlyi termodinamikában szokásos $j_s = \frac{1}{T} j_e$ entrópiaáram a hővezetés elhanyagolása miatt szintén zérus. Behelyettesítve ebbe $\dot{e}_{th} = T\dot{s}$ -t a

$$\varrho \dot{s} = \frac{\varrho}{T} \dot{e}_{\rm th} = \frac{\varrho}{T} c \dot{T} = 0 \tag{130}$$

összefüggést kapjuk. Ezek szerint a π_s entrópiaprodukció mindaddig zérus, amíg $\dot{s} = 0$. Ez az eredményünk egybevág a várttal, hiszen a hővezetés lenne az egyetlen irreverzibilis effektus, azonban azt elhanyagoltuk. Tovább alakítva (130)-at a

$$\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}T} = \frac{1}{T}\frac{\mathrm{d}e_{\mathrm{th}}}{\mathrm{d}T} = \frac{c}{T} \tag{131}$$

egyenletre jutunk. Ebből a fajlagos entrópiára az

$$s(\mathbf{x}) = s(T) = c \ln \frac{T}{T_0} + s_0$$
 (132)

kifejezést kapjuk, melyben T_0 és s_0 tetszőleges integrálási konstansok.

3.1.2. A KITERJESZTETT RENDSZER

Az előbbi (117)-ben definiált állapováltozók mellett bevezetünk egy további, ξ -vel jelölt belső változót is, mellyel a rendszer mechanikai tulajdonságait szeretnénk kiterjeszteni. Ezt a belső változót a háromdimenziós tárgyalásmódban egy szimmetrikus, másodrendű tenzornak választjuk, mivel a feszültség és az alakváltozás között teremt korrekciót, az egy térdimenziós tárgyalásmódban pedig szintén egyetlen komponensként jelentkezik. Így a kiterjesztett rendszert leíró állapotváltozókat a

$$\hat{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} v \\ \varepsilon \\ T \\ \xi \end{pmatrix}$$
(133)

vektorba rendezzük. A belső változós módszertan szerint az entrópiát a belső változónak egy konkáv kifejezésével eltoljuk, mely a Morse-lemma figyelembe vételével egyszerűen négyzetesnek választható, azaz

$$\hat{s}(\hat{\mathbf{x}}) = s(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}\xi^2.$$
(134)

Mivel a reológia a mechanikai viselkedésben szembeszökő, így az entrópia belső változóval történő kiterjesztése mellett a feszültségben is feltételezünk egy további – nem egyensúlyi – tagot, mely szintén függ a belső változótól, így a kiterjesztett rendszer mechanikai feszültségét a

$$\sigma(\hat{\mathbf{x}}) = \sigma_{\rm el}(\mathbf{x}) + \sigma_{\rm nel}(\hat{\mathbf{x}}) \tag{135}$$

összegként keressük. Így a mozgásegyenlet a

$$\varrho \dot{v} = \sigma' = (\sigma_{\rm el} + \sigma_{\rm nel})' \tag{136}$$

alakot ölti, továbbá a mechanikai teljesítményben is megjelenik egy új, a σ_{nel} -lel arányos tag [vö. (121)-gyel]:

$$(\sigma v)' = [(\sigma_{\rm el} + \sigma_{\rm nel})v]' = (\sigma_{\rm el} + \sigma_{\rm nel})'v + \sigma_{\rm el}v' + \sigma_{\rm nel}v' = \varrho\dot{e}_{\rm kin} + \varrho\dot{e}_{\rm el} + \sigma_{\rm nel}v', \quad (137)$$

így ez a tag a belső energia mérlegegyenletében is megjelenik:

$$\varrho \dot{e} = (\sigma v)' = \varrho \dot{e}_{\rm kin} + \varrho \dot{e}_{\rm el} + \sigma_{\rm nel} v'.$$
(138)

Ezek szerint

$$\varrho \dot{e}_{\rm th} = \sigma_{\rm nel} v',$$
(139)

valamint felhasználva (124)-et a

$$\dot{T} = \frac{1}{\varrho c} \sigma_{\rm nel} v' \tag{140}$$

egyenletre jutunk.

Az entrópia mérlegegyenete a

$$\dot{\rho s} = \pi_{\hat{s}} \tag{141}$$

alakban írható, ahol ismét felhasználva az $\dot{e}_{\rm th}=T\dot{s}$ összefüggést a

$$\rho \dot{\hat{s}} = \frac{\rho}{T} \dot{e}_{\rm th} - \rho \xi \dot{\xi} \tag{142}$$

összefüggésre jutunk, melybe behelyettesítve (139)-et az entrópiaprodukcióra a

$$\pi_{\hat{s}} = \frac{1}{T} \sigma_{\text{nel}} v' - \varrho \xi \dot{\xi}$$
(143)

kifejezést kapjuk.

Az entrópiaprodukció pozitív definitségét a

$$\sigma_{\rm nel} = l_{11}v' + l_{12}(-\varrho T\xi), \tag{144}$$

$$\dot{\xi} = l_{21}v' + l_{22}(-\varrho T\xi)$$
 (145)

onsageri egyenletekkel biztosítjuk, melyben az l_{ij} párközi vezetési mátrix együtthatóira bizonyos feltételek fennállása szükséges. Helyettesítsük (144)–(145)-öt (143)-ba, így a

$$T\pi_{\hat{s}} = l_{11}v^{\prime 2} + (l_{12} + l_{21})v^{\prime}(-\varrho T\xi) + l_{22}(-\varrho T\xi)^2 \ge 0$$
(146)

összefüggésre jutunk, majd ezt egy kvadratikus kifejezéssé alakítjuk:

$$\begin{pmatrix} v' & -\varrho T\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12}^{\mathbf{S}} \\ l_{12}^{\mathbf{S}} & l_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v' \\ -\varrho T\xi \end{pmatrix} \ge 0,$$
(147)

melyben $l_{12}^{S} = \frac{1}{2}(l_{12} + l_{21})$ az *l* mátrix szimmetrikus részének offdiagonális eleme. Az entrópiaprodukció pozitív definit volta az *l*^S mátrix pozitív definitéségét követeli meg. Ehhez a Sylvester-kritérium szerint az l_{ij} együtthatókra a

$$l_{11} \ge 0, \quad l_{22} \ge 0, \quad \det l^{\mathsf{S}} \ge 0$$
 (148)

egyenlőtlenségek szükségesek. Ezek a feltételek egymástól nem függetlenek, a harmadikból illetve az első kettő közül az egyikből egyértelműen következik a másik. Az l_{ij} együtthatók nem feltétlenül állandók, például hőmérsékletfüggők lehetnek, azonban a továbbiakban ezek állandóságát feltételezzük. Vegyük észre, hogy a párközi vezetési mátrixnak csak az $l^{\rm S}$ szimmetrikus része generál irreverzibilitást, az $l^{\rm A}$ antiszimmetrikus rész nem járul hozzá az entrópia növeléséhez, ez a (144)–(145) onsageri egyenletek reverzibilis– irreverzibilis részre bontásával könnyen látható:

$$\sigma_{\rm nel} = \left[l_{12}^{\rm A}(-\varrho T\xi) \right] + \left[l_{11}v' + l_{12}^{\rm S}(-\varrho T\xi) \right],\tag{149}$$

$$\dot{\xi} = \left[-l_{12}^{A} v' \right] + \left[l_{12}^{S} v' + l_{22} (-\varrho T \xi) \right].$$
(150)

Megjegyzendő, hogy egy másik lehetőség az entrópiaprodukció pozitív definitségének biztosítására a

$$\sigma_{\rm nel} = m_{11}v' + m_{12}\dot{\xi},\tag{151}$$

$$(-\varrho T\xi) = m_{21}v' + m_{22}\dot{\xi}$$
(152)

onsageri egyenletek választása. Az előbbi lépéseket követve az m_{ij} együtthatókra teljesülendő feltételek:

$$m_{11} \ge 0, \quad m_{22} \ge 0, \quad \det m^{\mathbf{S}} \ge 0.$$
 (153)

Feltehető a kérdés, hogy melyiket érdemes ezek közül használni? A későbbiekben megmutatjuk, hogy a (144)–(145) egyenleteket használva a lehetséges paramétertaromány pereme csak végtelenbeli határértékkel képezhető, míg a (151)–(152) egyenletekkel a paramétertartomány pereme is természetes módon lefedésre kerül. A GENERIC keretrendszerbe történő beágyazáskor azonban célszerű a (144)–(145) egyenletek használata, mivel így a ξ belső változóra közvetlenül időbeli differenciálegyenletet kapunk. Így meghatároztuk a kiterjesztett rendszer leíró egyenleteit. A továbbiakban először a belső változó kiküszöbölésével adódó reológiai modellcsaládot [10] ismertetem, majd saját eredményeim következnek: a belső változós modell GENERIC-es alakra átfogalmazása.

3.1.3. A BELSŐ VÁLTOZÓ KIKÜSZÖBÖLÉSE: A KLUITENBERG-VERHÁS-MODELLCSALÁD

Tételezzük fel, hogy (144)–(145)-ben az l_{11} , $\rho T l_{12}$, l_{21} és $\rho T l_{22}$ együtthatók egy folyamat mentén jó közelítéssel állandók. (144)–(145)-ben (119) alapján áttérünk v'-ről $\dot{\varepsilon}$ ra. Ekkor a ξ belső változó kiküszöbölése egyszerű. Írjuk át (145)-öt olyan alakra, ahol egy differenciáloperátor hat ξ -re:

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} + \varrho T l_{22}\right) \xi = l_{21} \dot{\varepsilon}. \tag{154}$$

Hattassuk a $\left(\frac{d}{dt} + \rho T l_{22}\right)$ operátort (144)-re, majd felhasználva (154)-et a

$$\varrho T l_{22} \sigma_{\text{nel}} + \dot{\sigma}_{\text{nel}} = \varrho T (\det l) \dot{\varepsilon} + l_{11} \ddot{\varepsilon}$$
(155)

egyenletre jutunk. Ezt $\sigma_{\mathrm{nel}} = \sigma - E^{\parallel} \varepsilon$ alapján a

$$\sigma + \frac{1}{\varrho T l_{22}} \dot{\sigma} = E^{\parallel} \varepsilon + \left(\frac{\det l}{l_{22}} + \frac{E^{\parallel}}{\varrho T l_{22}} \right) \dot{\varepsilon} + \frac{l_{11}}{\varrho T l_{22}} \ddot{\varepsilon}$$
(156)

alakra hozhatjuk. Így egy olyan reológiai modellcsaládra jutottunk, mely a feszültséget az első, az alakváltozást a második időderiváltig bezárólag tartalmazza. Az ilyen modellt $(0,1 \approx 0,1,2)$ -vel jelölhetjük, mely a jelenlevő deriváltak rendjére utal. Az együtthatók tömörebb jelölésével a modell kompakt formája:

$$\sigma + \tau \dot{\sigma} = E_0 \varepsilon + E_1 \dot{\varepsilon} + E_2 \ddot{\varepsilon},\tag{157}$$

ahol¹⁴

$$\tau = \frac{1}{\varrho T l_{22}} > 0, \quad E_0 = E^{\parallel}, \quad E_1 = \frac{\det l}{l_{22}} + \frac{E_0}{\varrho T l_{22}} \ge \frac{E_0}{\varrho T l_{22}} > 0, \quad E_2 = \frac{l_{11}}{\varrho T l_{22}} \ge 0, \quad (158)$$

az együtthatókra adódó szükséges és elégséges termodinamikai feltételeket is feltüntettük. Látható, hogy a $\tau = 0$ és $E_1 = 0$ esetek ki vannak zárva, így a $(0 \approx 0)$ Hooke-modell nincs közvetlenül lefedve, csak az $l_{22} \rightarrow \infty$ határesetként érhető el.

¹⁴ Megjegyzés: a τ idő dimenziójú együttható hasonló jellegű kiterjesztést jellemez, mint a relaxációs idő a Fourier-törvényen túli hővezetés Maxwell–Cattaneo–Vernotte- és Guyer–Krumhanslegyenleteiben.

Ez a kellemetlenség a (151)–(152) egyenletek alkalmazásával könnyen kezelhető. Hasonló lépéseket követünk, mint az előbb tettük; most (152) egyenletet alakítjuk át úgy, hogy ξ -re egy differenciáloperátor hasson:

$$\left(m_{22}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} + \varrho T\right)\xi = -m_{21}\dot{\varepsilon},\tag{159}$$

majd az így felismert $(m_{22}\frac{d}{dt} + \rho T)$ operátort (151)-re hattatjuk, valamint (159) felhasználásával a

$$\varrho T \sigma_{\rm nel} + m_{22} \dot{\sigma}_{\rm nel} = \varrho T m_{11} \dot{\varepsilon} + \det m \ddot{\varepsilon} \tag{160}$$

egyenletet kapjuk. Ismét a $\sigma_{\rm nel}=\sigma-E^{\parallel}\varepsilon$ behelyettesítéssel élve a

$$\sigma + \frac{m_{22}}{\varrho T} \dot{\sigma} = E^{\parallel} \varepsilon + \left(m_{11} + \frac{m_{22}}{\varrho T} E^{\parallel} \right) \dot{\varepsilon} + \frac{\det m}{\varrho T} \ddot{\varepsilon}$$
(161)

összefüggésre jutunk. Látható, hogy ismételten egy $(0,1 \approx 0,1,2)$ reológiai modellcsaládra jutunk, melynek kompakt alakja megegyezik (157)-tel, ahol most az együtthatókra teljesülendő feltételek:

$$\tau = \frac{m_{22}}{\varrho T} \ge 0, \qquad E_0 = E^{\parallel}, \qquad E_1 = m_{11} + \frac{m_{22}}{\varrho T} E_0 \ge 0, \qquad E_2 = \frac{\det m}{\varrho T} \ge 0.$$
 (162)

Ezt a reológiai modellcsaládot Kluitenberg-Verhás-modellcsaládnak nevezzük.

3.1.4. A modell beágyazása a GENERIC keretelméletbe

A most következőkben a 3.1.2. alalszakaszban ismertetett belső változós reológiai modellt a GENERIC formalizmus nyelvére ültetem át. A teendők a következők: felírni az energia- és entrópiafunkcionált, majd olyan M_- , M_+ operátorokat találni, melyek a (86)–(87) degenerációs feltételeket is kielégítik, és az elvárt időfejlődést biztosítják a (85) egyenlet formájában. Ezután megvizsgálandó M_- antiszimmetrikus és M_+ szimmetrikus volta, továbbá a Jacobi-azonosság teljesülése.

Mivel az alkalmas operátorok megtalálása nehéz feladat, fokozatosan, több lépésben érdemes haladni. Ezért indulásként tekintsük a kiterjesztetlen – rugalmas – rendszert. Az energia- és entrópiafunkcionál ekkor az

$$E(\mathbf{x}) = \int \varrho e_{\text{tot}} dr = \int \left(\frac{\varrho}{2}v^2 + \frac{E^{\parallel}}{2}\varepsilon^2 + \varrho cT\right) dr,$$
(163)

$$S(\mathbf{x}) = \int \rho s dr = \int \left(\rho c \ln \frac{T}{T_0} + \rho s_0\right) dr$$
(164)

alakban írhatók15, ezeknek az állapotváltozók szerinti funkcionálderiváltja pedig

$$\frac{\delta E}{\delta \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \varrho v \\ E^{\parallel} \varepsilon \\ \varrho c \end{pmatrix}, \qquad \qquad \frac{\delta S}{\delta \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\varrho c}{T} \end{pmatrix}. \tag{165}$$

Az állapotváltozók időfejlődési egyenlete

$$\begin{pmatrix} \dot{v} \\ \dot{\varepsilon} \\ \dot{T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E^{\parallel}}{\varrho} \varepsilon' \\ v' \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad (166)$$

melyet (85)-tel összehasonlítva a reverzibilis és irreverzibilis operátormátrix leolvasható:

$$\mathbf{M}_{-} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\varrho} \partial_{r} & 0\\ \frac{1}{\varrho} \partial_{r} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{M}_{+} = \mathbf{0}.$$
(167)

Látható, hogy az M_+ operátor azonosan zérus (így pozitív szemidefinit és szimmetrikus), ami annak a következménye, hogy minden irreverzibilitást elhanyagoltunk. A GENERIC-ben előírt

$$\mathbf{M}_{-} \cdot \frac{\delta S}{\delta \mathbf{x}} = 0, \qquad \mathbf{M}_{+} \cdot \frac{\delta E}{\delta \mathbf{x}} = 0$$
 (168)

vegyes feltételek triviálisan teljesülnek, azonban M_{-} antiszimmetriáját és a Jacobiazonosság teljesülését ellenőrizni kell. Az antiszimmetrikusság¹⁶ a következőképpen látható be:

$$[A,B]_{-} = \int \frac{\delta A}{\delta \mathbf{x}} \cdot \mathbf{M}_{-} \cdot \frac{\delta B}{\delta \mathbf{x}} dr = \int \begin{pmatrix} \frac{\delta A}{\delta v} & \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} & \frac{\delta A}{\delta T} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\varrho} \partial_{r} & 0 \\ \frac{1}{\varrho} \partial_{r} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\delta B}{\delta v} \\ \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta B}{\delta T} \end{pmatrix} dr = \int \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\delta A}{\delta v} \partial_{r} \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} + \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \partial_{r} \frac{\delta B}{\delta v} \right) dr.$$
(169)

 $^{^{15}}$ Az egyetlen helyváltozót r jelöli – az x jelölés a GENERIC-ben foglalt (az állapotjellemzők vektorára).

¹⁶ Operátormátrixok szimmetrikus–antiszimmetrikus volta közvetlen leolvasással is megállapítható, de ne feledjük, hogy ilyenkor nemcsak a mátrix-értelemben vett transzponálásra van szükség, hanem az operátor adjungáltjának képzésére is. Elsőrendű térderivált esetén ez előjelváltással jár.

Végezzünk mindkét tagban parciális integrálást:

$$\int \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\delta A}{\delta v} \partial_r \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} + \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \partial_r \frac{\delta B}{\delta v} \right) dr =$$

$$= \int \frac{1}{\varrho} \partial_r \left(\frac{\delta A}{\delta v} \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} + \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \frac{\delta B}{\delta v} \right) dr - \int \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{\delta B}{\delta v} \partial_r \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \right) dr,$$
(170)

feltételezve, hogy a felületi tagok eltűnnek, így az első integrál értéke nulla. Alakítsuk tovább a második integrált:

$$-\int \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{\delta B}{\delta v} \partial_r \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \right) dr = -\int \left(\frac{\delta B}{\delta v} \quad \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \quad 0 \right) \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{\varrho} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} \\ \frac{1}{\varrho} \partial_r \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \\ 0 \end{pmatrix} dr =$$

$$= -\int \left(\frac{\delta B}{\delta v} \quad \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \quad 0 \right) \cdot \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\varrho} \partial_r & 0 \\ \frac{1}{\varrho} \partial_r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\delta A}{\delta v} \\ \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \\ 0 \end{pmatrix} dr,$$
(171)

mivel M_{-} harmadik sora és oszlopa is nulla, így (171)-et a

$$-\int \left(\frac{\delta B}{\delta v} \quad \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \quad \frac{\delta B}{\delta T}\right) \cdot \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\varrho}\partial_r & 0\\ \frac{1}{\varrho}\partial_r & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\delta A}{\delta v}\\ \frac{\delta A}{\delta \varepsilon}\\ \frac{\delta A}{\delta T} \end{pmatrix} dr,$$
(172)

alakra írhatjuk, melyet összevetve (169)-cel már megállapítható, hogy

$$[A,B]_{-} = -[B,A]_{-}, \tag{173}$$

azaz \mathbf{M}_{-} antiszimmetriáját így beláttuk. A Jacobi-azonosság teljesülését [26] alapján, az ott mellékelt *Wolfram Mathematica* programmal ellenőriztem¹⁷.

Tekintsük most a kiterjesztett rendszert, ekkor az energiafunkcionál nem változik, azonban az entrópiafunkcionálban megjelik egy, a belső változótól is függő tag, azaz

$$\hat{E}(\hat{\mathbf{x}}) = E(\mathbf{x}) = \int \varrho e_{\text{tot}} dr = \int \left(\frac{\varrho}{2}v^2 + \frac{E^{\parallel}}{2}\varepsilon^2 + \varrho cT\right) dr, \qquad (174)$$

$$\hat{S}(\hat{\mathbf{x}}) = \int \varrho \hat{s} dr = \int \left(\varrho c \ln \frac{T}{T_0} + \varrho s_0 - \frac{\varrho}{2} \xi^2 \right) dr.$$
(175)

A kiterjesztett állapotváltozó vektor szerinti funkcionálderiváltak ekkor

$$\frac{\delta \hat{E}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} \varrho v \\ E^{\parallel} \varepsilon \\ \varrho c \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \qquad \frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\varrho c}{T} \\ -\varrho \xi \end{pmatrix}.$$
(176)

¹⁷ A program használatát, ill. az azzal kapott eredményeket a B Függelékben közlöm.

Az állapotváltozók időfejlődési egyenletének felírásához szükségünk van az onsageri egyenletek ismeretére. A két lehetőség közül most (144)–(145)-öt választjuk; az előző szakaszban ugyan láttuk, hogy ezzel a választással a paramétertartomány egy része nem kerül lefedésre, azonban (145) ξ időfejlődését közvetlenül fejezi ki. Mivel a (84) egyenlet ezen állapotváltozók időfejlődését egy reverzibilis és egy irreverzibilis tag időfejlődésének összegeként keresi, ezért célszerű az onsageri egyenletek (149)–(150) alakját használnunk, mivel azok a tagok, melyek az l párközi vezetési mátrix l^A antiszimmetrikus részével szorzódnak, nem növelik az entrópiát, tehát a reverzibilis részhez tartoznak, míg a többi tag az irreverzibilis részhez. Ezek alapján az állapotváltozók időfejlődési egyenletét az

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} \dot{v} \\ \dot{\varepsilon} \\ \dot{T} \\ \dot{\xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varrho} (\sigma_{\rm el} + \sigma_{\rm nel})' \\ v' \\ \frac{1}{\varrho c} \sigma_{\rm nel} v' \\ l_{21} v' + l_{22} (-\varrho T \xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E^{\parallel}}{\varrho} \varepsilon' - l_{12}^{\rm A} (T \xi)' \\ v' \\ - \frac{l_{12}^{\rm A}}{c} T \xi v' \\ - l_{12}^{\rm A} v' \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left(\frac{l_{11}}{\varrho} v' - l_{12}^{\rm S} T \xi \right)' \\ 0 \\ \frac{l_{11}}{\varrho c} v'^2 - \frac{l_{12}^{\rm S}}{c} T \xi v' \\ l_{12}^{\rm S} v' - l_{22} \varrho T \xi \end{pmatrix}$$
(177)

alakban írhatjuk, ahol az utolsó egyenlőségjel után szereplő első tag a reverzibilis rész időfejlődése, a második pedig az irreverzibilis részé.

A (85) egyenlet alapján most előállítjuk a reverzibilis és irreverzibilis operátormátrixot, (85) szerint

$$\begin{pmatrix} \frac{E^{\parallel}}{\varrho}\varepsilon' - l_{12}^{\mathrm{A}}(T\xi)'\\ v'\\ -\frac{l_{12}^{\mathrm{A}}}{c}T\xi v'\\ -l_{12}^{\mathrm{A}}v' \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{M}}_{-} \cdot \begin{pmatrix} \varrho v\\ E^{\parallel}\varepsilon\\ \varrho c\\ 0 \end{pmatrix}, \qquad (178)$$

ez alapján a reverzibilis operátormátrix első oszlopa, az első sor második és harmadik eleme könnyen számolható, valamint megállapíthatjuk, hogy ezeken, illetve az első sor negyedik elemén kívül minden más komponens nulla, eszerint:

$$\begin{pmatrix} \frac{E^{\parallel}}{\varrho}\varepsilon' - l_{12}^{\mathrm{A}}(T\xi)'\\ v'\\ -\frac{l_{12}^{\mathrm{A}}}{c}T\xiv'\\ -l_{12}^{\mathrm{A}}v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\varrho}\partial_{r} & -\frac{l_{12}^{\mathrm{A}}}{\varrho}\partial_{r}(T\xi\cdot) & (\hat{M}_{-})_{14}\\ \frac{1}{\varrho}\partial_{r} & 0 & 0 & 0\\ -\frac{l_{12}^{\mathrm{A}}}{\varrho}T\xi\partial_{r} & 0 & 0 & 0\\ -\frac{l_{12}^{\mathrm{A}}}{\varrho}\partial_{r} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varrho v\\ E^{\parallel}\varepsilon\\ \varrho c\\ 0 \end{pmatrix} .$$
(179)

Megállapíthatjuk, hogy $(\hat{M}_{-})_{14}$ ennek az egyenletnek teljesülése szempontjából bármi lehetne, azonban a GENERIC keretrendszer az $\hat{\mathbf{M}}_{-}$ antiszimmetriáját írja elő, így $(\hat{M}_{-})_{14}$

 $-\big)_{14}$ -t $\big(\hat{M}_{-}\big)_{41}$ alapján számíthatjuk, így végül a reverzibilis operátormátrixra az

$$\hat{\mathbf{M}}_{-} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\varrho}\partial_{r} & -\frac{l_{12}^{A}}{\varrho c}\partial_{r}(T\xi \cdot) & -\frac{l_{12}^{A}}{\varrho}\partial_{r} \\ \frac{1}{\varrho}\partial_{r} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{12}^{A}}{\varrho c}T\xi\partial_{r} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{12}^{A}}{\varrho}\partial_{r} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(180)

eredményt kaptuk. A GENERIC által előírt feltételek ellenőrizendők. Az

$$\hat{\mathbf{M}}_{-} \cdot \frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\varrho} \partial_r & -\frac{l_{12}^A}{\varrho c} \partial_r (T\xi \cdot) & -\frac{l_{12}^A}{\varrho} \partial_r \\ \frac{1}{\varrho} \partial_r & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{12}^A}{\varrho c} T\xi \partial_r & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{12}^A}{\varrho c} \partial_r & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\varrho c}{T} \\ -\varrho \xi \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{l_{12}^A}{\varrho c} \partial_r (T\xi \frac{\varrho c}{T}) + \frac{l_{12}^A}{\varrho} \partial_r (\varrho \xi) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(181)$$

vegyes feltétel tehát teljesül (ne feledjük: a ρ tömegsűrűség és a c fajhő konstans).

Az antiszimmetria közvetlenül is látható, de az antiszimmetrikus zárójel segítségével is ellenőrizhetjük¹⁸:

$$\begin{split} [A,B]_{-} &= \int \frac{\delta A}{\delta \hat{\mathbf{x}}} \cdot \hat{\mathbf{M}}_{-} \cdot \frac{\delta B}{\delta \hat{\mathbf{x}}} \mathrm{d}r = \\ &= \int \left(\frac{\delta A}{\delta v} \cdot \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \cdot \frac{\delta A}{\delta T} \cdot \frac{\delta A}{\delta \xi} \right) \cdot \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\varrho} \partial_{r} & -\frac{l_{12}^{A}}{\varrho c} \partial_{r} (T\xi \cdot) & -\frac{l_{12}^{A}}{\varrho} \partial_{r} \\ \frac{1}{\varrho} \partial_{r} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{12}^{A}}{\varrho c} T\xi \partial_{r} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{12}^{A}}{\varrho} \partial_{r} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\delta B}{\delta v} \\ \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta B}{\delta \xi} \\ \frac{\delta B}{\delta \xi} \end{pmatrix} \mathrm{d}r = \end{split}$$

$$= \int \frac{1}{\varrho} \left[\frac{\delta A}{\delta v} \partial_r \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} - \frac{\delta A}{\delta v} \frac{l_{12}^{A}}{c} \partial_r \left(T \xi \frac{\delta B}{\delta T} \right) - \frac{\delta A}{\delta v} l_{12}^{A} \partial_r \frac{\delta B}{\delta \xi} + \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \partial_r \frac{\delta B}{\delta v} - \frac{\delta A}{\delta T} \frac{l_{12}^{A}}{c} T \xi \partial_r \frac{\delta B}{\delta v} - \frac{\delta A}{\delta \xi} l_{12}^{A} \partial_r \frac{\delta B}{\delta v} \right] \mathrm{d}r,$$
(182)

¹⁸ Az antiszimmetrikus zárójel előállítása a Jacobi-azonosság ellenőrzéséhez is szükséges, ld. B Függelék.

parciálisan integrálva ezt a kifejezést, majd élve a feltételezéssel, hogy a felületi tagok eltűnnek, a

$$-\int \frac{1}{\varrho} \left[\frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} - \frac{l_{12}^{A}}{c} T \xi \frac{\delta B}{\delta T} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} - l_{12}^{A} \frac{\delta B}{\delta \xi} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{\delta B}{\delta v} \partial_r \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} - \frac{l_{12}^{A}}{c} \frac{\delta B}{\delta v} \partial_r \left(T \xi \frac{\delta A}{\delta T} \right) - l_{12}^{A} \frac{\delta B}{\delta v} \partial_r \frac{\delta A}{\delta \xi} \right] dr$$

$$(183)$$

kifejezésre jutunk. Követve a kiterjesztendő rendszernél alkalmazottakat, először a B funkcionál deriváltjait egy vektorba gyűjtve, majd az A funkcionál deriváltjait is, újonnan megállapítható, hogy $[A, B]_{-} = -[B, A]_{-}$.

A Jacobi-azonosságot ismét [26] alapján vizsgáltam: az a figyelemreméltó eredmény adódik, hogy a Jacobi-azonosság nem teljesül.

Ezután térjünk rá az $\hat{\mathbf{M}}_+$ mátrixra. Ennek előállítása lényegesen nehezebb feladat, mint a reverzibilis operátormátrix megkonstruálása. Egy hasznos segítség ehhez, ha a disszipatív rész dinamikája egy $\hat{\Psi}$ disszipációs potenciálból származtatható a

$$\hat{\mathbf{M}}_{+} \cdot \frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \frac{\delta \hat{\Psi}(\hat{\mathbf{y}})}{\delta \hat{\mathbf{y}}} \Big|_{\hat{\mathbf{y}} = \frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{\mathbf{y}}}}$$
(184)

összefüggés alapján [6]. Keressünk disszipációs potenciált problémánkhoz! Fontos azonban felismernünk, hogy mivel $\frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{x}}$ első két eleme nulla, így ezzel a módszerrel az \hat{M}_+ -nak csak a jobb alsó 2 × 2-es almátrixát tudjuk majd meghatározni, a továbblépéshez a GE-NERIC megkövetelte feltételeket kell majd lépésről lépésre, önállóan biztosítanunk.

Mivel $\hat{\mathbf{M}}_+$ az entrópiaprodukciót hivatott reprezentálni a GENERIC formalizmusban, így a disszipációs potenciál az entrópiaprodukcióból térintegrálással származtatható, egy érdektelen additív konstans erejéig, tehát nem kell mást tennünk, mint a (147) egyenletben az *l* mátrixot jobbról és balról szorzó vektorról áttérnünk az $\hat{\mathbf{y}}$ vektorra, így az $\hat{\mathbf{M}}_+$ mátrix jobb alsó 2 × 2-es almátrixa az a mátrix lesz, melyet $\hat{\mathbf{y}}$ szoroz jobbról és balról, tehát

$$\hat{\Psi}\left(\frac{\delta\hat{S}}{\delta\hat{\mathbf{x}}}\right) = \frac{1}{2}\int \pi_s \mathrm{d}r = \frac{1}{2}\int \left(\frac{\varrho c}{T} - \varrho\xi\right) \begin{pmatrix} \frac{l_{11}}{\varrho^2 c^2} T v'^2 & \frac{l_{12}^s}{\varrho c} T v'\\ \frac{l_{12}^s}{\varrho c} T v' & l_{22}T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\varrho c}{T}\\ - \varrho\xi \end{pmatrix} \mathrm{d}r. \quad (185)$$

Ezek szerint az $\hat{\mathbf{M}}_+$ irreverzibilis operátormátrixot az

$$\hat{\mathbf{M}}_{+} = \begin{pmatrix} (\hat{M}_{+})_{11} & (\hat{M}_{+})_{12} & (\hat{M}_{+})_{13} & (\hat{M}_{+})_{14} \\ (\hat{M}_{+})_{21} & (\hat{M}_{+})_{22} & (\hat{M}_{+})_{23} & (\hat{M}_{+})_{24} \\ (\hat{M}_{+})_{31} & (\hat{M}_{+})_{32} & \frac{l_{11}}{\varrho^{2}c^{2}}Tv'^{2} & \frac{l_{12}^{8}}{\varrho c}Tv' \\ (\hat{M}_{+})_{41} & (\hat{M}_{+})_{42} & \frac{l_{12}^{8}}{\varrho c}Tv' & l_{22}T \end{pmatrix}.$$
(186)

alakban keressük. Feltételezve, hogy az ε alakváltozást az irreverzibilitás nem befolyásolja, az $\hat{\mathbf{M}}_+$ második sora és – a szimmetria miatt – a második oszlopa csupa zérus elemből áll:

$$\hat{\mathbf{M}}_{+} = \begin{pmatrix} (\hat{M}_{+})_{11} & 0 & (\hat{M}_{+})_{13} & (\hat{M}_{+})_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (\hat{M}_{+})_{31} & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^{2}c^{2}}Tv'^{2} & \frac{l_{12}^{5}}{\varrho c}Tv' \\ (\hat{M}_{+})_{41} & 0 & \frac{l_{12}^{5}}{\varrho c}Tv' & l_{22}T \end{pmatrix}.$$
(187)

A maradék öt ismeretlen elemet úgy határozhatjuk meg, hogy biztosítjuk az $\hat{\mathbf{M}}_{-} \cdot \frac{\delta \hat{E}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \mathbf{0}$ degeneráltsági feltételt, valamint figyelembe vesszük $\hat{\mathbf{M}}_{+}$ szimmetriáját. A degeneráltsági feltétel részletesen az

$$\begin{pmatrix} (\hat{M}_{+})_{11} & 0 & (\hat{M}_{+})_{13} & (\hat{M}_{+})_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ (\hat{M}_{+})_{31} & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^{2}c^{2}}Tv'^{2} & \frac{l_{12}^{8}}{\varrho c}Tv' \\ (\hat{M}_{+})_{41} & 0 & \frac{l_{12}^{8}}{\varrho c}Tv' & l_{22}T \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varrho v \\ E^{\parallel}\varepsilon \\ \varrho c \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(188)

alakban adható meg. $(\hat{M}_{+})_{31}$ és $(\hat{M}_{+})_{41}$ rögtön meghatározható, majd a szimmetria figyelembe vételével $(\hat{M}_{+})_{13}$ és $(\hat{M}_{+})_{14}$ egyszerűen adódik, ekkor az

$$\hat{\mathbf{M}}_{+} = \begin{pmatrix} \left(\hat{M}_{+}\right)_{11} & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^2 c} \partial_r (Tv' \cdot) & \frac{l_{12}^s}{\varrho} \partial_r (T \cdot) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{11}}{\varrho^2 c} Tv' \partial_r & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^2 c^2} Tv'^2 & \frac{l_{12}^s}{\varrho c} Tv' \\ -\frac{l_{12}^s}{\varrho} T \partial_r & 0 & \frac{l_{12}^s}{\varrho c} Tv' & l_{22} T \end{pmatrix}$$
(189)

mátrixra jutunk.

Ellenőrizzük, hogy az $\hat{\mathbf{M}}_{-} \cdot \frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \hat{\mathbf{x}}_{\text{irr}}$ feltétel teljesül-e! Mivel a jobb alsó 2 × 2-es almátrixot a $\hat{\Psi}$ disszipációs potenciál segítségével határoztuk meg, $\frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{\mathbf{x}}}$ első két eleme pedig zérus, így elegendő az $(\hat{M}_{+})_{13} \frac{\varrho c}{T} + (\hat{M}_{+})_{14}(-\varrho\xi)$ összefüggés vizsgálata, mely a már meghatározott mátrixelemekkel

$$\frac{l_{11}}{\varrho^2 c} \partial_r(\varrho c v') + \frac{l_{12}^{\mathbf{S}}}{\varrho} \partial_r(-T \varrho \xi) = \left(\frac{l_{11}}{\varrho} v' - l_{12}^{\mathbf{S}} T \xi\right)',\tag{190}$$

mely valóban az $\hat{\mathbf{x}}_{irr}$ első eleme, tehát ezek a mátrixelemek megfelelnek. Ezután $(\hat{M}_+ +)_{11}$ -t már könnyen számolhatjuk a degeneráltsági kritériumból, így az $\hat{\mathbf{M}}_+$ irreverzibilis operátormátrix végső alakja

$$\hat{\mathbf{M}}_{+} = \begin{pmatrix} -\frac{l_{11}}{\varrho^2} \partial_r (T\partial_r \cdot) & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^2 c} \partial_r (Tv' \cdot) & \frac{l_{12}^s}{\varrho} \partial_r (T \cdot) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{11}}{\varrho^2 c} Tv' \partial_r & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^2 c^2} Tv'^2 & \frac{l_{12}^s}{\varrho c} Tv' \\ -\frac{l_{12}^s}{\varrho} T\partial_r & 0 & \frac{l_{12}}{\varrho c} Tv' & l_{22} T \end{pmatrix}.$$
(191)
Mivel $\hat{\mathbf{M}}_+$ -t a degeneráltsági kritérium figyelembe vételével állítottuk elő, így az biztosan teljesül. Ellenőrizendő továbbá $\hat{\mathbf{M}}_+$ szimmetriája és pozitív szemidefinitsége. A szimmetrikusság szemmel is látható, de a szimmetrikus zárójelek segítségével is bizonyítható:

$$\begin{split} [A,B]_{+} &= \int \frac{\delta A}{\delta \hat{\mathbf{x}}} \cdot \hat{\mathbf{M}}_{+} \cdot \frac{\delta B}{\delta \hat{\mathbf{x}}} \mathrm{d}r = \\ &= \int \left(\frac{\delta A}{\delta v} \quad \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \quad \frac{\delta A}{\delta T} \quad \frac{\delta A}{\delta \xi} \right) \cdot \left(\begin{array}{ccc} -\frac{l_{11}}{\varrho^{2}} \partial_{r}(T\partial_{r} \cdot) & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^{2}c} \partial_{r}(Tv' \cdot) & \frac{l_{12}}{\varrho} \partial_{r}(T \cdot) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{11}}{\varrho^{2}c} Tv' \partial_{r} & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^{2}c} Tv'^{2} & \frac{l_{12}}{\varrho} Tv' \\ -\frac{l_{12}}{\varrho} T\partial_{r} & 0 & \frac{l_{12}}{\varrho} Tv' & l_{22}T \end{array} \right) \cdot \left(\begin{array}{c} \frac{\delta B}{\delta v} \\ \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ -\frac{l_{12}}{\varrho} T\partial_{r} & 0 & \frac{l_{12}}{\varrho^{2}c} Tv' & l_{22}T \end{array} \right) \cdot \left(\begin{array}{c} \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ -\frac{\delta A}{\delta \tau} \frac{l_{11}}{\varrho^{2}c} Tv' \partial_{r} \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} + \frac{\delta A}{\delta T} \frac{l_{12}}{\varrho^{2}c^{2}} Tv'^{2} \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ -\frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \frac{l_{12}}{\varrho} T\partial_{r} \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} + \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \frac{l_{12}}{\varrho c} Tv' \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ -\frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \frac{l_{12}}{\varrho} T\partial_{r} \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} + \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \frac{l_{12}}{\varrho c} Tv' \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ -\frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \frac{l_{12}}{\varrho} T\partial_{r} \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} + \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \frac{l_{12}}{\varrho c} Tv' \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} \\$$

az első tagban kétszer, a második, harmadik, negyedik, ötödik és hetedik tagban pedig egyszer parciálisan integrálunk, ezután először a B, aztán a A funkcionálderiváltjait ki-gyűjtve megállapítható, hogy $[A, B]_+ = [B, A]_+$, tehát $\hat{\mathbf{M}}_+$ valóban szimmetrikus.

A pozitív szemidefinitség bizonyításához tekintsük egy tetszőleges mennyiségnek az önmagával vett szimmetrikus zárójelét, mely (192) alapján

$$\begin{split} [A,A]_{+} &= \int \frac{\delta A}{\delta \hat{\mathbf{x}}} \cdot \hat{\mathbf{M}}_{+} \cdot \frac{\delta A}{\delta \hat{\mathbf{x}}} \mathrm{d}r = \\ &= \int \left[-\frac{\delta A}{\delta v} \frac{l_{11}}{\varrho^{2}} \partial_{r} \left(T \partial_{r} \frac{\delta A}{\delta v} \right) + \frac{\delta A}{\delta v} \frac{l_{11}}{\varrho^{2} c} \partial_{r} \left(T v' \frac{\delta A}{\delta T} \right) + \frac{\delta A}{\delta v} \frac{l_{12}^{\mathrm{S}}}{\varrho} \partial_{r} \left(T \frac{\delta A}{\delta \xi} \right) - \\ &\quad - \frac{\delta A}{\delta T} \frac{l_{11}}{\varrho^{2} c} T v' \partial_{r} \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{l_{11}}{\varrho^{2} c^{2}} T v'^{2} \left(\frac{\delta A}{\delta T} \right)^{2} + \frac{\delta A}{\delta T} \frac{l_{12}^{\mathrm{S}}}{\varrho c} T v' \frac{\delta A}{\delta \xi} - \\ &\quad - \frac{\delta A}{\delta \xi} \frac{l_{12}^{\mathrm{S}}}{\varrho} T \partial_{r} \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{\delta A}{\delta \xi} \frac{l_{12}^{\mathrm{S}}}{\varrho c} T v' \frac{\delta A}{\delta T} + l_{22} T \left(\frac{\delta A}{\delta \xi} \right)^{2} \right] \mathrm{d}r. \end{split}$$

$$(193)$$

Végezzünk parciális integrálást azokon a tagokon, melyekben T-nek és/vagy v-nek sze-

repel a deriváltja. A következő alakot nyerjük:

$$\int \left[\frac{l_{11}}{\varrho^2} T \left(\partial_r \frac{\delta A}{\delta v} \right)^2 - 2 \frac{l_{11}}{\varrho^2 c} T v' \frac{\delta A}{\delta T} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} - 2 \frac{l_{12}^8}{\varrho} T \frac{\delta A}{\delta \xi} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{l_{11}}{\varrho^2 c^2} T v'^2 \left(\frac{\delta A}{\delta T} \right)^2 + 2 \frac{l_{12}^8}{\varrho c} T v' \frac{\delta A}{\delta T} \frac{\delta A}{\delta \xi} + l_{22} T \left(\frac{\delta A}{\delta \xi} \right)^2 \right] \mathrm{d}r.$$
(194)

Átalakítva az integrandust a következő kvadratikus kifejezéssé

$$\int \left(\frac{\sqrt{T}}{\varrho}\partial_r \frac{\delta A}{\delta v} - \frac{-v'\sqrt{T}}{\varrho c} \frac{\delta A}{\delta T} - \sqrt{T} \frac{\delta A}{\delta \xi}\right) \begin{pmatrix} l_{11} & l_{11} & l_{12}^{\mathsf{S}} \\ l_{11} & l_{11} & l_{12}^{\mathsf{S}} \\ l_{12}^{\mathsf{S}} & l_{12}^{\mathsf{S}} & l_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{T}}{\varrho} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} \\ -\frac{-v'\sqrt{T}}{\varrho c} \frac{\delta A}{\delta T} \\ -\sqrt{T} \frac{\delta A}{\delta \xi} \end{pmatrix} \mathrm{d}r, \qquad (195)$$

az $\hat{\mathbf{M}}_+$ operátor pozitív definitségének bizonyítását az

$$\tilde{l} = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{11} & l_{12}^{S} \\ l_{11} & l_{11} & l_{12}^{S} \\ l_{12}^{S} & l_{12}^{S} & l_{22} \end{pmatrix}$$
(196)

mátrix pozitív definitségének megmutatására vezettük vissza. Azonnal szembetűnik, hogy az első két sor és oszlop megegyezik, így a mátrix determinánsa zérus, a Sylvesterkritérium szerint adódó kritériumok megegyeznek a (148)-ban megadott kritériumokkal. Ott az l mátrix együtthatóinak értékét definiáltuk úgy, hogy az entrópiaprodukció pozitív definit kifejezés legyen, eszerint \tilde{l} is pozitív szemidefinit.

Mivel a Jacobi-azonosság az imént mutatott megközelítésben nem teljesült, ezért alkossunk meg egy másik kiosztást is !

Új kiindulópontként az állapotváltozók időfejlődését az onsageri egyenletek (144)– (145) alakjának megfelelően a

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \dot{v} \\ \dot{\varepsilon} \\ \dot{T} \\ \dot{\xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varrho} (\sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{nel}})' \\ v' \\ \frac{1}{\varrho c} \sigma_{\text{nel}} v' \\ l_{21} v' + l_{22} (-\varrho T \xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E^{\parallel}}{\varrho} \varepsilon' \\ v' \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{\varrho} (l_{11} v' - l_{12} \varrho T \xi)' \\ 0 \\ \frac{1}{\varrho c} (l_{11} v' - l_{12} \varrho T \xi) v' \\ l_{21} v' + l_{22} (-\varrho T \xi) \end{pmatrix}$$
(197)

felbontásban írjuk fel, az első tagot tervezzük a reverzibilis, a másodikat pedig az irreverzibilis időfejlődési részként realizálni. Látható, hogy ekkor a reverzibilis részbe csak a rugalmas (kiterjesztetlen) rendszer dinamikája kerül bele [vö. (166)], minden más az irreverzibilis részbe fog tartozni. Így a reverzibilis operátormátrix

mely antiszimmetrikus, kielégíti a Jacobi-azonosságot és teljesíti az $\hat{\mathbf{M}}_{-} \cdot \frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \mathbf{0}$ vegyes feltételt. Az előzőekhez hasonló lépéseket követve ekkor az irreverzibilis operátormátrixra az

$$\hat{\mathbf{M}}_{+} = \begin{pmatrix} -\frac{l_{11}}{\varrho^2} \partial_r (T \partial_r \cdot) & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^2 c} \partial_r (T v' \cdot) & \frac{l_{12}}{\varrho} \partial_r (T \cdot) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{11}}{\varrho^2 c} T v' \partial_r \cdot & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^2 c^2} T v'^2 & \frac{l_{12}}{\varrho c} T v' \\ -\frac{l_{21}}{\varrho} T \partial_r \cdot & 0 & \frac{l_{21}}{\varrho c} T v' & l_{22} T \end{pmatrix}$$
(199)

adódik. Az $\hat{\mathbf{M}}_+ \cdot \frac{\delta \hat{E}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \mathbf{0}$ vegyes feltételt természetesen kielégíti, azonban azonnal szembetűnik, hogy nem szimmetrikus ($l_{12} \neq l_{21}$ általában). A pozitív szemidefinitség vizsgálatához tekintsük ismét egy mennyiségnek önmagával vett szimmetrikus zárójelét:

$$[A,A]_{+} = \int \frac{\delta A}{\delta \hat{\mathbf{x}}} \cdot \hat{\mathbf{M}}_{+} \cdot \frac{\delta A}{\delta \hat{\mathbf{x}}} dr =$$

$$= \int \left(\frac{\delta A}{\delta v} \quad \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \quad \frac{\delta A}{\delta T} \quad \frac{\delta A}{\delta \xi}\right) \begin{pmatrix} -\frac{l_{11}}{\varrho^2} \partial_r (T\partial_r \cdot) & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^2 c} \partial_r (Tv' \cdot) & \frac{l_{12}}{\varrho} \partial_r (T \cdot) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{l_{11}}{\varrho^2 c} Tv' \partial_r \cdot & 0 & \frac{l_{11}}{\varrho^2 c^2} Tv'^2 & \frac{l_{12}}{\varrho c} Tv' \\ -\frac{l_{21}}{\varrho c} T\partial_r \cdot & 0 & \frac{l_{21}}{\varrho c} Tv' & l_{22} T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \\ \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \end{pmatrix} dr = \\ = \int \left[-\frac{\delta A}{\delta v} \frac{l_{11}}{\varrho^2} \partial_r \left(T\partial_r \frac{\delta A}{\delta v} \right) + \frac{\delta A}{\delta v} \frac{l_{11}}{\varrho^2 c} \partial_r \left(Tv' \frac{\delta A}{\delta T} \right) + \frac{\delta A}{\delta v} \frac{l_{12}}{\varrho} \partial_r \left(T \frac{\delta A}{\delta \xi} \right) - \\ -\frac{\delta A}{\delta T} \frac{l_{11}}{\varrho^2 c} Tv' \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{l_{11}}{\varrho^2 c^2} Tv'^2 \left(\frac{\delta A}{\delta T} \right)^2 + \frac{\delta A}{\delta T} \frac{l_{12}}{\varrho c} Tv' \frac{\delta A}{\delta \xi} - \\ -\frac{\delta A}{\delta \xi} \frac{l_{21}}{\varrho} T\partial_r \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{\delta A}{\delta \xi} \frac{l_{21}}{\varrho c} Tv' \frac{\delta A}{\delta T} + l_{22} T \left(\frac{\delta A}{\delta \xi} \right)^2 \right] dr.$$

$$(200)$$

Parciálisan integrálva azon tagokat, melyekben T és/vagy v deriváltjai is szerepelnek, az

$$\int \left[\frac{l_{11}}{\varrho^2} T \left(\partial_r \frac{\delta A}{\delta v} \right)^2 - 2 \frac{l_{11}}{\varrho^2 c} T v' \frac{\delta A}{\delta T} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} - \frac{l_{12} + l_{21}}{\varrho} T \frac{\delta A}{\delta \xi} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} + \frac{l_{11}}{\varrho^2 c^2} T v'^2 \left(\frac{\delta A}{\delta T} \right)^2 + \frac{l_{12} + l_{21}}{\varrho c} T v' \frac{\delta A}{\delta T} \frac{\delta A}{\delta \xi} + l_{22} T \left(\frac{\delta A}{\delta \xi} \right)^2 \right] \mathrm{d}r.$$
(201)

alakra jutunk. felhasználva az l mátrix szimmetrikus részének offdiagonális elemének $l_{12}^{S} = \frac{1}{2}(l_{12} + l_{21})$ definícióját, átalakítva az integrandust egy kvadratikus kifejezéssé, ismét a (195) eredményt kapjuk, tehát ismét az \tilde{l} mátrix pozitív definitségét kell vizsgálnunk,

mely az előbbiek szerint pozitív definit, tehát az újonnan számolt $\dot{\mathbf{M}}_+$ operátor is pozitív szemi-definit.

Összefoglalásként az mondható el, hogy a belső változós reológiai modellt két úton is beágyaztam a GENERIC keretrendszerbe, az egyik úton a GENERIC várakozásai közül az egyik, a Jacobi-azonosság, a másik út esetén pedig egy másik kívánalom, az irreverzibilis operátormátrix szimmetrikus volta sérült.

3.2. A HÁROM TÉRDIMENZIÓS TÁRGYALÁSMÓD

A három térdimenziós tárgyalásmód logikai lépései megegyeznek az egy térdimenziós tárgyalásmódban alkalmazottakkal, csak ekkor a v sebességmező vektoriális, míg a σ feszültség- és ε alakváltozási mező, továbbá a ξ belső változó tenzoriális mennyiségek.

3.2.1. A KIINDULÁSI RENDSZER

A kiterjesztetlen rendszer leírására az egy térdimenziós leírásban is alkalmazott állapotváltozókat választjuk ($\mathbf{v}, \varepsilon, T$). Az ε alakváltozási mező felbontható az egymástól független ε^d deviatorikus és ε^s gömbi részeinek összegére, ahol $\varepsilon^s = \frac{1}{3}(\operatorname{tr} \varepsilon)\mathbf{1}$ az $\mathbf{1}$ egységtenzorral arányos rész, $\varepsilon^d = \varepsilon - \varepsilon^s$ pedig a nyom nélküli rész. Ez a felbontás a későbbiekben fontos szerepet nyer; egyrészről a Hooke-törvény háromdimenziós reprezentálása ebben a felbontásban kitüntetett alakú (izotrop invariánsok szerinti felbontás), másrészről az entrópiaprodukció pozitív definitségét biztosító onsageri egyenleteket is izotrópia-okból írhatjuk fel egymástól független deviatorikus és gömbi részre. Ennélfogva a kiindulási rendszer állapotváltozóit a már ismert módon az

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{d}} \\ \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{s}} \\ T \end{pmatrix}$$
(202)

vektorba gyűjtjük.

Kiindulásként most is homogén, izotrop, lineárisan rugalmas közeget feltételezünk, a teljes, három térdimenziós tárgyalásmódban a σ szimmetrikus feszültségtenzor és az ε , szintén szimmetrikus alakváltozási tenzor közötti Hooke-törvény a

$$\boldsymbol{\sigma}_{el}(\boldsymbol{\varepsilon}) = E^{d} \boldsymbol{\varepsilon}^{d} + E^{s} \boldsymbol{\varepsilon}^{s}, \qquad E^{d} = 2G, \quad E^{s} = 3K, \tag{203}$$

alakban írható, az alakváltozási tenzor deviatorikus–gömbi felbontásában, ahol K az anyag kompressziós, G pedig a nyírási rugalmassági modulusza.

A kisdeformációs közelítésben, eltekintve a nem tisztán rugalmas változásoktól, a kinematikai egyenlet

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \left(\mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\nabla} \right)^{\mathrm{S}} \tag{204}$$

alakú, míg a térfogati erők elhanyagolásával a Cauchy-féle mozgásegyenletet a

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \overleftarrow{\nabla} = \boldsymbol{\sigma}_{\rm el} \cdot \overleftarrow{\nabla}$$
(205)

formában adhatjuk meg, a mechanikai teljesítmény pedig

$$(\boldsymbol{\sigma}_{el}\mathbf{v})\cdot \overleftarrow{\nabla} = \left(\boldsymbol{\sigma}_{el}\cdot \overleftarrow{\nabla}\right)\cdot \mathbf{v} + \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\sigma}_{el}\left(\mathbf{v}\otimes \overleftarrow{\nabla}\right)\right].$$
(206)

Mivel $\boldsymbol{\sigma}_{\rm el} = \boldsymbol{\sigma}_{\rm el}^{\rm T}$, így (206) tovább írható a

$$\left(\boldsymbol{\sigma}_{el}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\cdot\mathbf{v} + \operatorname{tr}\left[\boldsymbol{\sigma}_{el}\left(\mathbf{v}\otimes\boldsymbol{\nabla}\right)^{s}\right] = \rho\mathbf{v}\cdot\dot{\mathbf{v}} + \operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\sigma}_{el}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}\right) = = \rho\mathbf{v}\cdot\dot{\mathbf{v}} + E^{d}\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{d}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{d}\right) + E^{s}\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{s}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{s}\right) = \rho\dot{\boldsymbol{e}}_{kin} + \rho\dot{\boldsymbol{e}}_{el}$$

$$(207)$$

alakban. Ebből a fajlagos kinetikus energia

$$e_{\rm kin} = \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v},\tag{208}$$

míg a fajlagos rugalmas energia

$$e_{\rm el} = \frac{E^{\rm d}}{2\varrho} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\rm d} \boldsymbol{\varepsilon}^{\rm d} \right) + \frac{E^{\rm s}}{2\varrho} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\rm s} \boldsymbol{\varepsilon}^{\rm s} \right).$$
(209)

A hőmérsékletfüggő fajlagosenergia-tag ismét

$$e_{\rm th} = cT \tag{210}$$

alakú a c konstans fajhővel, így a fajlagos összenergia

$$e_{\text{tot}} = e_{\text{kin}} + e_{\text{el}} + e_{\text{th}} = \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \frac{E^{\text{d}}}{2\varrho} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{d}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{d}} \right) + \frac{E^{\text{s}}}{2\varrho} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{s}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{s}} \right) + cT.$$
(211)

A termodinamika első főtétele a hővezetés elhanyagolásával ($\mathbf{j}_e = \mathbf{0}$) a

$$\varrho \dot{e}_{tot} = (\boldsymbol{\sigma}_{el} \mathbf{v}) \cdot \overleftarrow{\nabla}$$
(212)

alakú, mely (207) és (211) felhasználással újfent az

$$\dot{e}_{\rm th} = c\dot{T} = 0 \tag{213}$$

alakra egyszerűsödik. Ez az egyenlet megegyezik (128)-cal, így a kiterjesztetlen három térdimenziós rendszer π_s entrópiaprodukciója szintén nulla, a fajlagos entrópia pedig ismét

$$s(\mathbf{x}) = s(T) = c \ln \frac{T}{T_0} + s_0,$$
 (214)

a T_0 és s_0 tetszőleges integrálási konstansokkal.

3.2.2. A KITERJESZTETT RENDSZER

Mivel a mechanikai tulajdonságokat szeretnénk kiterjeszteni, tehát a σ másodrendű szimmetrikus feszültségtenzor és az ε szintén másodrendű szimmetrikus alakváltozás közötti összefüggést általánosítani, így a belső változót szintén egy másodrendű szimmetrikus tenzornak választjuk. A ξ belső változót is deviatorikus és gömbi részre felbontva a kiterjesztett rendszert leíró állapotváltozóknak a

$$\hat{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \varepsilon^{d} \\ \varepsilon^{s} \\ T \\ \boldsymbol{\xi}^{d} \\ \boldsymbol{\xi}^{s} \end{pmatrix}$$
(215)

választjuk. Az egydimenziós tárgyalásban követetett gondolatmenet alapján az entrópiát ismét eltoljuk a belső változónak egy konkáv kifejezésével, így definiálva a kiterjesztett rendszer

$$\hat{s}(\hat{\mathbf{x}}) = s(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{d}} \boldsymbol{\xi}^{\mathrm{d}} \right) - \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\xi}^{\mathrm{s}} \right)$$
(216)

entrópiáját.

A belső változót a mechanikai oldalon is érvényesítjük, a feszültségben így ismét feltételezzük egy nemegyensúlyi tag jelenlétét:

$$\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{x}}) = \boldsymbol{\sigma}_{el}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\sigma}_{nel}(\hat{\mathbf{x}}). \tag{217}$$

Ezáltal a mozgásegyenlet a

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \overleftarrow{\nabla} = (\boldsymbol{\sigma}_{el} + \boldsymbol{\sigma}_{nel}) \cdot \overleftarrow{\nabla}$$
(218)

alakú, a mechanikai teljesítmény pedig:

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{v})\cdot\stackrel{\leftarrow}{\nabla} = [(\boldsymbol{\sigma}_{el} + \boldsymbol{\sigma}_{nel})\mathbf{v}]\cdot\stackrel{\leftarrow}{\nabla} = \\ = \left[(\boldsymbol{\sigma}_{el} + \boldsymbol{\sigma}_{nel})\cdot\stackrel{\leftarrow}{\nabla}\right]\cdot\mathbf{v} + \mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\sigma}_{el}\left(\mathbf{v}\otimes\stackrel{\leftarrow}{\nabla}\right)\right] + \mathrm{tr}\left[\boldsymbol{\sigma}_{nel}\left(\mathbf{v}\otimes\stackrel{\leftarrow}{\nabla}\right)\right],$$
(219)

és ismét kihasználva a feszültségtenzor szimmetriáját, valamint (204), (208), (209) és (218) alapján

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{v})\cdot \overleftarrow{\nabla} = \varrho \dot{\boldsymbol{e}}_{kin} + \varrho \dot{\boldsymbol{e}}_{el} + tr(\boldsymbol{\sigma}_{nel}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}).$$
(220)

Az energiamérleg a hővezetés elhanyagolásával

$$\varrho(\dot{e}_{\rm kin} + \dot{e}_{\rm el} + \dot{e}_{\rm th}) = \varrho\dot{e}_{\rm kin} + \varrho\dot{e}_{\rm el} + {\rm tr}(\boldsymbol{\sigma}_{\rm nel}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}), \qquad (221)$$

így

$$\dot{e}_{\rm th} = c\dot{T} = \frac{1}{\varrho}\operatorname{tr}(\boldsymbol{\sigma}_{\rm nel}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}),$$
(222)

amiből

$$\dot{T} = \frac{1}{\varrho c} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{nel}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}).$$
 (223)

Az

$$\dot{\varrho s} = \pi_{\hat{s}} \tag{224}$$

entrópia
mérleg alapján az $\dot{e}_{\rm th}=T\dot{s}$ összefüggést felhasználva az entrópia
produkcióra a

$$\pi_{\hat{s}} = \frac{1}{T} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\sigma}_{\text{nel}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \right) - \varrho \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\xi} \dot{\boldsymbol{\xi}} \right)$$
(225)

kifejezést kapjuk, melyet a továbbiakban célszerű a tenzorok deviatorikus és gömbi felbontásában felírnunk:

$$\pi_{\hat{s}} = \frac{1}{T} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\sigma}_{\text{nel}}^{\text{d}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{d}} \right) - \varrho \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\xi}^{\text{d}} \dot{\boldsymbol{\xi}}^{\text{d}} \right) + \frac{1}{T} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\sigma}_{\text{nel}}^{\text{s}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{s}} \right) - \varrho \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\xi}^{\text{s}} \dot{\boldsymbol{\xi}}^{\text{s}} \right).$$
(226)

Az entrópiaprodukció pozitív definitségét a

$$\boldsymbol{\sigma}_{nel}^{d} = l_{11}^{d} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{d} + l_{12}^{d} \left(-\varrho T \boldsymbol{\xi}^{d}\right), \qquad (227)$$

$$\dot{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{d}} = l_{21}^{\mathrm{d}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{d}} + l_{22}^{\mathrm{d}} \left(-\varrho T \boldsymbol{\xi}^{\mathrm{d}} \right) \tag{228}$$

deviatorikus részre, valamint a

$$\boldsymbol{\sigma}_{nel}^{s} = l_{11}^{s} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{s} + l_{12}^{s} (-\varrho T \boldsymbol{\xi}^{s}), \qquad (229)$$

$$\dot{\boldsymbol{\xi}}^{s} = l_{21}^{s} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{s} + l_{22}^{s} (-\varrho T \boldsymbol{\xi}^{s})$$
(230)

gömbi részre felírt, izotrópia-okból szükségszerűen szétcsatolódó onsageri egyenletekkel biztosítjuk, ahol az l_{ij}^d és l_{ij}^s együtthatókra ismét megfelelő feltételek fennállása szükséges. Helyettesítsük (227)–(230)-at (226)-ba, majd alakítsuk kvadratikus kifejezéssé: a

$$T\pi_{\hat{s}} = \operatorname{tr}\left[\begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}^{d} & -\varrho T \boldsymbol{\xi}^{d} & \dot{\varepsilon}^{s} & -\varrho T \boldsymbol{\xi}^{s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11}^{d} & \left(l_{12}^{d}\right)^{s} & 0 & 0 \\ \left(l_{12}^{d}\right)^{s} & l_{22}^{d} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l_{11}^{s} & \left(l_{12}^{s}\right)^{s} \\ 0 & 0 & \left(l_{12}^{s}\right)^{s} & l_{22}^{s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}^{d} \\ -\varrho T \boldsymbol{\xi}^{d} \\ \dot{\varepsilon}^{s} \\ -\varrho T \boldsymbol{\xi}^{s} \end{pmatrix} \right] \geq 0$$
(231)

egyenlőtlenséget kapjuk, ahol $(l_{12}^d)^s = \frac{1}{2}(l_{12}^d + l_{21}^d)$ a deviatorikus részhez, $(l_{12}^s)^s = \frac{1}{2}(l_{12}^s + l_{21}^s)$ pedig a gömbi részhez tartozó párközi vezetési mátrix szimmetrikus részének offdiagonális elemét jelöli. A szükséges feltételek a Sylvester-kritérium szerint

$$l_{11}^{d} \ge 0,$$
 $l_{22}^{d} \ge 0,$ $\det(l_{12}^{d})^{S} \ge 0,$ (232)

$$l_{11}^{s} \ge 0,$$
 $l_{22}^{s} \ge 0,$ $\det(l_{12}^{s})^{s} \ge 0.$ (233)

Ismét lehetőségünk van az entrópiaprodukció pozitív definitségének biztosítására a

$$\boldsymbol{\sigma}_{nel}^{d} = m_{11}^{d} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{d} + m_{12}^{d} \dot{\boldsymbol{\xi}}^{d}, \qquad (234)$$

$$\left(-\varrho T\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{d}}\right) = m_{21}^{\mathrm{d}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{d}} + m_{22}^{\mathrm{d}} \dot{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{d}},\tag{235}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{nel}}^{\text{s}} = m_{11}^{\text{s}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{s}} + m_{12}^{\text{s}} \dot{\boldsymbol{\xi}}^{\text{s}}, \qquad (236)$$

C

$$(-\varrho T\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{s}}) = m_{21}^{\mathrm{s}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{s}} + m_{22}^{\mathrm{s}} \dot{\boldsymbol{\xi}}^{\mathrm{s}}$$
(237)

onsageri egyenletek választásával is. Ekkor a teljesülendő feltételek:

$$m_{11}^{\rm d} \ge 0,$$
 $m_{22}^{\rm d} \ge 0,$ $\det\left(m_{12}^{\rm d}\right)^{\rm s} \ge 0,$ (238)

$$m_{11}^{\rm s} \ge 0,$$
 $m_{22}^{\rm s} \ge 0,$ $\det(m_{12}^{\rm s})^{\rm s} \ge 0.$ (239)

3.2.3. A BELSŐ VÁLTOZÓ KIKÜSZÖBÖLÉSE: A KLUITENBERG–VERHÁS-MODELLCSALÁD DEVIATORIKUS–GÖMBI ALAKJA

Mint azt az egydimenziós tárgyalásnál bemutattam, a (144)–(145) onsageri egyenletek alkalmazása esetén a megengedett paramétertartománynak van olyan része, amelyik nincs természetesen lefedve. Mivel a háromdimenziós tárgyalásmód az egydimenziós általánosítása, ezért a (227)–(228) és (229)–(230) egyenletpárok alkalmazásával hasonló eredményre jutunk, így rögtön a (234)–(235) és (236)–(237) egyenletpárok alkalmazásával mutatom be a belső változó kiküszöbölését.

Mint már azt említettem, az *m* együtthatómátrix elemei nem feltétlenül állandók, például hőmérsékletfüggők lehetnek. Amennyiben feltételezzük, hogy a hőmérséklet elfogadható közelítéssel állandó egy folyamat mentén (illetve ha a hőmérsékletváltozás magasabbrendű korrekciót jelent), akkor a $\boldsymbol{\xi}$ belső változó kiküszöbölése egyszerű. (235) egyenletet ismét átírjuk olyan alakra, amikor ξ^{d} -re egy differenciáloperátor hat:

$$\left(m_{22}^{\mathrm{d}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} + \varrho T\right)\xi^{\mathrm{d}} = -m_{21}^{\mathrm{d}}\dot{\varepsilon}^{\mathrm{d}},\tag{240}$$

majd az így felismert $m_{22}^{\rm d} \frac{\rm d}{{\rm d}t} + \varrho T$ operátort hattatva (235)-re, és felhasználva (240)-et, a

$$\rho T \boldsymbol{\sigma}_{nel}^{d} + m_{22}^{d} \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{nel}^{d} = \rho T m_{11}^{d} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{d} + \left(\det m^{d}\right) \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{d}$$
(241)

egyenletre jutunk. Mivel $\boldsymbol{\sigma}_{nel}^{d} = \boldsymbol{\sigma}^{d} - E^{d} \boldsymbol{\varepsilon}^{d}$, a

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{d}} + \frac{m_{22}^{\mathrm{d}}}{\varrho T} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{d}} = E^{\mathrm{d}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{d}} + \left(m_{11}^{\mathrm{d}} + \frac{m_{22}^{\mathrm{d}}}{\varrho T} E^{\mathrm{d}} \right) \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{d}} + \frac{\det m^{\mathrm{d}}}{\varrho T} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{d}}$$
(242)

összefüggést találjuk. Ugyanilyen lépéseket követve, a gömbi részre a

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{s}} + \frac{m_{22}^{\mathrm{s}}}{\varrho T} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{s}} = E^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{s}} + \left(m_{11}^{\mathrm{s}} + \frac{m_{22}^{\mathrm{s}}}{\varrho T} E^{\mathrm{s}} \right) \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{s}} + \frac{\det m^{\mathrm{s}}}{\varrho T} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{s}}$$
(243)

egyenlet adódik. Ezek szerint mind a deviatorikus, mind a gömbi részben egy $(0,1 \approx 0,1,2)$ reológiai modellt kaptunk, tehát a feszültség az első időderiváltig, az alakváltozás pedig a második időderiváltig bezárólag van jelen. Az együtthatók tömörebb jelölésével a modell kompakt formában:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{d}} + \tau^{\mathrm{d}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{d}} = E_0^{\mathrm{d}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{d}} + E_1^{\mathrm{d}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{d}} + E_2^{\mathrm{d}} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{d}}, \qquad (244)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{s}} + \tau^{\mathrm{s}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{s}} = E_0^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{s}} + E_1^{\mathrm{s}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{s}} + E_2^{\mathrm{s}} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{s}}, \qquad (245)$$

ahol

$$\tau^{d} = \frac{m_{22}^{d}}{\varrho T} \ge 0, \qquad E_{0}^{d} = E^{d}, \qquad E_{1}^{d} = m_{11}^{d} + \frac{m_{22}^{d}}{\varrho T} E_{0}^{d} \ge 0, \qquad E_{2}^{d} = \frac{\det m^{d}}{\varrho T} \ge 0,$$
(246)

$$\tau^{s} = \frac{m_{22}^{s}}{\varrho T} \ge 0, \qquad E_{0}^{s} = E^{s}, \qquad E_{1}^{s} = m_{11}^{s} + \frac{m_{22}^{s}}{\varrho T} E_{0}^{s} \ge 0, \qquad E_{2}^{s} = \frac{\det m^{s}}{\varrho T} \ge 0,$$
(247)

ahol ismét feltüntettük az adódó szükséges és elégséges termodinamikai követelményeket is. Összehasonlítva (244) és (245) egyenleteket (157)-tel, valamint a (246) és (247) feltételeket (162)-vel megállapítható, hogy valóban az egy térdimenziós modell általánosítására jutottunk.

3.2.4. AZ EGYENLETEK BEÁGYAZÁSA A GENERIC KERETELMÉLETBE

A három térdimenziós tárgyalásmód GENERIC-es leírását kezdjük ismét a a kiterjesztetlen rendszerrel. Ekkor az energiafunkcionál annyiban tér el a (163)-tól, hogy a rugalmas energiát már két taggal reprezentáljuk, valamint mind az energia-, mind az entrópiafunkcionál előállításához már a teljes téren, mindhárom koordinátairányban integrálnunk kell, eszerint:

$$E(\mathbf{x}) = \int_{V} \left[\frac{\varrho}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \frac{E^{d}}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{d} \boldsymbol{\varepsilon}^{d} \right) + \frac{E^{s}}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{s} \boldsymbol{\varepsilon}^{s} \right) + \varrho c T \right] \mathrm{d}V,$$
(248)

$$S(\mathbf{x}) = \int_{V} \left(\rho c \ln \frac{T}{T_0} + \rho s_0 \right) \mathrm{d}V.$$
(249)

Ezekből az energia- és entrópiagradiensre a

$$\frac{\delta E}{\delta \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \varrho \mathbf{v} \\ E^{d} \varepsilon^{d} \\ E^{s} \varepsilon^{s} \\ \varrho c \end{pmatrix}, \qquad \qquad \frac{\delta S}{\delta \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \frac{\varrho c}{T} \end{pmatrix}. \tag{250}$$

vektorok adódnak. Az állapotváltozók időfejlődési egyenlete

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathbf{v}} \\ \dot{\varepsilon}^{d} \\ \dot{\varepsilon}^{s} \\ \dot{T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varrho} \left(E^{d} \varepsilon^{d} + E^{s} \varepsilon^{s} \right) \cdot \overleftarrow{\nabla} \\ \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{d} \\ \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s} \\ \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s} \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad (251)$$

melyből a reverzibilis operátormátrix

$$\mathbf{M}_{-} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \frac{1}{\varrho}(\cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla} & \frac{1}{\varrho}(\cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla} & \mathbf{0} \\ \frac{1}{\varrho} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{\mathbf{S}} \right]^{\mathbf{d}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \frac{1}{\varrho} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{\mathbf{S}} \right]^{\mathbf{s}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$
(252)

az irreverzibilis operátormátrix pedig ismét $\mathbf{M}_+ = \mathbf{0}$. A reverzibilis operátormátrix antiszimmetriája az antiszimmetrikus zárójelekkel ellenőrizhető.

A három térdimenziós modell GENERIC egyenleteit az egydimenziós esetben bemutatottak szerint analóg módon lehet előállítani. A háromdimenziós tárgyalásmódban is lehetőségünk van mindkét lehetőség előállítására, az egydimenziós eset analógiájára ugyanazok a kijelentések érvényesek a kapott operátorokra; az első esetén a Jacobi-azonosság, a másodikban pedig az $\hat{\mathbf{M}}_+$ szimmetriája nem teljesül. A háromdimenziós tárgyalásmódban kapott eredményeket a következőkben röviden bemutatom.

A kiterjesztett rendszer esetén az energiafunkcionál nem változik, míg az entrópiafunkcionálban megjelenik a belső változótól is függő tag:

$$\hat{E}(\hat{\mathbf{x}}) = \int_{V} \left[\frac{\varrho}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \frac{E^{d}}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{d} \boldsymbol{\varepsilon}^{d} \right) + \frac{E^{s}}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\varepsilon}^{s} \boldsymbol{\varepsilon}^{s} \right) + \varrho c T \right] \mathrm{d}V,$$
(253)

$$\hat{S}(\hat{\mathbf{x}}) = \int_{V} \left[\varrho c \ln \frac{T}{T_0} + \varrho s_0 - \frac{\varrho}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{d}} \boldsymbol{\xi}^{\mathrm{d}} \right) - \frac{\varrho}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{s}} \boldsymbol{\xi}^{\mathrm{s}} \right) \right] \mathrm{d}V,$$
(254)

ekkor a funkcionálderiváltak

$$\frac{\delta \hat{E}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} \varrho \mathbf{v} \\ E^{d} \varepsilon^{d} \\ E^{s} \varepsilon^{s} \\ \varrho c \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \qquad \frac{\delta \hat{S}}{\delta \hat{\mathbf{x}}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \frac{\partial c}{T} \\ -\varrho \boldsymbol{\xi}^{d} \\ -\varrho \boldsymbol{\xi}^{s} \end{pmatrix}.$$
(255)

A realizálandó időfejlődés pedig

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathbf{v}} \\ \dot{\varepsilon}^{d} \\ \dot{\varepsilon}^{s} \\ \dot{T} \\ \dot{\xi}^{d} \\ \dot{\xi}^{s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varrho} (\boldsymbol{\sigma}_{el} + \boldsymbol{\sigma}_{nel}) \cdot \dot{\nabla} \\ \left[\left(\mathbf{v} \otimes \dot{\nabla} \right)^{s} \right]^{d} \\ \left[\left(\mathbf{v} \otimes \dot{\nabla} \right)^{s} \right]^{s} \\ \frac{1}{\varrho c} \operatorname{tr}(\boldsymbol{\sigma}_{nel} \dot{\varepsilon}) \\ \frac{1}{\varrho_{21}} \dot{\varepsilon}^{d} + l_{22}^{d} (-\varrho T \xi^{d}) \\ l_{21}^{s} \dot{\varepsilon}^{s} + l_{22}^{s} (-\varrho T \xi^{s}) \end{pmatrix}.$$
(256)

A párközi vezetési mátrix szimmetrikus–antiszimmterikus felbontását használva az előzőek szerint a reverzibilis operátormátrix az

$$\hat{\mathbf{M}}_{-} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & (\hat{M}_{-})_{12} & (\hat{M}_{-})_{13} & (\hat{M}_{-})_{14} & (\hat{M}_{-})_{15} & (\hat{M}_{-})_{16} \\ (\hat{M}_{-})_{21} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ (\hat{M}_{-})_{31} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ (\hat{M}_{-})_{41} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ (\hat{M}_{-})_{51} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ (\hat{M}_{-})_{61} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (257)$$

alakban adódik, ahol

$$\begin{pmatrix} \hat{M}_{-} \end{pmatrix}_{12} = \frac{1}{\varrho} (\cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla},$$

$$\begin{pmatrix} \hat{M}_{-} \end{pmatrix}_{13} = \frac{1}{\varrho} (\cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla},$$

$$\begin{pmatrix} \hat{M}_{-} \end{pmatrix}_{14} = -\frac{1}{\varrho c} \left[\left(l_{12}^{\mathsf{d}} \right)^{\mathsf{A}} T \boldsymbol{\xi}^{\mathsf{d}} \cdot + \left(l_{12}^{\mathsf{s}} \right)^{\mathsf{A}} T \boldsymbol{\xi}^{\mathsf{s}} \cdot \right] \cdot \overleftarrow{\nabla},$$

$$(258)$$

$$\begin{aligned} \left(\hat{M}_{-}\right)_{15} &= -\frac{\left(l_{12}^{d}\right)^{A}}{\varrho} (\cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla}, \\ \left(\hat{M}_{-}\right)_{16} &= -\frac{\left(l_{12}^{s}\right)^{A}}{\varrho} (\cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla}, \\ \left(\hat{M}_{-}\right)_{21} &= \frac{1}{\varrho} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \right]^{d}, \\ \left(\hat{M}_{-}\right)_{31} &= \frac{1}{\varrho} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \right]^{s}, \\ \left(\hat{M}_{-}\right)_{41} &= -\frac{T}{\varrho c} \operatorname{tr} \left\{ \left(l_{12}^{d} \right)^{A} \boldsymbol{\xi}^{d} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \right]^{d} + \left(l_{12}^{s} \right)^{A} T \boldsymbol{\xi}^{s} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \right]^{s} \right\}, \\ \left(\hat{M}_{-}\right)_{51} &= -\frac{\left(l_{12}^{d} \right)^{A}}{\varrho} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \right]^{d}, \\ \left(\hat{M}_{-}\right)_{61} &= -\frac{\left(l_{12}^{s} \right)^{A}}{\varrho} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \right]^{s}, \end{aligned}$$

$$\tag{259}$$

míg az irreverzibilis operátormátrix mindkét esetben az

$$\hat{\mathbf{M}}_{+} = \begin{pmatrix} (\hat{M}_{+})_{11} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & (\hat{M}_{+})_{14} & (\hat{M}_{+})_{15} & (\hat{M}_{+})_{16} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ (\hat{M}_{+})_{41} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & (\hat{M}_{+})_{44} & (\hat{M}_{+})_{45} & (\hat{M}_{+})_{46} \\ (\hat{M}_{+})_{51} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & (\hat{M}_{+})_{54} & (\hat{M}_{+})_{55} & \mathbf{0} \\ (\hat{M}_{+})_{61} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & (\hat{M}_{+})_{64} & \mathbf{0} & (\hat{M}_{+})_{66} \end{pmatrix},$$
(260)

alakban keresendő. Jelen esetben ennek elemei:

$$(\hat{M}_{+})_{11} = -\frac{1}{\varrho^{2}} \Biggl\{ l_{11}^{d} \Biggl[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} T + l_{11}^{s} \Biggl[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} T \Biggr\} \cdot \overleftarrow{\nabla},$$

$$(\hat{M}_{+})_{14} = \frac{1}{\varrho^{2}c} \Biggl\{ l_{11}^{d} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} T \cdot + l_{11}^{s} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} T \cdot \Biggr\} \cdot \overleftarrow{\nabla},$$

$$(\hat{M}_{+})_{15} = \frac{\left(l_{12}^{d} \right)^{S}}{\varrho} (T \cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla},$$

$$(261)$$

$$\begin{split} (\hat{M}_{+})_{16} &= \frac{(l_{12}^{s})^{s}}{\varrho} (T \cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla} \\ (\hat{M}_{+})_{41} &= -\frac{T}{\varrho^{2}c} \operatorname{tr} \left\{ l_{11}^{d} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{d} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{d} + l_{11}^{s} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s} \right\}, \\ (\hat{M}_{+})_{44} &= -\frac{T}{\varrho^{2}c^{2}} \operatorname{tr} \left\{ l_{11}^{d} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{d} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{d} \cdot + l_{11}^{s} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s} \right\}, \\ (\hat{M}_{+})_{45} &= \frac{T}{\varrho c} (l_{12}^{t})^{s} \operatorname{tr} \left\{ \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{d} \cdot \right\}, \\ (\hat{M}_{+})_{46} &= \frac{T}{\varrho c} (l_{12}^{t})^{s} \operatorname{tr} \left\{ \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s} \cdot \right\}, \\ (\hat{M}_{+})_{51} &= -\frac{T(l_{12}^{t})^{s}}{\varrho} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{d}, \\ (\hat{M}_{+})_{55} &= l_{22}^{d} T, \\ (\hat{M}_{+})_{61} &= -\frac{T(l_{12}^{t})^{s}}{\varrho} \left[\left(\cdot \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s}, \\ (\hat{M}_{+})_{64} &= \frac{T}{\varrho c} (l_{12}^{t})^{s} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{s} \right]^{s}, \\ (\hat{M}_{+})_{66} &= l_{22}^{s} T. \end{split}$$

$$(262)$$

A másik utat választva

$$\hat{\mathbf{M}}_{-} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \frac{1}{\varrho}(\cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla} & \frac{1}{\varrho}(\cdot) \cdot \overleftarrow{\nabla} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \frac{1}{\varrho} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{\mathbf{S}} \right]^{\mathbf{d}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \frac{1}{\varrho} \left[\left(\mathbf{v} \otimes \overleftarrow{\nabla} \right)^{\mathbf{S}} \right]^{\mathbf{s}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix},$$
(263)

valamint (260) elemei:

$$\begin{split} (\hat{M}_{+})_{11} &= -\frac{1}{\varrho^{2}} \Biggl\{ l_{11}^{d} \Biggl[\left(\cdot \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} T + l_{11}^{s} \Biggl[\left(\cdot \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} T \Biggr\} \cdot \tilde{\nabla}, \\ (\hat{M}_{+})_{14} &= \frac{1}{\varrho^{2}c} \Biggl\{ l_{11}^{d} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} T \cdot l_{11}^{s} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} T \cdot \Biggr\} \cdot \tilde{\nabla}, \\ (\hat{M}_{+})_{15} &= \frac{l_{12}^{d}}{\varrho} (T \cdot) \cdot \tilde{\nabla}, \\ (\hat{M}_{+})_{41} &= -\frac{T}{\varrho^{2}c} \operatorname{tr} \Biggl\{ l_{11}^{d} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} \Biggl[\left(\cdot \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} + l_{11}^{s} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} \Biggl[\left(\cdot \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} \right\}, \\ (\hat{M}_{+})_{41} &= -\frac{T}{\varrho^{2}c^{2}} \operatorname{tr} \Biggl\{ l_{11}^{d} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} + l_{11}^{s} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} \right\}, \\ (\hat{M}_{+})_{45} &= \frac{T}{\varrho^{2}c^{2}} \operatorname{tr} \Biggl\{ l_{11}^{d} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} \cdot \Biggr\}, \\ (\hat{M}_{+})_{46} &= \frac{T}{\varrho^{2}c^{2}} \operatorname{tr} \Biggl\{ \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s} \cdot \Biggr\}, \\ (\hat{M}_{+})_{51} &= -\frac{T l_{21}^{d}}{\varrho} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d}, \\ (\hat{M}_{+})_{54} &= \frac{T}{\varrho} l_{21}^{d} \operatorname{tr} \Biggl\{ \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{d} \cdot , \\ (\hat{M}_{+})_{64} &= -\frac{T l_{21}^{2}}{\varrho} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s}, \\ (\hat{M}_{+})_{64} &= -\frac{T l_{21}^{2}}{\varrho} \Biggl[\left(\mathbf{v} \otimes \tilde{\nabla} \right)^{S} \Biggr]^{s}, \\ (\hat{M}_{+})_{66} &= l_{22}^{2}T. \end{split}$$

$$(264)$$

4. KÖVETKEZTETÉSEK

A 3.1.4. és 3.2.4. alalszakaszban bemutattam a Kluitenberg–Verhás-modellcsalád GENERIC keretrendszerbe történő beágyazását, a reverzibilis és irreverzibilis dinamika két különböző módon való felbontása esetén, azonban mindkét esetben vagy így, vagy úgy, de megsértjük a formalizmus szokásos követelményeit. Ez arra utalhat, hogy a GENERIC-ben használt fogalmak nem eléggé pontosan definiáltak, a kirótt feltételek túlzóak.

Nézzük meg kicsit részletesebben ezeket a követelményeket! Amikor a párközi vezetési mátrix szimmetrikus–antiszimmetrikus felbontását használva írtuk fel az időfejlődési egyenletet, majd ebből származtattuk a reverzibilis és irreverzibilis operátormátrixot, akkor az antiszimmetrikus zárójelek nem elégítik ki a Jacobi-azonosságot. Az, hogy a Jacobi-azonosság nem teljesül, matematikailag annyit fejez ki, hogy a dinamika kilép a Poisson-struktúráról, azonban feltehető a kérdés, hogy ez baj-e? A klasszikus mechanikában a Poisson-zárójeleknek és a Jacobi-azonosságnak fontos szerepe van: reverzibilis dinamika esetén ugyanis a Jacobi-azonosság biztosítja a Poisson-zárójelek időfüggetlen voltát, az entrópiaprodukció szempontjából azonban ez a tulajdonság nem játszik szerepet. A GENERIC-ben az antiszimmetrikus zárójelekre vonatkozó Jacobi-azonosság egy mechanikai analógia, mely sok esetben valóban teljesül, azonban arra a kérdésre, hogy a Jacobi-azonosság a GENERIC-ben egy fizikai jellemző, vagy csak egy matematikai struktúra következménye, nincs szilárd és alaposan alátámasztott álláspont.

Ehelyütt megjegyzendő, hogy a (86)–(87) vegyes feltételek is túlzóan megszorítók, az energiamegmaradáshoz és az entrópia növekedéséhez gyengébb feltételek is elegendők: a degeneráció feltételeket elegendő lenne alacsonyabb dimenziós altereken megkövetelni (ahogyan a disszipációs potenciál is csak egy altéren határozza meg az irreverzibilis operátormátrixot, ld. (185)).

Amikor közvetlenül a párközi vezetési mátrix elemeivel írtuk fel az időfejlődést, az \mathbf{M}_+ irreverzibilis operátormátrix szimmetriája sérül. Ez a dilemma azonban csak az $l_{12} \neq l_{21}$ modellek esetén lép fel. Ha a belső változó eredetére van mikroszkopikus vagy makroszkopikus magyarázatunk, akkor a szimmetria–antiszimmetria kérdés is eldönthető, általában azonban nincs okunk elvetni $l_{12} \neq l_{21}$ modellek létjogosultságát, ekkor viszont a GENERIC-nek döntést kell hoznia, mit tekint reverzibilisnek, mit tekint irreverzibilisnek, és hogy mely feltételeit tekinti fontosnak és melyeket kevésbé fontosnak. Feltehetjük a kérdést, olyan esetben, amikor \mathbf{M}_+ nem adódik szimmetrikusnak, nem elegendő-e a szimmetrikus részének pozitív szemidefinitsége, hiszen az entrópiaprodukció nemnegatív volta így is teljesül.

A formalizmus egyik legnagyobb előnye, hogy elsőrendű egyenletrendszerek szisztematikus felírását teszi lehetővé, ez újszerű megoldási módszerek (pl. variációs módszerek, függvényrendszer szerinti kifejtések, diszkrét időlépések módszere, ...) fejlesztését inspirálja. Ilyen újszerű, az operátorok diszkretizálásán alapuló módszerekkel fogalkoznak [27, 28, 29, 30, 31], ezek a módszerek azonban a megmaradó mennyiségekre összpontosítanak, hiszen köztudott, hogy diszkretizálás után a mérlegegyenletek viselkednek stabilisan, azonban náluk a származtatott termodinamikai struktúra elvész. Egy másik, a termodinamikai struktúra megőrzését figyelembe vevő módszerről [32]-ben olvashatunk. Ennek alapötlete Moserhez és a szimplektikus integrátorokhoz köthető. Az energiafunkcionált diszkretizáljuk, így az

$$\dot{\mathbf{x}}_{\text{rev}} = \mathbf{M}_{-} \cdot \frac{\delta E_{\epsilon}}{\delta \mathbf{x}}$$
(265)

egyenletet kell megoldanunk, ahol ϵ az időlépést jelöli. Így minden időlépés egy kanonikus transzformáció, megőrizve ezzel az antiszimmetrikus zárójelekre vonatkozó tulajdonságokat. Az irreverzibilis részben az \mathbf{M}_+ irreverzibilis operátormátrixot diszkretizáljuk, így a GENERIC egyenlet az

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{M}_{-} \cdot \frac{\delta E_{\epsilon}}{\delta \mathbf{x}} + \mathbf{M}_{+\epsilon} \cdot \frac{\partial S}{\delta \mathbf{x}}$$
(266)

alakban adódik, a degeneráltsági feltételek pedig

$$\mathbf{M}_{-} \cdot \frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} = 0, \tag{267}$$

$$\mathbf{M}_{+\epsilon} \cdot \frac{\delta E_{\epsilon}}{\delta \mathbf{x}} = 0, \tag{268}$$

azaz kevesebb változtatással élünk, mint hogyha (267)-ben is diszkretizálás jelenne meg. A numerikus módszerek GENERIC-alapú, a termodinamikában rejlő aszimptotikus stabilitást érvényre juttató fejlesztése ígéretes és nagyjelentőségű új irányzat.

A GENERIC integrális szemléletmódja lehetővé teszi szakadásos megoldások tárgyalását is [27], valamint bizonyos globális mennyiségek (pl. az energia megmaradása, az entrópia növekedése) könnyű követését.

5. Összefoglalás

A szilárd közegek reológiai – viszkoelasztikus – viselkedése egy késleltetten rugalmas, disszipatív anyagi viselkedés. A nemegyensúlyi termodinamika belső változós módszertana lehetőséget nyújt e jelenség termodinamikailag konzisztens modelljeinek származtatására, egy, a feszültségnek és alakváltozásnak megfelelően szimmetrikus, másodrendű tenzori belső változó alkalmazásával.

A GENERIC egy modern nemegyensúlyi keretrendszer, mely az állapotváltozók időfejlődését egy reverzibilis és egy irreverzibilis rész időfejlődésének összegeként származtatja, melyek egy-egy operátorral és az energia- és entrópiafunkcionál deriváltjaival reprezentálhatók. A reverzibilis résznek a hamiltoni dinamikának kell eleget tennie, ennek következményeként az általánosított Poisson-zárójelekre teljesülendő Jacobi-azonosságnak teljesülni kell. Az irreverzibilis rész az entrópiaprodukció pozitív definitségét kell kielégítse, mely a GENERIC keretrendszerben egy szimmetrikus, pozitív szemidefinit operátort ír elő. A módszer széleskörű alkalmazásokkal bír a klasszikus hidrodinamikától kezdve, a komplex és relativisztikus folyadékokon keresztül a kinetikus gázelméletig, valamint szilárd közegekre történő alkalmazása is egyre népszerűbb. A formalizmus újszerű, termodinamika inspirálta numerikus módszerek származtatására is lehetőséget nyújt.

Jelen dolgozatban az egy belső változó alkalmazásával nyerhető Kluitenberg–Verhásféle reológiai modellcsalád GENERIC formalizmusba történő beágyazását mutattam be. A levezetéseket a kisdeformációs tartományban, a hővezetés elhanyagolásával végeztem. Először az egy térdimenziós tárgyalásmódot mutattam be, mely a számításokat áttekinthetőbbé teszi, így a formalizmus lényegére tudunk koncentrálni. Ezután analóg módon levezettem és ismertettem az egyenleteket a háromdimenziós tárgyalásmódban is. Számításaim nemtriviális eredményekre vezettek: aszerint, hogy az entrópiaprodukció pozitív definitéségét biztosító onsageri egyenleteket a párközi vezetési mátrix szimmetrikus– antiszimmetrikus felbontásával, vagy közvetlenül ennek a mátrixnak az elemeivel írjuk fel, valahogyan mindenképpen megsértjük a formalizmus számos megkövetelt feltételének egyikét. Előbbi esetben a Jacobi-azonosság, utóbbiban pedig az irreverzibilis részhez tartozó operátor szimmetrikussága nem teljesül.

Javaslatot tettem a helyzet orvoslására a formalizmus követelményeinek gyengítésével, valamint saját tapasztalataim alapján összefoglaltam a módszer előnyeit és hátrányait, illetve összehasonlítottam más módszerekkel. Áttekintettem a származtatott egyenletek megoldásának lehetőségeit, kiemelve a termodinamika szerepét.

Függelék

A. FUNKCIONÁLDERIVÁLTAK

Ebben a mellékletben röviden ismertetem a dolgozatban használt funkcionálderiválást [33] alapján.

Definíció: az $F : D \subset \mathcal{B} \to \mathbb{R}(\mathbb{C})$ leképezést funkcionálnak nevezzük, ahol \mathcal{B} egy Banach-tér. Szemléletesen a funkcionálok végtelen sok változótól függő függvények, avagy függvények függvényei. Funkcionálok például a határozott intergálok: $F[f(x)] = \int_{x_2}^{x_2} f(x) dx$.

A funkcionálderiválást szemléletesen visszavezetjük függvények deriválására. Egy funkcionál variációját jelölje

$$\delta F := F[f(x) + \delta f(x)] - F[f(x)], \qquad (269)$$

ahol δf az f függvény kicsi megváltozása – avagy a függvény variációja – melyet az $\delta f(x) := \varepsilon \eta(x)$ alakban választunk, ahol ε tetszőleges infinitezimális szám, $\eta(x)$ pedig tetszőleges függvény. A funkcionál δF variációját úgy határozzuk meg, hogy $F[f(x) + \delta f(x)]$ funkcionált Taylor-sorba fejtjük a $\delta f(x)$ -ben szereplő ε szerint:

$$F[f(x) + \varepsilon \eta(x)] = \sum_{k=0}^{N} \frac{1}{k!} \frac{\mathrm{d}^{k} F[f(x) + \varepsilon \eta(x)]}{\mathrm{d}\varepsilon^{k}} \bigg|_{\varepsilon=0} \varepsilon^{k} + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}), \qquad (270)$$

melyből a $\frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x)}$ első funkcionálderiváltat a

$$\frac{\mathrm{d}F[f(x) + \varepsilon\eta(x)]}{\mathrm{d}\varepsilon} \bigg|_{\varepsilon=0} = \int \left(\frac{\delta F[f]}{\delta f(x_1)}\eta(x_1)\right) \mathrm{d}x_1 \tag{271}$$

összefüggéssel definiáljuk, a magasabbrendű funkcionálderiváltakat ennek analógiájára pedig a

$$\frac{\mathrm{d}^{k}F[f(x)+\varepsilon\eta(x)]}{\mathrm{d}^{k}\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=0} = \int \left(\frac{\delta^{k}F[f]}{\delta f(x_{1})\dots\delta f(x_{k})}\eta(x_{1})\dots\eta(x_{k})\right)\mathrm{d}x_{1}\dots\mathrm{d}x_{k} \quad (272)$$

összefüggésekkel. Ezzel a funkcionál variációja:

$$F[f(x) + \varepsilon \eta(x)] = \sum_{k=0}^{N} \frac{1}{k!} \int \left(\frac{\delta^k F[f]}{\delta f(x_1) \dots \delta f(x_k)} \eta(x_1) \dots \eta(x_k) \right) \mathrm{d}x_1 \dots \mathrm{d}x_k + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}).$$
(273)

A funkcionálderiváltaknak létezik ennél matematikailag precízebb megfogalmazása is, ekkor bevezethető a Frechet- és a Gateaux-derivált fogalma, azonban ez a dolgozat szempontjából irreleváns.

Mivel ezen dolgozat csak integrálfunkcionálokra, és ezek deriválására épít, így a Young-tétel általánosításait elfogadhatjuk, hiszen a funkcionálderiváltat parciális deriváltakra vezettük vissza. Így megállapíthatjuk, hogy a funkcionálderiváltak és a parciális deriváltak sorrendje, valamint a többszörös funkcionálderiváltak sorrendje felcserélhető.

B. A JACOBI.M PROGRAM HASZNÁLATA

A [26] cikkben közöltek szerint először telepítenünk kell a jacobi.m, a vdfrules.m és a try.m programokat a Mathematicába. Első lépésként meg kell adnunk az állapotváltozókat, diszkrét rendszerek esetén ezeknek nem kell argumentumot adni, azonban mezők esetén a helyváltozók szerinti függést is fel kell tüntetnünk. A Poisson-zárójelek antiszimmetriája miatt elegendő a zárójelnek csak az egyik felét megadnunk, a másikat a program automatikusan generálja, viszont a különböző mennyiségek szerint célszerű a zárójelet alzárójelek összegére bontanunk, a poissonparts parancsban ezen összeg tagjainak számát kell megadnunk, majd ezeket definiálni. Ezután betöltjük a jacobi.m programot, majd a checkjacobi paranccsal megindítjuk az ellenőrzési folyamatot. A program egy rövid összegzést mutat, melyben megjeleníti, hogy a Jacobi-azonosság teljesül vagy nem.

A programban II az integrálást jelöli, ahol a rrange parancsban adjuk meg az integrálási változót és az alsó és felső integrálási határokat, JIU parancs a $-\infty$ -t, JIO pedig $+\infty$ -t jelöli, DD pedig mind a közönséges, mind a funkcionálderiválást reprezentáló operátor.

Az egy térdimenziós, kiterjesztetlen rendszer (169) antiszimmetrikus zárójelének második tagját parciálisan integrálva a

$$[A,B]_{-} = \int \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\delta A}{\delta v} \partial_r \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} - \frac{\delta B}{\delta v} \partial_r \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \right) \mathrm{d}r \tag{274}$$

kifejezésre jutunk. Ennek megfelelően a programkód:

```
vars = \{v[r], \epsilon[r], T[r]\};
rrange = \{r, JIU, JI0\};
poissonparts = 1;
\texttt{poissonpart}[1] = \texttt{II}\left[\frac{1}{\rho}\texttt{DD}[\texttt{\#1}, v]\texttt{DD}[\texttt{DD}[\texttt{\#2}, \epsilon], r], \texttt{rrange}\right]\&;
<< jacobi2.0.m
checkjacobi;
Last change: setintegrate renewed. check exampleD1.m
Last change 25.08.00 end of RULE: II->Integrate if
FreeQ[DD] && !FreeQ[DiracDelta]
Most slow action: DD->D and II->Integrate of course
Loading Module Jacobi 2.0 written by m. kroeger ...
Manuscript submitted 2000 for consideration to Comput. Phys. Commun.
done: automatic integrals: True
found: 1 poissonparts
ATTENTION: your bracket does not contain variable T
done: set
created: innerboth (left/right)[1]
  \mathtt{II}[c_{2,2}[\mathtt{r}\$4\mathtt{84}](c_{1,3})'[\mathtt{r}\$4\mathtt{84}],\{\mathtt{r}\$4\mathtt{84},-\infty,\infty\}|
                                     +
-- all created: innerleft[.] and innerright[.] for all brackets
0\% created: outerinnerboth [1,1] TimeUsed=0.11
-- all created: outerinnerboth[.,.] for all pairs of brackets
Selected method is: outerinnerboth [\#5, \#4]\&
_____
Start calculation: Sum {{JA,JB},JC}+... by parts
```

Az egy térdimenziós, kiterjesztett rendszer esetén már valamelyest bonyolultabb a helyzet, (182)-ben parciálisan integrálva a megfelelő tagokat, majd a megfelelő összegek-re bontva az antiszimmetrikus zárójelre az

$$\begin{split} [A,B]_{-} &= \int \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\delta A}{\delta v} \partial_r \frac{\delta B}{\delta \varepsilon} - \frac{\delta B}{\delta v} \partial_r \frac{\delta A}{\delta \varepsilon} \right) \mathrm{d}r + \\ &+ \int \frac{l_{12}^{\mathrm{A}}}{\varrho c} T \xi \left(\frac{\delta B}{\delta T} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} - \frac{\delta A}{\delta T} \partial_r \frac{\delta B}{\delta v} \right) \mathrm{d}r + \\ &+ \int \frac{l_{12}^{\mathrm{A}}}{\varrho} \left(\frac{\delta B}{\delta \xi} \partial_r \frac{\delta A}{\delta v} - \frac{\delta A}{\delta \xi} \partial_r \frac{\delta B}{\delta v} \right) \mathrm{d}r \end{split}$$
(275)

adódik. A statikus memória és a futásidő korlátozott, így erre is figyelmeztet minket a program, ha valamelyik nem lenne elegendő. Ebben az esetben az alapértelmezett memória kevésnek bizonyult, azonban ezeket az értékeket a vdfrules.m kódban könnyen átírhatjuk, így a kód:

vars = {v[r],
$$\epsilon[r], T[r], \xi[r]$$
};
rrange = {r, JIU, JIO};
poissonparts = 3;
poissonpart[1] = II [$\frac{1}{\rho}$ DD[#1, v]DD[DD[#2, ϵ], r], rrange] &;
poissonpart[2] = II [$\frac{112A}{\rho c}T\xi$ DD[#2, T]DD[DD[#1, v], r], rrange] &;
poissonpart[3] = II [$\frac{112A}{\rho}$ DD[#2, ξ]DD[DD[#1, v], r], rrange] &;
<< jacobi2.1.m
checkjacobi;
Last change: setintegrate renewed. check exampleD1.m

```
Last change 25.08.00 end of RULE: II->Integrate if
FreeQ[DD]&& !FreeQ[DiracDelta]
Most slow action: DD->D and II->Integrate of course
Loading Module Jacobi 2.0 written by m. kroeger ...
Manuscript submitted 2000 for consideration to Comput. Phys. Commun.
done: automatic integrals: True
found: 3 poissonparts
done: set
created: innerboth (left/right)[1]
II[c_{2,2}[r\$674](c_{1,3})'[r\$674], \{r\$674, -\infty, \infty\}] + \dots
created: innerboth (left/right)[2]
112AII \left[ T[r\$677] \xi [r\$677] c_{2,1} [r\$677] (c_{1,2})' [r\$677], \{r\$677, -\infty, \infty\} \right] + \dots
                         c\rho
created: innerboth (left/right)[3]
\texttt{l12AII} \left[ c_{2,4} [\texttt{r}\$680] (c_{1,2})' [\texttt{r}\$680], \{\texttt{r}\$680, -\infty, \infty\} \right] \textbf{12AII} \left[ c_{2,4} [\texttt{r}\$680] (c_{1,2})' [\texttt{r}\$680], \texttt{r}\$680] \right]
-- all created: innerleft[.] and innerright[.] for all brackets
0\% created: outerinnerboth [1,1] TimeUsed=0.188
11\% created: outerinnerboth [1,2] TimeUsed=0.219
22\% created: outerinnerboth [1,3] TimeUsed=0.235
33\% created: outerinnerboth [2,1] TimeUsed=0.266
44\% created: outerinnerboth [2,2] TimeUsed=0.328
55\% created: outerinnerboth [2,3] TimeUsed=0.344
66\% created: outerinnerboth [3,1] TimeUsed=0.375
77\% created: outerinnerboth [3,2] TimeUsed=0.422
88\% created: outerinnerboth [3,3] TimeUsed=0.453
-- all created: outerinnerboth[.,.] for all pairs of brackets
Selected method is: outerinnerboth [\#5, \#4]\&
_____
Start calculation: Sum {{JA,JB},JC}+... by parts
*** 0 == {{#1, #2}[1], #3][1]
*** 0 == {{#1,#2}[2],#3}[1]
*** 0 == {{#1,#2}[1],#3}[2]
 0 <> {{JAA, JBB}[2], JCC}[2]//.full/.short or jacob[JAA, JBB, JCC, 2, 2]
    112A\left(\frac{112AII\left[T[r]\xi[r]^{2}c_{3,1}[r]\left(c_{1,2}\right)'[r]\left(c_{2,2}\right)'[r],\{r,-\infty,\infty\}\right]}{c\rho}-\frac{112AII\left[T[r]\xi[r]^{2}c_{2,1}[r]\left(c_{1,2}\right)'[r]\left(c_{3,2}\right)'[r],\{r,-\infty,\infty\}\right]}{c\rho}\right)
```

+ ... ----- TimeUsed =2.266 X THE LAST OUTER ... [2]-TERMS DIDN'T CANCEL OUT: WAIT 0 == {{#1,#2}[3],#3}[1] $0 == \{ \{ \#1, \#2 \} [3], \#3 \} [2] \}$ * THE LAST INNER [3] ... - TERMS CANCELED OUT $0 == \{ \{ \#1, \#2 \} [1], \#3 \} [3] \}$ 0 <> {{JAA,JBB}[2],JCC}[3]//.full/.short or jacob[JAA,JBB,JCC,2,3] $112A\left(\frac{112AII\left[T[r]c_{3,1}[r](c_{1,2})'[r](c_{2,2})'[r],\{r,-\infty,\infty\}\right]}{c\rho}-\frac{in \ 3:}{\frac{112AII\left[T[r]c_{2,1}[r](c_{1,2})'[r](c_{3,2})'[r],\{r,-\infty,\infty\}\right]}{c\rho}}\right) +$ ----- TimeUsed =2.297 $0 == \{ \{ \#1, \#2 \} [3], \#3 \} [3] \}$ X THE LAST OUTER ... [3]-TERMS DIDN'T CANCEL OUT: WAIT Note: Evaluate spec. bracket: {#1,#2}[i]//.full Note: Evaluate spec. 2-bracket: {{#1,#2}[i],#3[j]}//.full Note: Evaluate spec. cyclic 2-bracket: jacob[#1,#2,#3,i,j] Note: Evaluate jacobi sum: all terms: jacobi Note: Result stored in: sum (Actually it has 6 terms) _____ Jacobi identity is apparently NOT FULFILLED.

Active poissonparts used: $\{\#1, \#2\}[1] = II \left[\frac{DD[DD[\#2\&, \epsilon[]], r]DD[\#1\&, v[]]}{\rho}, \{r, -\infty, \infty\} \right]$ $\{\#1, \#2\}[2] = II \left[\frac{112ADD[DD[\#1\&, v[]], r]DD[\#2\&, T[]]T[]\xi[]}{c\rho}, \{r, -\infty, \infty\} \right]$ $\{\#1, \#2\}[3] = II \left[\frac{112ADD[DD[\#1\&, v[]], r]DD[\#2\&, \xi[]]]}{\rho}, \{r, -\infty, \infty\} \right]$ CPU time used (jacobi): 0.083 sec. CPU time used (provide): 0.531 sec. Memory used\t: 26.1 MB (static limits: maxmemory=1000. MB, maxtime=60 s)

KÖSZÖNETMONDÁS

Ezúton szeretnék köszönetet mondani mindazoknak, akik elősegítették ennek az írásnak a megszületését.

Elsősorban hálával tartozom konzulensemnek, Fülöp Tamásnak, aki idejét nem sajnálva konstruktív ötleteivel segítette és kísérte figyelemmel munkámat, rengeteg segítséget nyújtva mind az irodalomkutatásban, mind az itt leírtak megértésében.

Köszönet illeti témavezetőmet, Szekeres Andrást építő megjegyzéseiért, amikkel elsősorban a dolgozat érthetőségét segítette elő.

IRODALOM

- [1] SZÜCS, M. (2017): *Szilárd közegek reológiája a GENERIC nemegyensúlyi termodinamikai leírásban,* diplomaterv, BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék és BME Műszaki Mechanikai Tanszék, Budapest.
- [2] ŠILHAVÝ, M. (1997): *The Mechanics and Thermodynamics of Continuous Media*, Springer, Berlin.
- [3] JOU, D., CASAS-VÁZQUEZ, J., LEBON, G. (1993): *Extended Irreversible Thermodynamics*, Springer, Berlin.
- [4] VERHÁS, J.(1985): Termodinamika és reológia, Műszaki könyvkiadó, Budapest.
- [5] ÖTTINGER, H. C. (2005): *Beyond Equibrium Thermodynamics,* John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.
- [6] GRMELA, M. (2010): *Why GENERIC?*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, pp980–986.
- [7] HÜTTER, M., TERVOORT, T. A. (2008): *Thermodynamic consideration on non-isothermal finite anisotropic elastoviscoplasticity*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, pp53–65.
- [8] HÜTTER, M., SVENDSEN, B. (2011): On the Formulation of Continuum Thermodynamic Models for Solids as General Equations for Non-equilibrium Reversible-Irreversible Coupling, Journal of Elasticity, pp357–368.
- [9] GLADKOV, S., ET AL. (2016): Thermodynamic Model Formulations for Inhomogeneous Solids with Application to Non-isothermal Phase Field Modelling, Continuum Mechanics and Thermodynamics, pp803–816.
- [10] ASSZONYI, CS., FÜLÖP, T., VÁN, P.(2015): *Distinguished rheological models for solids in the framework of a thermodynamical internal variable theory*, Continuum Mechanics and Thermodynamics, pp971–986.
- [11] GANTMAHCER, F. (1975): Lectures in Analytical Mechanics, Mir Publishers, Moscow.

- [12] GOLDSTEIN, H., POOLE, C., SAFKO, J. (2001): *Classical Mechanics*, 3rd Edition, Addison-Wesley, San Fransisco.
- [13] KÜRTI, J., TÉL, T. (1981): Bevezetés a fizika térelméleti módszereibe, ELTE, Fizikus Diákkör, Budapest.
- [14] VÁN, P., NYÍRI, B. (1999): *Hamilton formalism and variational principle construction*, Annalen der Physik (Leipzig), **8**, pp331-354.
- [15] GYARMATI, I. (1967): Nemegyensúlyi termodinamika, Műszaki Könyvkiadó, Budapest.
- [16] MATOLCSI, T., VÁN, P., VERHÁS, J. (2004): Fundamental Problems of Variational Principles: Objectivity, Symmetries and Construction, in: Variational and Extremum Principles in Macroscopic Systems, Elsevier Science, Oxford, pp57-74.
- [17] HÜTTER, M., SVENDSEN B.(2013): Quasi-linear versus potential-based formulations of force-flux relations and the GENERIC for irreversible processes: comparisons and examples, Continuum Mechanics and Thermodynamics, pp803–816.
- [18] ROMERO, I. (2013): A Characterization of Conserved Quantities in Non-Equilibrium Thermodynamics, Entropy, pp5580–5596.
- [19] PAPENFUSS, C., VÁN, P. (2008): Scalar, vectorial and tensorial damage parameters from the mesoscopic background, Proceedings of Estonian Academy of Sciences, pp132–141.
- [20] VÁN, P., VÁSÁRHELYI, B. (2001): Second law of thermodynamics and the failure of rock materials, in: Elsworth, D., Tinucci, J. P., Heasley K. A. (eds.), Rock Mechanics in the National Interest, pp767–773.
- [21] VÁN, P. (2001): Internal thermodynamic variables and the failure of microcracked materials, Journal of Nonequilibrium Thermodynamics, pp167–189.
- [22] VÁN, P., VÁSÁRHELYI, B. (2010): A kőzettestek minőségi jellemzésének és károsodottságának viszonyáról, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika 2010 ISRM Konferencia. In: Fülöp, T., (szerk.), Idő- és térderiváltak anyagtörvényekben, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 10, Műegyetemi Kiadó, Budapest, pp85–98.
- [23] VÁN, P., FÜLÖP, T. (2012): Universality in heat conduction theory weakly nonlocal thermodynamics, Annalen der Physik (Berlin), 8, pp470–478.
- [24] KOVÁCS, R. (2015): Hővezetési egyenletek elmélete, numerikus vizsgálata és kísérleti ellenőrzése, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika 2015 ISRM Konferencia. In: Fülöp, T., (szerk.), Termodinamikai módszertan – kontinuumfizikai alkalmazások, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 19, Egyesület a Tudomány és Technológia Egységéért, Budapest, pp77–136.
- [25] FÜLÖP, T., VÁN, P. (2010): Véges rugalmas és képlékeny deformációk leírása, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika 2010 ISRM Konferencia. In: Fülöp, T., (szerk.), Idő- és térderiváltak anyagtörvényekben, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 10, Műegyetemi Kiadó, Budapest, pp99–151.
- [26] KRÖGER, M., HÜTTER, M., ÖTTINGER, H. C. (2001): Symbolic test of the Jacobi identity for given geleralized 'Poisson' bracket, Computer Physics Communications, pp325–340.

- [27] PORTILLO, D., GARCIA ORDEN, J. C., ROMERO, I. (2017): Energy-Entropy-Momentum integration schemes for general discrete non-smooth dissipative problems in thermomechanincs, International Journal for Numerical Methods in Engineering, megjelenés előtt: 21 March 2017, DOI: 10.1002/nme.5532.
- [28] ROMERO, I.(2009): Thermodynamically consistent time-stepping algorithms for non-liear thermomechanical systems, International Journal For Numerical Methods In Engineering.
- [29] KRÜGER, M., GROSS, M., BETSCH, P.(2011): A comparison of structure-preserving integrators for discrete thermoelastic systems, Computational Mechanics.
- [30] KRÜGER, M., GROSS, M., BETSCH, P. (2012): Dynamic finite deformation thermoviscoelasticity using energy-consistent time-integration, in: J. Eberhardsteiner et al. (eds.): European Congress on Computation Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCO-MAS 2012), Vienna, Austria, September 10-14, 2012, https://www.mb.uni-siegen. de/nm/mitglieder/ehemalige/mueller/work/fullpaper_melanie_krueger.pdf.
- [31] MATA, P., LEW, A. J. (2011): Variational time integrators for finite dimensional thermoelasto-dynamics without heat conduction, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 88, No. 1, pp. 1-30, 10.1002/nme.3160.
- [32] ZINNER, C. P., ÖTTINGER, H. C. (2014): Numerics for hypebolic conservation laws with help from the physical entropy, eprint: arXiv:1408.6817v1.
- [33] ENGEL, E., DREIZLER, R. M. (2011): Density Functional Theory, Springer, Berlin-Heidelberg.