

Válasz dr. Majorosné dr. Lubláy Éva Eszter
"Két időskálás hővezetési modellek elemzése és alkalmazása heterogén
anyagokra"
című MTA doktori dolgozat bírálatára

Szeretném megköszönni dr. Majorosné dr. Lubláy Éva Eszternek az aprólékos és figyelmes bírálatát, valamint a hosszútávra szóló kutatómódszertani javaslatait. Külön köszönöm a pozitív véleményét és a nyilvános védésre vonatkozó támogató nyilatkozatát. Az alábbiakban pontról pontra válaszolok minden, a bírálatban felmerül észrevételre és kérdésre azok felmerülésének sorrendjében, ezek a válaszok lefedik a kiemelt kritikai észrevételeket is.

1. Észrevétel: **"Az irreverzibilis termodinamika alapjainak ismertetése megfelelő, bár a fogalmi keret mélyebb kibontása (pl. belső változók szerepe) tovább erősítené a fejezetet."**

Válasz: A bírálóval egyetértek abban, hogy a belső változók tárgyalása tovább mélyítette volna az elméleti háttérrel, mivel a mérnöki gyakorlatban messze nem egy széles körben használt modellezési eszköz. A dolgozatban tárgyalt hővezetési modellek közül csak a Jeffreys-egyenletet érinti, így a belső változók használata nem egy általános követelménye a Fourier-egyenleten túli modellek bevezetésének.

A téma részletes tárgyaláshoz a

Verhás József: Termodinamika és reológia, Műszaki Könyvkiadó, 1985
könyvet ajánlom.

Röviden ismertetve, egy belső változó bevezetésével feltesszük, hogy az állapotteret kiegészítjük egy olyan mennyiséggel, amelynek a pontos fizikai háttérét nem ismerjük, de fontos annak tenzori rendje. Lehet skalár, vektor, másod-, vagy akár magasabb rendű tenzor is, a konkrét elmélettől függően. Mivel ebben az esetben a célunk az, hogy a hőáramsűrűsége, mint vektormennyiségre vonatkozó kifejezést általánosítsuk, ezért célszerű egy vektori belső változó használata. Izotrop anyagok esetén az azonos rendű tenzori mennyiségek csatolódását kihasználva végül egy csatolt egyenletrendszer kapunk a entrópiaprodukciónak vonatkozó egyenlőtlenség megoldásaként. Ez az egyenletrendszer információt ad a belső változó jelenlétéről, de teljes mértékig nem rögzíti azt. Emiatt érvelek amellett, hogy a belső változók kiküszöbölése célszerű, mivel azokra így sem kezdeti, sem peremfeltételt előírni nem célszerű.

2. Észrevétel: **"A képletek származtatása világos, azonban a 3.13–3.17 képletek esetében a levezetés tömörsége miatt nehezen követhető a fizikai háttér. A szerző helyesen mutatja be, hogy a nemlokális tagok miként módosítják a hőáram viselkedését, de ezek fizikai értelmezése – például a belső változók termodinamikai szerepe – további magyarázatot igényelne."**

Válasz: A bírálóval egyetérték abban, hogy a belső változó kiküszöbölése során több lépést is kihagytam, így alább egy részletesebb magyarázatot kívánok adni a (3.13)–(3.17) egyenletek hátterére.

A (3.13) és (3.14) egyenletek az áttekinthetőség kedvéért megismétlik a (2.29) és (2.30) egyenleteket, ezek a Jeffreys-egyenletre vonatkozó konstitutív kifejezések. A belső változó fizikai értelmezésére a (3.13) egyenletet használhatjuk,

$$\mathbf{q} = l_{11} \nabla \frac{1}{T} + l_{12}(-k\xi), \quad (1)$$

ahol a $\mathbf{q}$ jelöli a hőáramsűrűséget, ∇ a gradienst, a ξ a belső változót, valamint az l_{11} , l_{12} és k transzportegyütthatókat konstansnak tekintem. Átrendezés után a

$$l_{12}(-k\xi) = \mathbf{q} - l_{11} \nabla \frac{1}{T} \quad (2)$$

kifejezést kapjuk, ami azt jelenti, hogy a hőáramsűrűség nem közvetlenül arányos a hőmérséklet gradiensevel, hanem a belső változó egy további járulékot eredményez. Ennek a járuléknak a pontos jelentése azonban nem ismert, és a modell használatához nem is kell ismerni, ha a belső változót kiküszöböljük az egyenletrendszerből. A (2) egyenletet behelyettesítve a

