Válasz Dr. Garay Barna opponensi véleményére

Mindenekelőtt szeretném megköszönni Dr. Garay Barna professzornak, hogy elvállalta dolgozatom bírálatát. Tisztában vagyok azzal, hogy a dolgozatomban leírtak követése egyáltalán nem egy egyszerű feladat, hiszen a megadott terjedelmi korlát miatt sok olyan részlet leírását kénytelen voltam mellőzni, amely a megfogalmazott problémák és az azokra kidolgozott módszerek megértését megkönnyíthette volna. Különösen igaz ez matematikai szempontból. Nem titkolom, hogy a bemutatott eredmények tárgyalását igyekeztem úgy megfogalmazni, hogy az elsősorban fizikusok és mérnökök számára legyen könnyebben követhető. Külön öröm számomra, hogy ennek ellenére a matematika szemszögéből is sikerült felkeltenem az érdeklődést. Ezt igazolja a feltett kérdések száma és minősége. Bár nem tisztem Oppenensem kérdéseit minősíteni, mégis megteszem, mivel pályánk során mindannyian ütköztünk már abba a problémába, hogy egy-egy bírálati pont megválaszolásánál az jelenti az igazi problémát, hogy a felvetés nem igazán lényegi vagy a témához illeszkedő. Ebben az esetben azonban erről szó sincs. Ezt igazolja az a tény is, hogy a bírálatot először olvasva, szinte minden pontra tudtam volna azonnal valamilyen felületes választ adni, amikor azonban a felvetéseken mélyebben elgondolkodtam, sokszor úgy éreztem, hogy akár érdemes lenne az adott probléma vizsgálatát mint új kutatási téma megkezdeni.

A továbbiakban sorra veszem az Oppenens felvetéseit, és igyekszem azokat kommentálni, kérdéseit pedig megválaszolni.

1. kérdés

„Jóllehet a konvergencia szó szerepel a 2.6.3 alpont címében, az iteráció kezdőpontjának megválasztására csak a 2.7 és 2.8 pontokban vannak távoli utalások: a tranziens üzemzavari folyamatok úgymond rendben vannak, de a csőtöréses üzemzavarokhoz és a balesetekhez tartozó, "a hatóság által elfogadott, validált rendszerkódok által végzett számítások" természete rejtve marad. Nem biztos, hogy ez utóbbiakra rá szabad kérdeznem. De annyit csak megkérdezhetek, hogy a mérnöki intuíció által szolgáltatott "educated initial guess" minden esetben konvergens Newton_iterációhoz vezet_e? Kérdés: Mit lehet akkor tenni, ha nem ez a helyzet?”

A kérdést kettéválasztanám, mint ahogy az a fenti paragrafusban is megtörténik. A hatóság által elfogadott, validált rendszerkódok által szolgáltatott eredmények felhasználását az indokolja, hogy ezen esetekben nincs jobb referenciaadatunk. Tehát, jobb híján fordulunk ezekhez az eredményekhez. Használatukat az is indokolja, hogy ezeket a számításokat olyan kódokkal végezték, amelyek alkalmazásánál nem kellett olyan kompromisszumokat meghozni, amelyeket a szimulátoros alkalmazásnál meg kell. Ezeknek a kompromisszumoknak egy része szorosan kapcsolódik a kérdés második feléhez, ahogy azt itt most kifejtem:
A valósidejű szimulátoros alkalmazásnál az egy lépésben iterációkra szánható idő korlátos (a mi esetünkben 0,2s), szemben a rendszerkódokkal végzett számításoknál, ahol lényegében tetszőleges időt áldozhatunk egy-egy probléma vizsgálatára. Egy csőtöréses üzemzavar esetén a fizikai folyamatok igen széles időskálán zajlanak. A csőtörés bekövetkezése után pl. nyomáshullámok terjednek hangsebességgel, majd fázisátalakulás következik be, amelyhez a kapcsolódó időskála szintén igen kicsi. Túl nagy lépésköz esetén, ugyanazzal a problémával találhatjuk szemben magunkat, mint a rosszul megválasztott kezdeti feltétel esetén. A Newton iteráció nem fog konvergálni (divergál vagy oszcillál attól függően, hogy milyen pályára áll a rendszer). A valóságban tehát a kezdeti feltétel helyes megválasztásánál sokkal komolyabb

