VÁLASZ GESZTI TAMÁSNAK

VÁN PÉTER: NEMEGYENSÚLYI TERMOMECHANIKA C. MTA DOKTORI ÉRTEKEZÉS BÍRÁLATÁHOZ

Köszönöm bírálóm észrevételeit és értékelését. Az általános észrevételeivel kapcsolatban, a kérdésekre adott válaszaim előtt csak egyetlen dologra reagálnék. A fázismezők alatt ugyanazt értem, mint a bírálatban említett kutatók, de értekezésemben a fázismezők fejlődési egyenleteit a nemegyensúlyi termodinamika oldaláról vizsgáltam, megmutatva, hogy a második főtétel elegendő a levezetésükhöz. A nemegyensúlyi termodinamika segít az egyenletek stabilitásának elemzésében és összeilleszthetővé teszi a fázismező elméletet más, klasszikus mezőkön alapuló elméletekkel. Gyakorlati szempontból sem közömbös, hogy az entrópiaprodukcióból a hőtermelés kiszámítható.

VÁLASZOK A KÉRDÉSEKRE:

1. *Lézeres kísérletek.* Igen tervezzük a kísérletek továbbfejlesztését, nagyon sok más anyag van, amelynek vizsgálata érdekes lehet. Emberi erőforrás kérdése, illetve mivel már a másodperces időskálán is találtunk vizsgálható anyagokat, a jelenlegi berendezésünkkel is számos kérdést tisztázhatunk, ezzel a finomabb kísérleteket is előkészítve. Jelenleg a mérethatást mérjük.
2. *Diszlokációk és szemcsehatárok.* Nagyon szoros kapcsolat van, az általánosított kontinuummechanika egy belső változós disszipatív elmélete az a termodinamikai reológia.

   A képlékenység és a diszlokációelmélet kontinuumelmélete az általánosított kontinuummechanika (például mikropoláris, Cosserer-féle, vagy mikrodeformációs kontinuumok) témaköréhez tartozik. Ennek legfontosabb kutatói, például Mindlin vagy Eringen a racionális mechanika és termodinamika elméletével kapták a fejlődési egyenleteket. Mindlin elsősorban ideális esetre, variációs technikákkal [1], Eringen átlagolással [2, 3]. Mindkét esetben az entrópiaáram klasszikus, $J^i = q^i/T$, formájához ragaszkodtak. A francia iskola, benne elsősorban Gerard Maugin és Samuel Forest, a virtuális teljesítmény elvével vezetik le a vonatkozó egyenleteket [4, 5, 6]. Mindhárom módszernél a fő szempont a gyengén nemlokális tagok és az ezzel kapcsolatos belső méretskálák származtatása. Megemlítendő még Elias Aifantis, aki intuitív módon, az elméleti hátteret legtöbbször figyelmen kívül hagyva, sikeres modelleket használt a belső hosszskálák bevezetésére [7].

   Az általunk leginkább vizsgált Kluitenberg-Verhás reológiai test egyetlen szimmetrikus másodrendű tenzori belső változót tartalmaz [8]. Ez a lehető legegyszerűbb, termodinamikailag konzisztens kiterjesztése a kis deformációs lineáris viszkoelaszticitásnak (Kelvin–Voigt-test). Ennek általánosításaként, két szimmetrikus másodrendű tenzorral, gyengén nemlokális elméletben megkapjuk az Eringen-féle mikrodeformációs általánosított kontinuumot. Ezt mutatta meg Berezovski, Engelbrecht és Maugin 2011-ben, illetve néhány évvel később szigorúbb módszerekkel Berezovski, Papenfuss és én terjesztettük ki ezeket az eredményeket a dolgozatban leírt módszerrel (1/e tézispont, illetve [9, 10]).

3. *Képlékenység.* A dolgozatban bemutatott tárgyalásban nincs képlékeny deformáció. Viszont egyéb publikációimban bemutattam, hogy kis deformációs esetben a képlékenység elég egyszerűen kapcsolható a Kluitenberg–Verhás-modellhez.

   A kapcsolatot lényegében a tapadási súrlódás termodinamikai modelljének kontinuum általánosítását jelenti, de nemlineáris onsageri együtthatókkal. Időben egyenletesen növekvő $F = Vt$ külső erő hatására tapadási és Coulomb súrlódási erővel, illetve közegellenállással fékezett tömegpont mozgásegyenlete hagyományosan a következő:

$$m\dot{v}(t) = \begin{cases} 0, & \text{ha} \quad Vt < \alpha, \\ Vt - \alpha\frac{v(t)}{|v(t)|} - \beta v(t), & \text{ha} \quad Vt \geq \alpha. \end{cases} \tag{1}$$

   Itt α és β a tapadási-csúszási súrlódást és a közegellenállást jellemző együtthatók. Egyszerű termodinamikai gondolatmenettel az entrópiaprodukció a súrlódási erő és a sebesség szorzatával arányos és a fenti egyenlet helyett következő differenciálegyenletet kapjuk

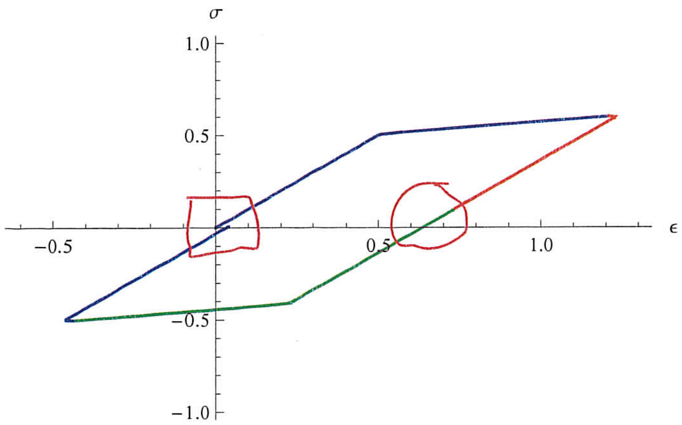
$$m\dot{v} = Vt - L(v)v, \quad \text{ahol} \quad L(v) = \frac{\beta}{1 + \beta|v|/\alpha}. \tag{2}$$

   Ennek az egyenletnek hasonlóak a megoldásai, mint (1)-nek, de nincs benne explicit tapadási erőfeltétel. A disszipatív erő interpolál a súrlódási és a közegellenállási erő között, és a tapadási feltételt nem kell külön előírni. A nemlinearitás alapötlete Houlsby és Puzrin a talajmechanikában bevezetett nem-kapcsolt hiperképlékenység elméletén alapul [11]. Kontinuumokban a Kluitenberg-Verhás modellel kombinálva a fenti ötletet egy olyan képlékenységi elméletet kapunk, amelyből kiküszöböltük a folyáshatár explicit előírását [12]. Például egytengelyű, ciklikus terhelésre az 1. ábrán látható, kinematikai képlékenységre jellemző feszültség-deformáció görbéket kaphatjuk. A bejelölt részek mutatják a reológiai késleltetést és a maradó deformációt.

   A súrlódásra vonatkozó termodinamikai meggondolásokat Noa Mitsui munkatársammal általánosítottuk. Termodinamikailag levezettük a kőzetek lassú mozgása során tapasztalt úgynevezett sebesség- és állapotfüggő súrlódási törvényeket és egyesítettük Dieterich és Ruina törvényeit [13, 14].

4. *Mikromechanizmus és duális belső változók.* Példák lehetnek erre a fázismezők és az általánosított kontinuumok.