$$\partial_t \xi = l_{21} \nabla \frac{1}{T} + l_{22}(-k\xi) \quad (3)$$

összefüggésbe, valamint az egyes műveleteket elvégezve kapjuk a

$$\partial_t \left[-\frac{1}{l_{12}k} \left(\mathbf{q} - l_{11} \nabla \frac{1}{T} \right) \right] = l_{21} \nabla \frac{1}{T} - l_{22}k \left[-\frac{1}{l_{12}k} \left(\mathbf{q} - l_{11} \nabla \frac{1}{T} \right) \right], \quad (4)$$

$$-\frac{1}{l_{12}k} \partial_t \mathbf{q} + \frac{l_{11}}{l_{12}k} \partial_t \nabla \frac{1}{T} = l_{21} \nabla \frac{1}{T} + \frac{l_{22}}{l_{12}} \left(\mathbf{q} - l_{11} \nabla \frac{1}{T} \right) \quad (5)$$

egyenleteket, ahol felhasználtuk, hogy az összes együttható konstans. Célszerű a $\mathbf{q}$ együtthatójával osztani, valamint a $\nabla(1/T)$ tagokat csoportosítani, amiből megkapjuk a dolgozatban szereplő (3.16),

$$\tau \partial_t \mathbf{q} + \mathbf{q} = \tilde{\lambda}_1 \nabla \frac{1}{T} + \tilde{\lambda}_2 \partial_t \nabla \frac{1}{T}, \quad (6)$$

valamint a (3.17) összefüggéseket,

$$\tau = \frac{1}{l_{22}k}, \quad \tilde{\lambda}_1 = \frac{\det l_{ij}}{l_{22}}, \quad \tilde{\lambda}_2 = l_{11}\tau. \quad (7)$$

3. Észrevétel: "Ugyanakkor hiányzik a különböző diszkretizálási technikák (pl. végesdifferenciák és végeselem) összehasonlítása, ami segítené a numerikus megközelítés általánosíthatóságának megítélését."

Észrevétel: "A nemlineáris egyenletekre vonatkozó stabilitási kritériumok és a numerikus diffúzió kezelése jól dokumentált, de a különböző algoritmusok

összevetése hiányzik."

Válasz: A bírálónak igaza van abban, hogy nem végeztem széleskörű numerikus összehasonlítást a különböző diszkretizálási technikák között.

A COMSOL kereskedelmi végelelem módszert használó szoftver önálló programozási környezetet kínál tetszőleges differenciálegyenletek megoldására. Ennek tesztelésekor azt találtam, hogy a kiterjesztett hővezetési egyenleteket azok térben egydimenziós formájában sem tudja megbízhatóan kezelni, függetlenül a hálóelemek típusától, vagy az időléptetési algoritmustól. A dolgozat 4.1. alfejezete (4.2. ábra) mutat példát arra, hogy a GK-egyenlet esetén milyen téves megoldásra vezet. A 4.3. ábra tanúsága alapján pedig bizonyos hullámterjedési feladatokat bár kezel (például az MCV-egyenlet esetén), de azokat messze nem hatékonyan oldja meg, és jelentős lehet a numerikus hibák általi torzítás.

Emiatt mindenképpen egy olyan módszertan kidolgozására volt szükség, ami a megbízhatóságot helyezi az előtérbe az általánossággal szemben. Tehát, a dolgozatban bemutatott végesdifferenciákön alapuló diszkretizáció bár csak igen korlátozottan használható hatékonyan, de a kapott megoldások megbízhatóak, illetve ellenőrizhetőek. Ehhez a numerikus stabilitási feltételek ismerete szintén lényeges, főleg nemlineáris esetben.

A bírálónak teljes mértékig igaza van abban, hogy a nemlineáris feladatok stabilitásvizsgálatának általánosíthatóságát nem vizsgáltam más algoritmusok esetére. A Fourier-egyenletre vonatkozóan egy képfeldolgozási analógiát használtam ki a stabilitásvizsgálathoz és ezt általánosítottam Fourier-n túli modellekre. Ez a módszer végesdifferenciás megközelítésekben, anyagi nemlinearitások esetén egyértelműen használható. El tudom képzelni, hogy ez végelelem alapú módszerekre is átvihető, de ennek biztos vannak olyan – általam eddig nem vizsgált – módszertani megkötései, amelyek miatt ez az átszármaztatás nem triviális.

4. Észrevétel: **"Ugyanakkor a kísérleti rész kevésbé részletes: nem derül ki pontosan, milyen mérési elrendezést alkalmaztak, milyen anyagokat vizsgáltak, és hogyan kezelték a mérési hibákat. A mérési körülmények, kalibrálási eljárások és hibahatárok ismertetése elengedhetetlen lenne a tudományos értékelhetőséghez."**

Válasz: A bírálónak igaza van abban, hogy a kísérleti módszertan részletesebb, összefoglaló jellegű leírása célszerű lett volna. Az elrendezés sematikus vázlata a 4.1. ábrán látható, a megoldási módszerekről szóló fejezetben, hogy a kísérlet elemzéséhez is felhasznált analitikus és numerikus megoldásokra vonatkozó egyenleteket jobban érthetővé tegyem. Ez valóban megnehezíti az 5. fejezet követhetőségét.

