Bírálat

Ván Péter

Nemegyensúlyi termomechanika

c. MTA doktori értekezéséről

A jelölt a disszertációban a nemegyensúlyi, klasszikus termodinamika és kontinuummechanika számos fő kérdését tekinti át és közülük néhányra sikeresen válaszol. A munka teljes terjedelme 182 o., ebből 31 o. függelék és ugyanennyi a 450 hivatkozás felsorolása. A témakört rendkívül széleskörűen dolgozza fel, melynek során több, mint egy évszázad eredményeit és vitáit elemzi, s ezekhez a szerző saját munkáit számos helyen kapcsolja. A disszertáció összképe igen kedvező, a szöveges leírások gördülékeny stílusúak és részletgazdagok, az összefoglaló részek számos hivatkozással vannak alátámasztva, a technikai levezetések kellő gonddal, jól követhetően szerkesztve, s az elírások száma viszonylag csekély. A dolgozat három fő részre tagolódik, az alábbiakban a tárgyalt témaköröket s a szerző eredményeit mutatom be.

Az első fejezet a homogén testek nemegyensúlyi termodinamikáját tekinti át, az egyetemi anyagot inerciális hatással kiegészítve.

A második rész a dolgozat gerince, nemrelativisztikus kontinuum termodinamikával foglalkozik. A történeti szakaszt követően különféle típusú inhomogén közegek vezetési tulajdonságait a második főtételre alapozva vizsgálja. Bevezeti és számos példán alkalmazza a jelen munkán vörös fonalként végigvonuló azon elvet, mely szerint a nemnegatív entrópiatermelés feltételéből nemegyensúlyi konstitutív egyenleteket nyerhetünk. Itt sok az egyszerűsítő feltételezés, általában a második főtételt és a megmaradási tételeket teljesítő legegyszerűbb sebesség- és áram-formulákat írja fel. Elsőként kiemelendőnek tartom azt, hogy a második főtételből közvetlenül, azaz variációs elv alkalmazása nélkül jut Euler—Lagrange-alakú egyenletekhez. Ennek révén lényegében a variációs elméleteket, beleértve a Ginzburg—Landau- ill. Cahn—Hilliard-modelleket mélyebben alapozza meg. Azután fizikai értelmükben nem tisztázott, „rejtett” jelentésű változókat vezet be, melyekhez alapot utólag az ad, hogy segítségükkel effektív disszipatív egyenletek származtathatók. A tankönyvekből ismert irreverzibilis termodinamikát újratárgyalva a vezetési együtthatók szimmetriájával kapcsolatosan precíz feltételt ad. Ezt követően folyadékok entrópiatermelését vizsgálja arra az esetre korlátozva, melyben a konstitutív mennyiségek legföljebb az állapotváltozók gradienseitől függnek. A Liu-tétel alapján megadja a konvektív entrópiaáramot, az entrópiatermelés formuláját, majd ugyanerre heurisztikus, érzékletes levezetést mutat, végül a kvantummechanika Schrödinger-egyenletének hidrodinamikai, Madelung-féle reprezentációjának entrópiaáramát kifejezi. Azután korábbi gondolatmenetét újra alkalmazva egyrészt a hidrodinamikai rendszer nyugalmi állapotának stabilitását mutatja ki a homogén testek termodinamikai stabilitásának alapján, s megfordítva, a kontinuum egyenletek integrálásával vezeti le a homogén testek termomechanikai egyenleteit. A második rész hátralevő szakaszaiban a hővezetés korábbról ismert, különféle formuláit (Fourier, Maxwell—Cattaneo—Vernotte, Guyer—Krumhansl, Jeffreys és Green—Naghdi egyenleteit) közös elmélet keretében állítja elő csupán két feltételt használva, éspedig egyetlen „rejtett”, kvadratikus változó létét, illetve az entrópia- és energiaáramnak egymással való arányosságát megkövetelve. Az elmélet számos anyagi paramétert tartalmaz, ezért kísérleteken tesztelték, melyek a Guyer—Krumhansl-féle vezetést indikálták – ezt a jelen elméleti dolgozat egyik legüdítőbb fejezete mutatja be. A második részt egy reológiai modellel zárja, melyben Verhás Józsefre hivatkozva bevezet egy „rejtett” jelentésű tenzorteret, ezt később kiküszöböli, s a második főtételt teljesítő lineáris egyenletek alakjára visszanyeri a Kluitenberg—Verhás-rendszert, melyhez kapcsolódó munkáit felsorolásszerűen összefoglalja. Ez az öt oldal önálló disszertáció vázlata lehetne; a szerző színvonalas munkáját elismerem, azonban a fizikai magyarázatot és az eredmények elemzését hiányolom.

A harmadik rész a relativisztikus hidrodinamikát tárgyalja. Helyesen azzal kezdi, miszerint a sebességmezőt többféleképpen definiálhatjuk, azután mind az Eckart-féle, azaz részecskemozgással, mind a Landau—Lifsic-féle, azaz energiaáramlással értelmezett sebességmezőt magában foglaló elméletet mutat be. (Meglepő módon fejezetcímként csak az előbbi nevet jelöli.) Bevezetésül az entrópiatermelés legegyszerűbb feltételek melletti következményeit írja fel, azaz a Navier—Stokes—Fourier-féle disszipatív hidrodinamikai egyenletek relativisztikus megfelelőit. Ennek lényege a Landau—Lifsic-féle gondolatmenet, melyet itt általánosabb sebességfogalomra terjesztett ki. Ezt követi a dolgozat egyik legérdekesebb és legfontosabb része, egy 2008-as, egyszerzős cikke [386] és az azt követő [387,388] munkák ismertetése, éspedig a részecskeáram és az energia-impulzus-tenzor alakjára vonatkozó előzetes feltevések nélküli, a korábbi nemrelativisztikus gondolatmenetei általánosításaként kapott hidro-termodinamikai egyenletek. Előállítja a második főtétel betartásához minimálisan szükséges, relativisztikus konstitutív hővezetési formulát, melyben az Eckart—Landau—Lifsic-egyenletekhez képest új, a hővezetés és az impulzusmérleg csatolódását kifejező tagok jelennek. Mindezeket összeveti a Boltzmann-egyenleten alapuló kinetikus elmélettel, mely a részecskeáramra és az energia-impulzus-tenzorra egyszerű kifejezéseket eredményez, egyben szemléletes jelentést adva az egyensúlyi eloszlás relativisztikus változatában fellépő „hőmérséklet-négyesvektor”-nak. A fejezetet a relativisztikus hidrosztatikai stabilitásnak a termodinamikaira való visszavezetésével, valamint a kontinuum-elmélet „homogenizálásával” nyerhető, relativisztikus Gibbs-relációval zárja.

Az összefoglalást négy függelék követi, éspedig a klasszikus anyagi áramlások matematikája, Farkas lemmája, Reynolds transzporttétele és a relativisztikus termodinamika története témaköreiről.

Nemcsak a szerző számos közleménye alapján bemutatott eredmények dicsérhetők, hanem a dolgozat mint a szélesebb témakör áttekintése is hasznos lehet hallgatóknak, kutatóknak. Időben egyre növekvő élvezettel forgattam, s ajánlom, hogy kellően átdolgozott változatát publikálja nemzetközi „review” folyóiratban.

Összegzésképpen a disszertáció az MTA doktori elé támasztott követelményeket messzemenően megüti, munkássága koherens, egyúttal változatos, eredményei eredetiek, és nem egy közülük fontos és alapvető a területen. A pályázat minden tézisét elfogadom, s a cím odaítélését -- igen valószínűen a kérdéseimre adandó válaszoktól függetlenül – támogatom.

Alább kiemelem a dolgozat néhány erősségét és gyengéjét, azután kisebb megjegyzéseimet és a talált hibákat, végül főbb kérdéseimet sorolom fel.

Budapest, 2019. augusztus 31.

Györgyi Géza

ELTE TTK, Anyagfizikai Tanszék
gyorgyi.geza@ttk.elte.hu
http://glu.elte.hu

Kiemelhető erősségek:

A témakör rendkívül érdekes, messze nem lezárt, több fizikai alapkérdés nem megértett, az anyagfizika, asztrofizika és nehézionfizika területein a jelen munka további kutatási irányokat inspirálhat.

A disszertáció nem tárgyalja a szerző utóbbi évekbeli tevékenységét, mely részben a nehézionfizika termodinamikai vizsgálatára vonatkozik. Dicséretes a mértéktartás, az utóbbi, gyorsan változó területen a részeredményeket esetleg hamar meghaladhatják, s a szerző igényességét mutatja az, hogy a jelen munkában a tartósnak ígérkező eredményekre szorítkozott.

A dolgozat fő gyengéje:

Ismétlődő probléma, hogy korábbi viták áttekintéseiben a szerző gyakran nem határolja el a csupán tudománytörténeti jelentőségű, esetleg filozófiai nézetkülönbségeket a jelenleg is nyitott, lényegi fizikai kérdésektől. Ez a saját eredményeit nem érinti, de a kívülálló olvasó tájékozódását megnehezítheti. Például a különféle relativisztikus hőmérséklet-definíciókról szóló viták ismertetésekor az Einstein—Planck-féle érvelésnél korabeli hivatkozással is alátámasztja azt, miszerint a nyomás Lorentz-invariáns mennyiség, noha ma harmadéves hallgatók is ismerik a feszültség relativisztikus transzformációját. Arra kérem a szerzőt, a jövőben az áttekintő munkáiban ne hagyjon homályban mára tisztázott kérdéseket pusztán nagy elődök iránti tiszteletből. Általában elmondható, hogy több fejezet bevezetőjét érdemes jelentősen csiszolnia, a lényeget jobban kidomborítania, ha „review" cikket tervez írni. Hangsúlyozom, hogy a saját alkotómunkáját ismertető részek stílusát általában korrektnek tartom.

Kisebb megjegyzések:

3. o. (1.1): A baloldalon a „*d*" felesleges.
9. o. (1.24): A jobboldali egyenlőség csak a kvázisztatikus közelítésben igaz.
10-11. o.: A „négyzet" időderivált bevezetése nélkül is érthető lenne a formalizmus.
11. o.: Az 1.1 tétel bizonyításában nincs szó a környezet entrópiájának konkavitásáról – ez mulasztás, vagy valóban nincs e tulajdonságra szükség?
12. o. (1.36): *D*s nincs definiálva, noha kitalálható, s a jelölés sem szerencsés, hiszen nem infinitezimális.
13. o. (1.41): Az összes fajlagos entrópiáról van szó? A „*T*" index teljeset jelent? Később ugyanezt kis „*t*" jelzi. A jobboldalon egy „+" törlendő.
14. o. (1.43) alatt: Helyesen „-egyenletében"; az oldalon többször: helyesen „van der Waals"; (1.45) végére pont helyett vessző.
15.o.: A 1.2. ábra aláírásban helyesen „különböző", a bal alsóról a szövegben azt írja, a csillapítás erősen le van csökkentve, pedig csak η=0, míg α=1; a jobb alsó ábra mellől hiányzik gamma értéke;
17.o.: Az 1.4. fejezet utolsó mondatában „mielőtt a kontinuumok tárgyalásá"-nál említi a rugalmasságtant, noha ez utóbbi is kontinuum. A 1.5. első bekezdésének megfogalmazása többhelyütt túloz, pl. „rugalmas testek kontinuumelmélete … szigorúan véve és objektív módon nem létezik." Számos fizikai elmélet, ha elég szigorúan nézzük, matematikai szemszögből nem létezik. Későbbi írásaiban legyen reálisabb.
18. o. (1.56): Hogyan egyeztetheti össze a $\sigma\varepsilon$ tagot azzal, hogy a lineáris elaszticitásban a szabadenergia sűrűsége ½ $\sigma\varepsilon$?
19. o. (1.62): Súlyosan hibás, a környezet nem ugyanott mozdul el, alapesetben csak a felületen érintkezik a testtel! A szerző is érzi a problémát, később utal a könnyebben magyarázható egydimenziós változatra, de valójában ott sem egyenlítődnek ki pontonként a deformációk. Az 1.5.1. nem befolyásolja a későbbieket, de a fizikai értelmezést félrevezeti.

20. o.: (1.64)-ban a baloldalon a korábban „s_T”-vel jelölt mennyiség áll? (1.65)-ben ν-vel jelöli a hagyományosan λ Lamé állandót. Nem említi az állandók *T*-függését, mely a termodinamika alapjairól szóló műben elvi hiba.

21. o.: Alulról a 4. sorban hiányzik egy egyenletszám.

24. o.: Alulról az 5. sorban helyesen „onsageri”.

27. o.: A 2.1. utolsó bekezdésében helyesen „Le Chatelier”.

29. o, 6. sor: Helyesen „anyagtörvényeknek”; a 2.2.2. fejezet problémája eltúlzott, az érintővektorok ill. az idővderiváltak transzformációjának eltérése elsős egyetemi anyag, ebből származnak a tehetetlenségi gyorsulások.

36. o.: (2.9)-ben gamma jelentése más, mint korábban, pl. 1.4-ben; (2.10) baloldala O(1), a jobboldal elsőrendű variációnak van jelölve, amely fizikai szövegekben gyakran infinitezimális mennyiséget jelöl. Érthetőbb lenne a δ helyében „δ / $\delta\xi$”-t írni.

39. o. (2.23): A $\mathfrak{I}$ nincs kellően definiálva, noha a jelentése kideríthető, különösen a későbbi részek alapján.

41. o. (2.32): Korábban és később is használt egyszerűsítés, miszerint a szimmetrizált alakra érvényes feltételt a teljes tenzorra kiterjeszti. Mi ennek a fizikai háttere, van-e köze a részletes egyensúly elvéhez? Az egész oldalon a $\mathfrak{I}$ szerepét szabatosabban kellene bemutatni.

43. o.: A (2.40) alatti 8. sorban hiányzik egy referencia.

44. o: A 4. bekezdés nem téves, de igen homályos fogalmazású.

48. o.: Nagyon speciális képleteket használva mutat analógiát a lagrange-i mechanikával, miközben általánosabb *A* és *B* mellett az analógia esetleg nem is áll fenn.

49. o.: „A disszipációs potenciálok…” bekezdés igen homályos. Noha egyes mondatok többnyire helyesek, az összefüggések nem érthetők – ez nem csak a szerző hibája, a terület maga tisztázatlan. „Sokáig azt remélték…” résszel zárja, s nem mondja meg, bevált-e a remény.

49. o.: A (2.64) alatt diffúzióról ír, miközben l_2>0 mellett nem diffúzív tagot kapunk. Nem emeli ki, hogy ez speciális disszipációs tag, hiszen általában az „*a*” hely szerinti deriváltjaitól is függhetne.

51. o. (2.65): utaljon a 2.4.3. fejezetre.

52. o. (2.73): Hiányzik az Onsager-együtthatók szimmetriájának elemzése. Pl. homogén *L*-ek esetén mérhető lenne-e az antiszimmetrikus rész?

53. o.: A 2.6. utolsó sorában hiányzik a hivatkozási szám.

53-54. o.: A 2.7.1. fejezet első bekezdése súlyosnak hangzó állításainak egy részéről azt gyanítom, hogy viszonylag egyszerűen feloldhatók. Mivel a fejezet későbbi része értékes és érvényes, ezért nem feszegetem a bevezetője finom szerkezetét.

54. o. (2.75): P^{ij} „nyomástenzor” igen szokatlan, elterjedtebb a -P^{ij} feszültségtenzor.

57.o. (2.96) alatt: „L^{ijkl} pozitív szemidefinit konstitutív függvény”, valójában negatív szemidefinit! (2.97) fölött: „A nyomás reverzibilis része, …, felfogható erőként is.” Pontosabban felületi erősűrűségként, továbbá nemcsak a reverzibilis, hanem az irreverzibilis rész is erősűrűség! (2.99)-ben „:” törlendő.

58. o. (2.103): „érdemes szubsztanciális deriváltakat bevezetnünk” – korábban már bevezette azokat.

59. o.: A (2.105)-ben a $\mathfrak{I}$ itt nem léphet fel?; (2.109) körül hiányzik az, hogy $\hat{s}$ egyváltozós függvény, első ránézésre szorzótényező is lehet.

61. o.: A (2.116) alatti sor, a második „1” index helyesen „2”.

64. o.: A 4. sorban helyesen: „állandók”.

67. o.: A $q = \delta Q/M$ jelölés nehezen érthető. Korábban delta variációt jelölt, itt nyilván makroszkopikus különbséget.

69. o.: A lábjegyzetben hivatkozás hiányzik.

70. o.: A 6. sorban helyesen „-egyenleten”; a 7-ben „makroszkopikus”.

82. o.: Egyébként üres oldal közepére került a táblázat, az aláírásban pedig szaggatott vonalakra van utalás, noha nem ábra.

83. o. (2.190): *H* helyesen elmozdulásgradiens vagy disztorzió, s nem „mozgásgradiens” vagy „deformációgradiens”.
84. o. (2.198): *P*-nek az „*r*” indexe feltehetően „*v*”.
92. o.: Nincs elhelyezve az Eckart-elmélet a relativisztikus hőmérsékletről szóló vitában. Talán a Landsberg-féle interpretációt használja?
97. o. (3.26): Hétsoros képlet elé írja, erre „egyszerűsödik” az előző.
99. o.: A (3.35) fölött nemde $p^a=mu^a$?
102. o. (3.50): Az első egyenletből két helyen hiányzik a mínusz jel.
106. o.: Az első sorban helyesen „egyenlőségek”; 3.6. első bekezdésében kétszer, helyesen „Gibbs”.
107. o. (3.81): *A* és *Q* miért ortogonális? A (3.84) jobb oldalán hiányzik egy „d*t*”.
108. o.: Miért nem lehet „*u*” állandó? Nemde G^a nem egyenlő $\int q^a\, \mathrm{d}V$-vel? Itt részletesebb magyarázat indokolt.
108. o.: A (3.90) alatt három sorral: helytelen a „bal”, helyesen „jobb”.
111. o.: A teljes A függeléket hol használja a fő részben? Rigorózus matematikának látszik, de nem világlik ki, mi a rigorózus következménye.
128. o.: A közepe táján négy szumma felső határa hibásan „*m*”, helyesen „*n*”.
129. o.: A 3. sor kezdő „*” jele törlendő. A következő kiírt képlet majdnem azonos a 128. o. közepivel, de itt korrektek a szummák.
131. o. (C.1): A parciális derivált nem a *v*-re, hanem az *f*-re hat.
136. o., alulról a második „-” jellel kezdett részben: A nyugalmi hőmérséklet Lorentz-skalár, hasonlóképpen, mint a nyugalmi tömeg!

Főbb érdemi kérdéseim:

1. A „rejtett” jelentésű változók 2.5. fejezetben leírt időfejlődése látszólag az egyszerű, kvadratikus alakban felvett generáló függvénynek köszönhetően analóg a hamiltoni mechanikával. A példa matematikai érdekességén túl van-e általánosabb érvénye a hamiltoni analógiának? Ennek a kérdésnek az effektív disszipatív egyenleteknek a hamiltoni mechanikával való illesztésében lehet jelentősége.

2. Mit mondhatunk a hidrodinamika (2.96)-ban definiált L^{ijkl} viszkozitási együtthatóinak szimmetriájáról? Ez következhet disszipációs potenciálból, esetleg mélyebb statisztikus fizikai háttere lehet. A szimmetria függ-e attól, hogy állandók az együtthatók vagy helyfüggők?

3. A Schrödinger—Madelung-folyadékot csak szabad részecskére mutatja be. Meghatározható-e az entrópiáram elektromágneses tér jelenlétében, illetve egynél több részecskére? Általánosítható-e a hidrodinamikai leírás relativisztikus részecskékre?

4. A 2.10. fejezetben bevezetett „rejtett” változót a reológiával hozza kapcsolatba, de csupán az említés szintjén. Ha jól értem azt állítja, hogy matematikailag nem megszorítás a kvadratikus formula felvétele, ugyanis a tenzori szabadsági fok hordozza a fizikai tartalmat. Ez igen elvont, konkrétabb érvelésnek lenne itt helye.

5. A relativisztikus hidrodinamika központi mennyisége az energia-impulzus-tenzor. Csakhogy ennek mind a kanonikus, mind a Hilbert-féle definíciója variációs alapon áll, melyre a dolgozatban semmiféle utalást nem találtam. Tudok arról, hogy Landau és Lifsic sem használja az előbbieket, a tenzort a mérlegegyenlete alapján értelmezi. Mindazonáltal ez utóbbi általában klasszikus lagrange-i térelméletek megmaradási tétele, mely a hatásfunkcionál téridőbeli eltolásinvarianciájának a következménye, s ennek tárgyalása a jelen munkából hiányzik.

6. A 3.4. fejezet kinetikus elmélete egyrészecske eloszlásokra faktorizálja az ütközési integrálban fellépő kétrészecske eloszlásokat, s ennek megfelelően az relativisztikus ideális gáz állapotegyenletéhez jut. A gondolatmenet során mindazonáltal több termodinamikai relációt is nyer. Ezek között vannak-e általánosabb érvényűek, azaz olyanok, amelyek korrelációk figyelembevétele mellett is fennállnának?

7. A leglényegesebb technikai kérdésem Liu tételének a Lagrange—Farkas-multiplikátorokkal való alkalmazására vonatkozik, mely a dolgozatban sokszor használt és kulcsszerepet játszó eljárás. Mindazonáltal úgy látom, a multiplikátorok bevezetése nélkül, a kényszerek közvetlen behelyettesítésével, az algebrailag független tagok azonosítása után előállnak ugyanazok az összefüggések, melyeket a dolgozatban multiplikátorokkal nyertünk. Valóban, multiplikátorokat más területeken gyakran olyankor használunk, ha nem tudjuk a kényszereket direkt visszahelyettesíteni, avagy a kényszererőket is meg kívánjuk határozni. A behelyettesítés azonban a jelen munkában igen egyszerűen megtehető, a mérlegegyenletek által indukált „kényszererők" érdekessége vagy jelentősége pedig nem világlik ki. Kérdés tehát, miért folyamodott a szerző a multiplikátorokhoz, melyek bevezetése a disszertáció nagy részében könnyen elkerülhető lett volna, amikor is a kevesebb változóval egyszerűbbekké váltak volna a számítások.

8. A szerző a dolgozatban általában konstitutív egyenletekben csak a második főtétel teljesítéséhez minimálisan szükséges tagokat veszi fel. Így például rendszeresen a folyadékok newtoni típusú súrlódásához jut el, noha a valóságban bonyolultabb, magasabb rendű súrlódási feszültségek is léteznek. Tervezi-e a jövőben ilyen irányban folytatni a kutatásokat?

9. A relativisztikus tárgyalásból hiányzott a reológia. Természetes kérdés a nemrelativisztikus hővezetés általános elmélete ismeretében, miszerint egyrészről léteznek-e, s milyen alakúak a relativisztikus konstitutív egyenletek, továbbá, ezek származtathatók-e „rejtett" jelentésű paraméterekből a második főtétel alapján. Ennek lassú háttéráramlások esetén is lehet jelentősége, ha a közegben relativisztikus hullámok terjednek.

* * *