probléma az, hogy hogyan tudjuk a módszert azon a trajektórián tartani, amit a fizikai viselkedés előír. Erre számos lehetőség van, amennyiben a rendelkezésünkre álló idő nem korlátos. A divergencia vagy oszcilláció detektálására van lehetőség a korrekciós vektor ellenőrzésével, és ezek észlelésekor lehetőség van a lépésköz csökkentésére, majd a gyors tranziensen túljutva és ismét gyors konvergenciát észlelve, a lépésköz visszanövelésére. Ezek a mechanizmusok a RETINA-ba is be lettek építve. Szimulátoros alkalmazás esetén azonban a valósidejű futás nem garantálható, ha hagyjuk, hogy a módszer az időlépését tetszőlegesen leaprózza, esetleg túl sokat iteráljon. A lehetséges megoldás ilyen szituációkban a relaxáció és a modellek időállandóinak illesztése az időlépéshez. A RETINA esetén alapvetően ezek a mechanizmusok biztosítják azt, hogy a Newton iteráció konvergálni fog. Természetesen ezek a mechanizmusok sem elegendők ahhoz, hogy egy teljesen rossz kezdeti feltételből megtaláljuk a szándékaink szerinti kezdeti állapotot. A kezdeti feltétel beállítása esetén azonban segít az a tény, hogy egy valós fizikai rendszert, a Paksi Atomerőmű primer és szekunderkörét kell modelleznünk. Mérések állnak rendelkezésünkre, hogy egy viszonylag pontos kezdeti feltételt adjunk meg a rendszernek. A mérések természetesen csak adott pontokban elérhetők, a térszerinti felbontás további részein a kezdeti értékeket interpolálva érdemes megadni. Az így megadott kezdeti feltételekkel ma már szinte bármely reaktorállapotra be tudjuk állítani a rendszer kezdeti feltételeit, a rendszer elég robusztus ahhoz, hogy konvergáljon. Extrém szituációk kezdeti feltételeit pedig úgy állíthatjuk be, hogy a rendszert végigvezetjük azokon a fizikai folyamatokon, amelyek a valóságban is előfordulnak. Ilyen kezdeti feltétel pl. a lehűtött állapot víz-vizes üzemmódja, amit úgy állítunk elő, hogy a lehűtés teljes folyamatát végigkövetjük.

2. kérdés

„Robinson (J.C. Robinson, Infinite-dimensional dynamical systems, Cambridge University Press, Cambridge, 2001) könyve a 2D NS (1) és az RD (2) egyenleteket egymással párhuzamosan tárgyalja. Numerikus módszerek szempontjából a Hairer,Lubich,Wanner (E. Hairer, Ch. Lubich, G. Wanner, Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations, Springer, Berlin, 2002.) könyvben kifejtett kvalitatív elmélet abszolút illetékes. Ennek az elméletnek egyik központi kijelentése, hogy a fizikailag releváns megmaradó mennyiségek viselkedése és a közelítő eljárások stabilitása között számos belső kapcsolat van. A Ge-Marsden tétel (Ge, Z., Marsden, J.E., Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators, Physics Letters A, 133(1988) pp. 134-139.) például azt mondja ki, hogy a klasszikus mechanika Hamilton egyenleteinek esetében az olyan közelítő eljárás, amely egyszerre őrzi meg a szimplektikus struktúrát és a Hamilton függvényt, szükségképpen az idő átparaméterezését és diszkrétté tételét jelenti a pontos megoldások mentén. Ennek a tételnek a fényében nem meglepő, hogy - Házi Gábor kifejezését használva - az analitikus pontosság a rács-Boltzmann modellek esetében sem érhető el; és hogy valamely megmaradó mennyiséggel és/vagy szimmetriával mindig baj lesz. Nem tudom, van-e a Ge-Marsden tételnek analogonja (s ha igen, ez milyen mértékű) a rács-Boltzmann modellek körében, de ha van, akkor a disszertáns eredményeinek egy része kapcsolatos vele. Kérdés: Kérem, kommentálja ezt a felvetést."

Köztudott, hogy a pontosság, stabilitás és konzisztencia fogalmai tipikus matematikai eszközök numerikus módszerek analízisére[1]. Kevésbé közismert azonban, hogy a másodlagosan megőrzött mennyiségek analízise (tehát olyan mennyiségeké, amelyek nem közvetlen ismeretlenei a problémának) segíthetik a módszer viselkedésének megismerését. Továbbá, a

[1] Nem úgy mint a „nem tökéletesen konzisztens" megfogalmazás, ahogy azt Oppenensem is megjegyzi. Sajnálom, hogy ilyesmi is maradt a dolgozatban, főleg mivel magam sem szeretem a pongyolaságot.

fizikai inkonzisztenciák felderítése komplex problémák esetén nehézkes, ezért célszerű már a numerikus apparátus tervezésekor odafigyelni erre.
A folyadékmechanika esetén például tudjuk, hogy összenyomható közegek áramlásának modellezésénél a tömeg- és impulzusmegmaradás figyelembevételén túl érdemes az entrópia megmaradásának tényét is figyelembe venni a numerikus módszer megválasztásánál, vagy például turbulens áramlások modellezésénél a kinetikus energia megőrzése fontos lehet (2D-ben az enstrópiáé is, hiszen súrlódásmentes esetben ez is megmaradó mennyiség), hogy a háttérben húzódó energiakaszkád folyamatát megfelelő módon tudjuk reprezentálni.
Részben ezek a tények motiválták a rács-Boltzmann módszer kutatóit is, hogy figyelmet fordítsanak a másodlagos megmaradó mennyiségek vizsgálatára és olyan fejlesztésekre, amelyek újabb és újabb rács-Boltzmann módszereket eredményeztek.
E törekvések hatására jöttek létre az ún. többsebességes rács-Boltzmann módszerek, amelyek a tömeg- és impulzus-megmaradás mellett a kinetikus energia megmaradását is igyekeztek figyelembe venni. E területen az úttörő munkát Vahala és társai végezték, ld. *“Vahala, L. L., Wah, D., Vahala, G., Carter, J., and Pavlo, P. (2000). Thermal Lattice Boltzmann Simulations for Multi-Species Equilibration.* Phys. Rev. E, *62, (pp. 507-516)* és az itt található hivatkozások.
Bár ez a dolgozat kifejezetten termikus problémák vizsgálatára alkalmas rács-Boltzmann módszer kidolgozását célozta meg, a Szerzők a módszer kidolgozásánál azt vizsgálták, hogy a kinetikus energia megmaradását hogyan lehet garantálni a rács-Boltzmann módszer keretein belül, továbbá, hogy az így kialakított módszer milyen stabilitási tulajdonságokkal rendelkezik.
Hasonló komoly lépés e területen a Karlin és csoportja (ld. pl. *S.S. Chikatamarla, S. Ansumali and I.V. Karlin, Entropic lattice Boltzmann models for hydrodynamics in three dimensions, Phys. Rev. Lett. 97, 010201 (2006))* által megalkotott a H-elméleten alapuló ún. entropikus rács-Boltzmann módszerek bevezetése volt. Ennek a modellnek a lényege, hogy a modellparaméterek meghatározásánál a termodinamika második főtételét (entrópia mindig növekszik, vagy ebben a kontextusban a H-függvény csökken a relaxáció során) is figyelembe vették (az eloszlásfüggvényeket az entrópiafelületen belül korlátozták). Így egy feltétel nélkül stabil módszerhez jutottak.
Tehát, mint ahogy léteznek pl. szimplektikus Runge-Kutta módszerek, léteznek olyan speciális rács-Boltzmann megközelítések, amelyek a megoldás speciális tulajdonságait igyekeznek figyelembe venni. Ugyanakkor, tudomásom szerint, nincs a Ge-Marsden tételnek megfelelő állítás a rács-Boltzmann módszerek körében, legalábbis ami – matematikai szempontból – hasonló letisztultságú lenne.

3. kérdés

„Egy másik megfontolás, analógia-keresés a Robinson már idézett könyvében központi szerepet játszó, és az ottani dinamikákat részben nemlineáris projekciók segítségével lassú és gyors változásokra szeparáló spektrális módszerekkel kapcsolatos. Ismeretes, hogy a Chapman-Enskog sorfejtést a rács-Boltzmann modellek körében ki lehet váltani az eloszlásfüggvények Grad-Hermite féle ortogonális sorfejtésével. Megfordult a fejemben, hogy az ortogonális sorfejtések szilárd matematikai megalapozottsága talán segítséget jelent a mindmáig heurisztikus Chapman-Enskog sorfejtés jobb megértésében, a benne alkalmazott időskálák megválasztásában, egymástól való elkülönítésében. Kérdés: Kérem a disszertánst, kommentálja ezt a feltételezést.”

A kinetikus modellekkel kapcsolatban egyik központi kérdés, hogy milyen módon lehet eljutni a kinetikai leírástól a makroszkopikus egyenletekig. A rács-Boltzmann módszer esetén a legjobban elterjedt módszer a Chapman-Enskog sorfejtés, amely valóban heurisztikusnak tekinthető, mint a legtöbb olyan módszer, amely arra épít, hogy a párhuzamosan modellezendő fizikai folyamatok idő- és térszerinti változásai valamilyen módon elkülöníthetők. A Chapman-Enskog sorfejtés esetén például feltesszük, hogy a konvekció és diffúzió nem hatnak dinamikusan egymással kölcsön, vagy más szavakkal, különböző időskálákon mozognak, és ezért szeparálhatók. A makroszkopikus egyenletek származtatása során fokozatosan jutunk el az Euler (még nincs momentumdiffúzió), majd a Navier-Stokes egyenletekhez, ahol a viszkozitás is megjelenik már az egyenletekben. Nem találkoztam még olyan, a témával ismerkedő szakemberrel, akiben ez a fajta aszimptotikus megközelítés ne ébresztett volna kétségeket. Azt gondolom, hogy dolgozatomban és az annak kapcsán megjelent cikkek közül jó néhányban visszatükröződik (analitikus eredmények keresése, hibák felderítése stb.), hogy számomra is nehéz volt befogadni ennek a megközelítésnek a létjogosultságát. Munkásságom során volt szerencsém matematikussal is együtt dolgozni az adott témakörben, aki közel egy évet szentelt annak vizsgálatára, hogy összehasonlítsa, milyen módszerekkel lehet eljutni a rács-Boltzmann módszertől a Navier-Stokes egyenletekig. Ha e munka eredményét röviden kellene összegeznem, akkor azt mondanám, többféle módszerrel is sikerült igazolni, hogy a rács-Boltzmann egyenletek megoldása a Navier-Stokes egyenletek megoldásához vezet makroszkopikus szinten. Továbbá, ennek igazolására léteznek a Chapman-Enskog sorfejtésnél matematikai szempontból jobban megalapozott, könnyebben befogadható módszerek. Őszintén megvallva azonban nem látom át, hogy ezen módszerek között hogyan lehetne olyan közvetlen kapcsolatot létesíteni, amely segítene a többskálás módszerek heurisztikus megközelítésének jobb megértésében. Meglehetősen sok időt eltöltöttünk hasonló kérdésekkel a téma kutatása kapcsán, azonban e tekintetben, úgy gondolom, eredménytelenek voltunk. Ugyanakkor nem zárom ki annak lehetőségét, hogy az Oppenens által felvetett út járható lenne. Magam részéről mindig úgy éreztem (és itt tényleg megérzésről van szó), hogy a feltett kérdést inkább a makroszkopikus egyenletek valamilyen formájú analitikus megoldását felhasználva lehetne, ha nem is általános módon, de példákra alapozva megválaszolni.

4. kérdés

„A rács_Boltzmann módszer alkalmas számos áramlástani mintázat megjelenítésére. A harmadik fejezet mintegy felét ezeket bemutató, részleteikben is jól kidolgozott esettanulmányok teszik ki. A tényleges műszaki alkalmazásokat megalapozandó, az esettanulmányok egy része – örvény- és buborékképződés atomreaktor fűtőelem-pálcái közötti keskeny szubcsatornákban - kapcsolatot teremt az értekezés második és harmadik fejezete között. Az általam ismert matematika szempontjából a fal mellől leváló egyedi buborékok keletkezésének szimulációi a legérdekesebbek. A 3.25 és a 3.30 ábrák egy-egy sebességmező időbeli, periodikusnak tekinthető változását mutatják be. Első látásra szokatlan volt számomra az ábrázolt sebességek egységvektorokra történő normálása - ezt leszámítva mindkét ábra a nem - lokális bifurkációk elméletében szokásos fázisportrékra emlékeztet. Kérdés: Lehet_e a 3.25 és a 3.30 ábrákat a bifurkációk nyelvén, a bifurkáció-elmélet szempontjából interpretálni? Lehet-e önmagában a sebességmezők rajzolatának (szép síma(?)) alakulásából a buborék keletkezésének és leválásának (mindenképpen - de lehet, hogy most rossz kifejezést használok - szakadásos, szinguláris) eseményeire következtetni?”

Véleményem szerint mind a buborékok keletkezésére és leválására lehet következtetni csupán a sebességmező alakulásából. Különösen igaz ez abban az esetben, mikor a problémát háttéráramlás nélkül vizsgáljuk, tehát a 3.25 ábra esetén. Ebben az esetben ugyanis a buborékok keletkezésével párhuzamosan, a tartomány közepén elhelyezkedő függőleges tengely két oldalán szimmetrikusan egy-egy örvény jelenik meg, a korábbi örvénymentes sebességképben. Ezek az örvények addig nőnek, amíg a buborék le nem válik. A leválást jól jelzi a sebességprofil addigi szimmetriájának megtörése. A buborék keletkezését – úgy gondolom – lehetséges a bifurkációelmélet szempontjából is interpretálni. E rendszernél ugyanis a buborék kialakuláshoz, növekedéséhez, és leváláshoz egy folyamatosan fenntartott hőforrás szükséges. Ennek a hőforrásnak lokálisan el kell érni egy kritikus értéket, hogy a kvalitatív strukturális változások, a forrás maga, megkezdődjön. A buborékok leválás utáni viselkedése szintén tárgyalható lenne a bifurkációelmélet szempontjából. Azt ugyanis, hogy a buborékok felemelkedésük során milyen pályán mozognak, egyértelműen befolyásolja a folyadék viszkozitása. Nagy viszkozitású közegben a buborék pályája szép egyenes, míg a viszkozitás csökkentésével elérhetünk egy olyan kritikus értéket, ahol a buborék mozgása oszcillálóvá válik.

5. kérdés

„A tág értelemben vett átlagolási módszerek használata teljesen általános azoknak a folyamatoknak a vizsgálatában, amelyek egyszerre különböző idő-skálákon és/vagy térskálákon valósulnak meg. A kevesebb számú átlagolt egyenletből álló rendszer matematikai értelemben vett lezárása többféleképpen is elképzelhető. A rács-Boltzmann modellek körében ezzel kapcsolatban nehéz, és az értekezésben is megjelenő probléma, hogy az átlagolt, probabilisztikus egyenletrendszerben a peremfeltételek fizikája hogyan jeleníthető meg a legjobban. A fűtött fal síknak, a horizontális peremfeltételek periodikusnak választása a matematikailag leginkább kézenfekvő lehetőség. A nagyon szép az, hogy még ilyen egyszerűsítések mellett is sikerült a diszszertánsnak egészen gazdag jelenség-csoportokat bemutatnia. Utalást tesz arra, hogy a fal finomabb geometriájának (fraktálszerkezetének(?): a differenciáloperátorok elmélete fraktálokon is működik) figyelembe vétele az összkép további árnyalását teheti_teszi lehetővé. Kérdés: A disszertáció elkészítése óta történt-e továbblépés ebbe az irányba?”

Igen történt, az eredményekről a következő dolgozatokban számoltunk be:

[1] Márkus A., Házi G., On pool boiling at microscale level: The effect of cavity and heat conduction int he heated wall, Nuclear Engineering & Design, 248, 238-247, (2012)

[2] Márkus A., Házi G., Numerical simulation of the detachment of bubbles from a rough surface at microscale level, Nuclear Engineering & Design, 248, 263-269, (2012)

Már a dolgozat megírásával párhuzamosan megkezdtük azokat a vizsgálatokat, amelyekkel célunk annak demonstrálása volt, hogy a falak szerkezete (és az abban zajló hővezetés) jelentősen befolyásolhatja a buboréknövekedés és -leválás folyamatát. Ezeknél a számításoknál a buborékok nem egy sík falon növekedtek, hanem a falban egy kisméretű, téglalap alakú, mélyedést helyeztünk el. Az [1] dolgozatban összehasonlítottuk a sík fal mentén történő leválás esetét ezzel a speciális esettel, és rámutattunk arra a tényre, hogy a korábban alkalmazott egyszerű analitikus megközelítés alapján származtatott összefüggések (leválási átmérőre és frekvenciára), már ebben a viszonylag egyszerű esetben is csődöt mondanak. Még érdekesebb esetet vizsgáltunk a [2] dolgozatban. Itt a falban több kis méretű mélyedést helyeztünk el (változtatva a méretüket és távolságukat), és azt vizsgáltuk, hogy ezek milyen módon képesek befolyásolni a buborékok növekedését és leválását. Utóbbi esetben kimutattuk például, hogy két szomszédos mélyedés képes egymásra hatni, az egyik például képes gátolni (akár teljesen megakadályozni) a buborék növekedését és leválását a másikban. Hasonló komplexitású numerikus vizsgálatot, tudomásom szerint, mind a mai napig nem végeztek a világban. Az elvi lehetőség megvan ugyan arra, hogy a fal geometriájának komplexitását tovább növeljük, és további vizsgálatokat végezzünk (pl. fraktálszerű repedésekre), de véleményem szerint előbb a jelenlegi komplexitás mellett megfigyelt jelenségeket kellene inkább magyaráznunk, mint továbblépnünk.

Jelenleg – többek között - hasonló problémák vizsgálatát folytatjuk három térdimenzióban, a NURESAFE Európai Uniós projekt keretein belül.

Házi Gábor
Tudományos főmunkatárs
MTA EK