A kísérletekre vonatkozó leírásokat, statisztikai és hibaelemzéseket részletesen Fehér Anna (volt) Ph.D. hallgatóm dolgozata tartalmazza. Az én eredményem a kísérletekből nyert adatok fizikai interpretációja, mint például a statikus és dinamikus időskálák megfigyelése, valamint a közöttük lévő relációk értelmezése.

Kísérleteket nagyságrendileg 50 különböző anyagtípuson végeztünk, ezekből egy válogatást tettem be a dolgozatomba. A bemutatott anyagtípusokat aszerint választottam ki, hogy milyen konklúziókat hordoznak. A szénhabok esetén érdekes, hogy a Fourier-tól eltérő viselkedés porozitásfüggő, és egy fontos példát mutat arra, hogy bizonyos anyagtípusokat azok reprezentatív mérete alatt kell felhasználni. A fémorganikus térhálók esetén mikrométer, a

kompozit fémhabok esetén milliméter nagyságrendű heterogenitásokat kell figyelembe venni, ami a méretskálákra vonatkoztatva érdekes. A biológiaiilag lebontható NYÁK-ok pedig olyan értelemben érdekesek, hogy habár meglehetősen összetett heterogén anyagszerkezettel rendelkeznek, még sincs szükség a Fourier-n túli modellek alkalmazására. Ennek az az oka, hogy az egyes komponensek egymáshoz közeli hővezetési tulajdonságokkal rendelkeznek, és az összetett szerkezet önmagában nem indokolja a bonyolultabb hővezetési modellek használatát.

A kísérletek elemzésénél feltettük, hogy szobahőmérsékleten, kicsi, 3-5 K hőmérséklet-különbség esetén a teljes mérőrendszer lineárisan viselkedik. Ekkor nincs szükség kalibrálásra, az abszolút hőmérséklet mérése nem adna plusz információt, mivel nem ismert az elnyelt energia mennyisége. Heterogén anyagok esetén ennek meghatározását nem is látom praktikusnak, mivel rengeteg további hibalehetőséggel jár. Így a méréseket hőmérsékletben dimenziótlan módon, a kezdeti és egy elméleti adiabatikus végállapot közé skálázzuk (dimenziótlan skálán ez 0 és 1 közötti értékeket jelent).

Az adott paraméterek meghatározhatóságáról érzékenységvizsgálat, valamint érzékenységi függvények elemzése árul el több információt. Az illesztett hőmérséklet idősort összevetve a mért idősorral az eltérések láthatóvá válnak, az így származtatott hőmérséklet-különbség idősora statisztikailag jellemezhető, mi annak varianciáját használtuk, súlyozva az adott illesztendő paraméterhez tartozó érzékenységgel. Továbbá, a különbséget összevetve a redukált érzékenységi függvények amplitúdójával megállapítható, hogy a kapott hibák nagyságrendje hogyan aránylik az illesztendő paraméterekből származó érzékenység nagyságrendjéhez. Ha az érzékenység kisebb, mint az eltérés, akkor a paraméter nem illeszthető megfelelően. Ilyen eset egyszer sem állt fenn.

A paraméterek meghatározása iteratív módon történt. Az iteráció alapját az úgynevezett lokális érzékenységi függvények adják, minden paraméterhez tartozik egy ilyen függvény:

$$S_{p_i,t} = \left. \frac{\partial T}{\partial p_i} \right|_{p_i}, \quad T = T(p_i, t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (8)$$

ahol S érzékenységi függvény az i -edik paraméterhez tartozik, és az idő függvényében adja meg a hőmérséklet-eloszlásra gyakorolt hatását egy adott térpontban, célszerűen a hőmérsékletmérési pontot kiválasztva. Ezt a függvényt elvben analitikusan is meg lehet határozni, de az még akár a Fourier-egyenlet esetén is nehezen kezelhető formulákra vezet, így ezt célszerű numerikusan közelíteni. Ezekből az érzékenységi függvényekből össze lehet állítani az úgynevezett érzékenységi mátrixot ($\mathbf{S}$), azaz minden oszlopában egy adott paraméterhez tartozó érzékenységi függvény értékei foglalnak helyet (ahol minden sor egy adott időpillanathoz tartozik). Ha az összes illesztendő paramétert egy P vektorba rendezzük, akkor az iteráció a

$$P_{k+1} = P_k + (\mathbf{S}_k^T \mathbf{S}_k)^{-1} \mathbf{S}_k^T (T_{\text{mért}} - T(P_k)), \quad (9)$$

alakot ölti, ahol a T a transzponálást, a $^{-1}$ pedig a mátrix inverzét jelöli. A módszer előnye, hogy ha a modellben bármely két illesztendő paraméter lineárisan összefüggő, akkor az érzékenységi függvényei is azok lesznek, így az érzékenységi mátrix szinguláris volta ezt jelezné, és az iterációt nem lehetne végrehajtani.