   Minden, az átlagtér tehetetlenségét a dinamikába építő elmélet egy dinamikai szabadsági fokos elmélet (Maugin értelemben), ezért disszipatív esetben duális belső változós elméletnek tekinthető. Általában előbb törekszünk az interpretációra és nem használjuk a termodinamikából eredő univerzalitást. A legismertebb ellenpélda, a fázismező elméletek, az egyetlen gyengén nemlokális belső változó esete, ahol bizonyos értelemben utólag keressük a mikroszkópikus értelmezést. A duális belső változóknak megfelelő tehetetlenséget mutató fázismező elméletről én nem tudok, de biztosra veszem, hogy a téma hatalmas irodalmában van ilyen.



1. ábra. Képlékeny hiszterézis. Fekete az egyenletes húzás és állandó feszültségen tartás, piros az egyenletes visszaterhelés nulla feszültségig, illetve zöld és kék a hasonló nyomásterhelést jelöli. Bekarikázva reológiai eredetű késleltetést, szögletesen pedig maradó deformációt jelöltem.

A már említett általánosított kontinuumok (1/e tézispont) esetén a belső változókat hagyományosan geometriailag értelmezik, mind másodlagos deformációt vagy belső forgást. Ezt vezetik vissza a rácspotenciál, illetve diszlokációk tulajdonságaira [6]. Ez nem szükséges, sőt félrevezető lehet, lásd például [15], ahol a fonon diszperziós relációkból azonosítják a mikromorfikus elmélet anyagi paramétereit. A duális belső változókkal értelmezhető lehetséges diszperziós relációkkal az általunk ismert és megfigyelt kvalitatív hullámterjedési formák szinte mind leírhatóak, számos példát említünk Arkadi Berezovski-val írt könyvünkben [16].

5. *Hosszútávú erők.* Igen, hosszútávú erők hatásának leírására egyértelműen kiterjeszthető az értekezés módszertana.

Sumiyoshi Abe-val beláttuk, hogy a legtipikusabban nemextenzív és hosszútávú kölcsönhatásnak tekintett gravitáció, Newton klasszikus elmélete, a φ gravitációs potenciállal, mint skaláris változóval gyengén nemlokális termodinamikai kontinuumnak tekinthető [17]. Ehhez a szokásos belső energiából még le kell vonnunk a gravitációs térenergiát, fajlagos mennyiségekre konkrétan a következő módon:

$$u = Ts - pv + \mu = e - \varphi - \frac{\nabla\varphi\cdot\nabla\varphi}{8\pi G}v. \tag{3}$$

Itt a gradiensnégyzetes tag a newtoni gravitációs tér klasszikus energiája [18]. Ebből a következő Gibbs relációt kapjuk

$$\mathrm{d}u = T\mathrm{d}s - p\mathrm{d}v = \mathrm{d}e - \mathrm{d}\varphi - \left(\frac{\nabla\varphi\cdot\nabla\varphi}{8\pi G}\right)\mathrm{d}v - \left(\frac{\nabla\varphi}{4\pi G}\right)v\mathrm{d}\nabla\varphi. \tag{4}$$

Ennek felhasználásával nemegyensúlyi termodinamikai módszerekkel levezethetőek a disszipatív, termikus és mechanikai öngravitáló folyadékok és gázok fejlődési egyenletei, amelyeknek gravitációs része disszipációmentes esetben a Poisson-egyenletre egyszerűsödik. Így a hosszútávú kölcsönhatás termodinamikai leírása matematikai értelemben lokális, térintegrálokat nem igénylő elméletre vezet. A gravitáció alapvetően a nyomást módosítja és disszipációmentes esetben lehet térfogati erősűrűség.

6. *Green-Kubo.* Az általam ismert fluktuáció-disszipáció tételek a klasszikus irreverzibilis termodinamikán alapulnak, nem veszik figyelembe sem a memóriahatásokat, sem a gyenge nemlokalitást.

A nemegyensúlyi termodinamika elméletei közül a GENERIC formalizmus viszont eloszlásfüggvényekre is ki van dolgozva és a fluktuáció-disszipáció tételek azonnal részét képezik a rendszernek. Fülöp Tamás és Szücs Mátyás kollégáknak most sikerült a hővezetési belső változós elméletet GENERIC formában is megfogalmazni, ezzel a kutatásainkat akár ilyen irányba is kiterjeszthetjük.

Budapest, 2019. október 10.

Ván Péter
....
Ván Péter

Hivatkozások

[1] R. D. Mindlin. Micro-structure in linear elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 16:51–78, 1964.

[2] A.C. Eringen and E.S. Suhubi. Nonlinear theory of simple micro-elastic solids I. *International Journal of Engineering Science*, 2:189–203, 1964.

[3] C. Eringen. *Microcontinuum Field Theories I. Foundations and Solids.* Springer-Verlag, Berlin-etc.., 3th edition, 1999.

[4] G.A. Maugin. The principle of virtual power: from eliminating metaphysical forces to providing an efficient modelling tool. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 25:127–146, 2013.

[5] S. Forest. Some links between Cosserat, strain gradient crystal plasticity and the statistical theory of dislocations. *Philosophical Magazine*, 88(30-32):3549–3563, 2008.

[6] O. Aslan and S. Forest. The micromorphic versus phase field approach to gradient plasticity and damage with application to cracking in metal single crystals. In René de Borst and Ekkehard Ramm, editors, *Multiscale Methods in Computational Mechanics*, Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics, pages 135–154. Springer, 2011.

[7] H. Askes and E. C. Aifantis. Gradient elasticity in statics and dynamics: an overview of formulations, length scale identification procedures, finite element implementations and new results. *International Journal of Solids and Structures*, 48(13):1962–1990, 2011.

[8] Cs. Asszonyi, T. Fülöp, and P. Ván. Distinguished rheological models for solids in the framework of a thermodynamical internal variable theory. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 27:971–986, 2015. arXiv:1407.0882.

[9] A. Berezovski, J. Engelbrecht, and G. A. Maugin. Generalized thermomechanics with dual internal variables. *Archive of Applied Mechanics*, 81(2):229–240, 2011.

[10] P. Ván, C. Papenfuss, and A. Berezovski. Thermodynamic approach to generalized continua. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 25(3):403–420, 2014. Erratum: 421-422, arXiv:1304.4977.

[11] G. T. Houlsby and A. M. Puzrin. *Principles of Hyperplasticity (An approach to plasticity theory based on thermodynamic principles).* Springer, London, 2006.

[12] P. Ván. A képlékenység termodinamikája. In T. Fülöp, editor, *Idő- és térderiváltak anyagtörvényekben, Mérnökgeológia-Kőzetmechanika Kiskönyvtár 10.*, 15–50. Műegyetemi Kiadó, Budapest, 2010.

[13] N. Mitsui and P. Ván. Thermodynamic aspects of rock friction. *Acta Geodaetica et Geophysica*, 49:135–146, 2014. arXiv:1312.4930 [physics.geo-ph].

[14] P. Ván, N. Mitsui, and T. Hatano. Non-equilibrium thermodynamical framework for rate- and state-dependent friction. *Periodica Polytechnica Civil Engineering*, 59(4):583–589, 2015. arXiv:1501.04608.

[15] Y. Chen and J. D. Lee. Determining material constants in micromorphic theory through phonon dispersion relations. *International Journal of Engineering Science*, 41(8):871–886, 2003.

[16] A. Berezovski and P. Ván. *Internal Variables in Thermoelasticity*. Springer, 2017.

[17] P. Ván and S. Abe. Non-equilibrium thermodynamics and Newtonian gravitation. 2019. arXiv:1905.10631.

[18] J. Frauendiener and L. B. Szabados. A note on the post-newtonian limit of quasi-local energy expressions. *Classical and Quantum Gravity*, 28(23):235009, 2011.