Az illesztés jóságát a $T_{\text{diff}} = T_{\text{mért}} - T(P_k)$ differenciával, valamint ennek tulajdonságaival jellemezhetjük, például ennek σ^2 varianciájával. Érdekes a

$$\mathbf{C} = \sigma^2 (\hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{S}})^{-1}, \quad \hat{\mathbf{S}} = [\hat{S}_{p_1} \hat{S}_{p_2} \dots \hat{S}_{p_N}]. \quad (10)$$

mátrixot képezni, ahol a σ^2 a mérési adatoktól való eltérést jellemzi, az $\hat{S}$ pedig a redukált érzékenységi függvényeket jelenti, ami a fenti érzékenységi függvénytől abban különbözik, hogy a derivált értékét szorozzuk a paraméter referenciaként vett értékével

$$\hat{S}_{p_i,t} = p_i \frac{\partial T}{\partial p_i} \bigg|_{p_i}, \quad T = T(p_i, t), \quad i = 1, \dots, N. \quad (11)$$

A **C** főátlóinak gyöke megadja az egyes paraméterekhez tartozó hibát, súlyozva a paraméterhez tartozó érzékenységi függvénnyel. Így, ahol a modellben lévő paraméter igen érzékeny, ott a hibák is nagyobbak lesznek. Fehér Anna dolgozata a teljes módszertant részletesen tárgyalja.

Alább a bírálatban kiemelt kérdésekre kívánok válaszolni.

1. Kérdés: **"Milyen gyakorlati alkalmazásokban látja a Guyer–Krumhansl és Jeffreys-féle modellek közvetlen hasznosítását?"**

Válasz: Véleményem szerint az egyik legfontosabb hasznosíthatóság a heterogén anyagok jellemzésében a statikus és dinamikus időskálák szétválasztása és a rájuk vonatkozó hőfokvezetési tényezők bevezetése. Ezek a tényezők információt nyújtanak arról, hogy egy adott karakterisztikus méretű test esetén várhatóan melyik időskálának a figyelembevételére van szükség, illetve szükséges-e használni akár melyik Fourier-n túli hővezetési modellt. Emiatt a kísérletek kiértékeléséhez általánosságban véve megkerülhetetlennek tűnnek ezek a modellek. Ha az adott feladat megkívánja, akkor ezek a kiterjesztett modellek effektíven írják le a heterogén anyagok viselkedését, amely sokkal kevesebb erőforrást igényel, mintha bármely heterogenitást annak részleteiben kívánnánk lemodellezni.

2. Kérdés: **"Tervez-e további kísérleti validációt, különösen mikrostruktúrák esetén?"**

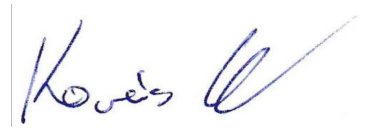
Válasz: Több együttműködést folytatunk, többek között a NETZSCH GmbH-val és Prof. Orbulov Imrével mikroporózus fémhabok vizsgálatában, valamint a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karról Prof. László Krisztina csoportjával fémorganikus térhálókmal kapcsolatban, amelyek esetén a mikroszerkezeti struktúrák jelentősen befolyásolják a makroszkopikusan megfigyelhető hővezetési tulajdonságokat.

Ezen túlmenően az eddigiekben megfigyelt hővezetési jelenségek méretfüggésére is figyelmet kívánunk szentelni, amelyhez jelenleg folyamatban van egy új típusú mérőberendezés fejlesztése.

3. Kérdés: "A képletek dimenzióanalízise során milyen feltételezéseket tett az anyagparaméterek állandóságára?"

Válasz: A kísérletek elemzése során kizárólag állandó anyagi paramétereket vettem figyelembe, mivel a kísérleti elrendezés ezt lehetővé teszi, és csak 3-5 K közötti hőmérséklet-emelkedés jön létre. Egyedül a dolgozat 3. fejezetében, az anyagi nemlinearitások tárgyalásánál vettem figyelembe hőmérséklettől függő hővezetési tényezőt, és ennek a következményeit vizsgáltam. Mivel a Fourier-egyenleten túli együtthatók hőmérséklet-függésére nincsenek konkrét kísérleti adatok heterogén anyagok jellemzésére vonatkozóan, így azokat csak elvi lehetőségként fogalmaztam meg.

Budapest, 2026. január 16.



Dr. Kovács Róbert Sándor

egyetemi docens
BME, Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék