kovacsr_325_25

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
ENERGETIKAI GÉPEK ÉS RENDSZEREK TANSZÉK

HUN-REN WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT
RÉSZECSKE- ÉS MAGFIZIKAI INTÉZET
ELMÉLETI FIZIKA OSZTÁLY

Két időskálás hővezetési modellek elemzése és alkalmazása heterogén anyagokra

MTA doktori dolgozat

Dr. Kovács Róbert Sándor
egyetemi docens

Budapest, 2025

Tartalomjegyzék

Köszönetnyilvánítás

Az utóbbi évek során igen sok olyan kollégával találkoztam és dolgoztam együtt, akik valamilyen módon hozzájárultak a jelenlegi szemléletemhez, nincs is lehetőségem mindenkit felsorolni.

Szeretném megköszönni Gróf Gyulának és Imre Attilának, volt és jelenkori tanszékvezetőknek, hogy részt vállaltak a kutatócsoportunk létrehozásában és támogatásában. Szintén köszönet illeti a HUN-REN Wigner FK főigazgatóját, Lévai Pétert, amiért a Ph.D. tanulmányaim kezdetétől fogva támogatta intézetbeli tevékenységemet, jelentősen szélesítve ezzel a látókörömet.

Kutatásaim szempontjából kiemelkedő köszönet illeti Ván Pétert, Szücs Mátyást, Fülöp Tamást és Fehér Annát. A velük való, éveken át tartó közös munka nemcsak új ötleteket adott, hanem a beszélgetések és az építő jellegű viták a tudományos (ön)kritikus gondolkodásomat is fejlesztették, és mindegyiküktől sok mindent tanultam.

Szintén köszönet illeti Kovács Lászlót, Orbulov Imrét, Feczkó Tivadart, Fodor Tamást, Rieth Ágnest, Maróti Jánost, Géczy Attilát, László Krisztinát, Gál Mártont, Sudár Ákost és Barnaföldi Gergelyt, amiért a velük való együttműködések során számtalan próbatestet készítettek és a hővezetési kutatásaink gyakorlati, ipari felhasználását is jelentősen elősegítő problémákat tudtunk közösen megoldani. Köszönöm Tóth Balázsnak a végeselemes módszer kidolgozásában nyújtott segítségét.

Hatalmas köszönet illeti Tóth Brigittát és Fehér Annát, akik a dolgozat részletes átolvasásával számtalan tipográfiai és nyelvi korrekciót javasoltak. Köszönöm Imre Attilának és Bereczky Ákosnak a dolgozat elkészítéséhez kapcsolódó tanácsaikat.

Szeretném megköszönni Czigány Tibornak és Orbulov Imrének az utóbbi évek során nyújtott támogatásukat, amit a pályázati tevékenységemhez és a dolgozat megírásához nyújtottak.

Köszönöm Kiss Lászlónak és Gróf Gyulának a hőközlés témakörének rendkívül magas szintű átadását és szakmai támogatásukat.

Köszönet illeti Patrizia Rogolino, Martina Nunziata, Vincenzo Tibullo, Srboljub Simic és Damir Madjarevic külföldi kollégáimat, amiért a vendégkutatóként náluk töltött hónapok alatt a kutatási feladataimra tudtam fókuszálni, és ez idő alatt tőlük is sokat tanulhattam.

Nem utolsó sorban pedig szeretnék köszönetet mondani édesanyám és édesapám számára is, amiért a tanulmányaimat bármilyen peremfeltételek mellett támogatták.

A kutatásaimat az NKFIH OTKA 116197, 124366, 130378, 134277 és az NKKP STARTING 149487 pályázatai támogatták.

"A gyorsaság kevésbé fontos a valódi szellemi eredmény eléréséhez, mint a mély, alapos és alkotó gondolkodás képessége."

Kármán Tódor

Előszó

A termodinamika mindig is egy meglehetősen egyedi területet képviselt mind a mérnöki, mind a fizikai tudományokon belül. Mérnöki szemmel nézve sokszor a vegyi folyamatok leírása vagy az energetikai körfolyamatok modellezése jut eszünkbe róla, de a háttérben az irreverzibilis termodinamika, mint a folytonos közegekben lejátszódó disszipatív folyamatok leírása húzódik meg. Ennek segítségével a mérnöki tudományokban használt alapvető modellek következetesen származtathatók, a folyadékok Newton-féle viszkozitási törvényétől kezdve a viszkoelasztikus modelleken át a Fourier-törvényig, valamint számos további kapcsolt feladat is megoldható a termodinamika segítségével. Ilyen például a termodiffúzió, amely már a legegyszerűbb szárítási folyamat során is nagy jelentőséggel bír – gondoljunk csak a papírgyártásra és a húsipari termékek érlelésére [1, 2]. Szintén a termodinamikai elvek felhasználásával tudunk folyamatokról, valamint azok stabilitásáról gondolkodni [3], ezeket a folyamatokat állapotjelzőkkel kell ellátni, és döntést kell hozni ezek térbeli és időbeli függéséről. A legegyszerűbb folyamatszemléletű leírásmód a koncentrált paraméterű modellezés, ekkor közönséges differenciálegyenletekből épülő modelleket használunk. Ezt számtalan területen alkalmazzuk, a végeselemes modellektől kezdve a kísérletek kiértékeléséig. Mérnöki szempontból a termodinamika egy igen hasznos és sokrétű eszköztár. Fizikusi szemmel a termodinamikai összefüggések sokszor a statisztikus fizikának egy alterületeként jelennek meg, amelyet egyfajta kényszerként használ a kinetikus elmélet (például a h-tételen keresztül), valamint minden erre épülő megközelítés (például a racionális kiterjesztett termodinamika), de a folyamatok stabilitásának figyelembevétele – a második főtétel kihasználásával – ott is elengedhetetlen.

A dolgozatom bizonyos szempontból átmenetet képez a mérnöki és a fizikusi területek között, de sokkal inkább a mérnöki szemléletet tükrözi és azt tartja előtérben. Mérnöki szemmel végig az alkalmazásokat emelem ki, ehhez jó néhány példát be is mutatok majd. Ugyanakkor nem lehet figyelmen kívül hagyni a kinetikus elméleti kapcsolatokat sem, főleg az egyes modellek értelmezésében és a megfelelő leíró egyenletek kiválasztása során. A statisztikus fizikában a transzportjelenségek leírásához használt modellekben mindig meg kell határozni a terjedési mechanizmust, és annak leírását is meg kell adni, amiből a transzportegyütthatók jelentős része mérés nélkül is meghatározható, ami több gyakorlati helyzetben kétségtelenül hasznos eszköz, főképp olyan esetekben, amikor részletes mérések szóba sem jöhetnek. Gondoljunk csak az űreszközök légkörbe való belépésére, ahol az ionizált gázok szuperszonikus áramlását erős elektromágneses térben kellene vizsgálni. Ilyen esetben hogyan írhatnánk fel a kapcsolt modellt, és hogyan határozhatnánk meg például a kérdéses gáz viszkozitását? Bár ez igen összetett példa, mégsem szabad erre szélsőségként tekinteni. Az űrtechnológia, az orvostechnológia, a különféle gyártástechnológiák, valamint a szuperérzékeny mérések és műszerek működtetése, fejlesztése mind olyan területek, amelyek manapság a mérnöki modellezés fő kihívásait hordozzák, de a hagyományos, klasszikus eszközökkel nem megoldhatók. Ilyen tekintetben kiváló példák az új generációs detektorok a CERN-ben [4], vagy a gravitációs hullámdetektorok, főképp azok európai képviselője, az Einstein Teleszkóp [5]. Az efféle,

illetve az ehhez hasonló műszerek fejlesztése és gyártása jelentős részben mérnöki feladat, és a meglévő pontossági és érzékenységi mutatók nagyságrendekkel való megjavítása modern modellezési eszköztár nélkül nem lehetséges. Az irreverzibilis termodinamika része ennek az eszköztárnak, és a szemlélet kiterjesztése – hosszútávon – elengedhetetlen. A dolgozatom ezt a hosszútávú gondolkodást alapozza meg a heterogén anyagok hővezetési tulajdonságainak leírására fókuszálva.

A kinetikus elméleti megközelítés a mérnöki tudományokban ritkán alkalmazott, de bizonyos esetekben határozottan konstruktív és iránymutató eszköz. Egy kontinuumalapú megközelítésben azonban sokkal több a modellezési szabadságfok, így az egyes nemlinearitások lényegesen könnyebben figyelembe vehetők. Egy modell akkor válik igazán erőssé, ha lehetőségünk van más megközelítésű modellek tanulságait is beépíteni, amennyiben azt az adott feladat megköveteli vagy előnyben részesíti és ennek a feltételnek a kontinuum-megközelítésű modellek eleget is tesznek. Korábbi kutatásaim során ehhez a kinetikus elmélettel való kompatibilitást is figyelembe kellett vennem.

Habár a dolgozatom főként a hővezetési jelenségek leírására helyezi a hangsúlyt, bizonyos esetekben nem tekinthetek el a kapcsolt áramlástani-hővezetési modellek tárgyalásától sem, különösen anyagi nemlinearitások esetén. A termodinamikai hátteret végig a kontinuumközegek szempontjából vizsgálom, mérnöki szemlélettel. Bár a kinetikus elméleti vonatkozásokat csak érintőlegesen tárgyalom, ahol szükséges, a bemutatott eredmények eléréséhez és kutatásaimhoz végig elengedhetetlen volt az irodalomban fellelhető egyéb termodinamikai megközelítések ismerete. Ezt az ismeretanyagot foglalja össze a [6] publikációm, így a dolgozatomban csak a legszükségesebb mértékig tárgyalom a vonatkozó szakirodalmi hátteret, szem előtt tartva, hogy a tisztelt Olvasó nem feltétlenül jártas a Fourier-egyenleten túli jelenségek és modellek használatában, értelmezésében, különösen mivel ez még kevesek által művelt mérnöki terület.

Végül fontosnak tartom kiemelni, hogy a dolgozatom eszköztárat nyújt a Fourier-egyenleten túli kontinuum-megközelítésű[1] hővezetési modellek kezeléséhez. A kutatási eredményeim főként a Guyer–Krumhansl-, valamint a Jeffreys-egyenletekre vonatkoznak gyakorlati hasznosságuk miatt, de több megállapításom további termodinamikailag kompatibilis modellekre is érvényes marad. A bemutatott eszköztár, és így a dolgozatom célja, hogy a mérnöki közösség számára olyan útmutatót adjon, amely egyértelműsíti, mik azok a szempontok és eszközök, amelyeket a Fourier-egyenlethez képest ugyanúgy, vagy éppen ellenkezőleg, teljesen másképp kell értelmezni és felhasználni. Az utóbbi tulajdonságokból jelentősen több van. Összefoglalva, a dolgozatom

- egységes termodinamikai keretben tárgyalja a Fourier- és a Fourier-egyenleten túli hővezetési modelleket;
- az egységes termodinamikai keretrendszert kihasználva vizsgálja az anyagi nemlinearitások figyelembevételét és azok következményeit;
- röviden bemutatja a modellek analitikus és numerikus megoldási módszereit;

[1] Az egyértelműség kedvéért a "kontinuum" jelzőt, ahol csak indokoltnak érzem, használni fogom.

- tárgyalja a Fourier-egyenleten túli modellek mérnöki szempontú gyakorlati felhasználási lehetőségeit.

Mindez analóg azokkal a törekvésekkel, amelyek a Fourier-féle hővezetési egyenletet a mérnöki közösség számára széles körben használhatóvá tették, és amelyekből kifolyólag egy megbízható, standard modellezési eljárássá válhatott. Természetesen ez a cél ezzel a munkával nem ér és nem is érhet véget, de meglátásom szerint a dolgozatom ezt hosszútávon alapozza meg.

Kiegészítő megjegyzések

A dolgozatomban a Nemzetközi Súly- és Mértékügyi Hivatal SI mértékegységekkel kapcsolatos ajánlásait követem, azaz a dimenziótlan egységet nem írom ki "[-]" vagy "[1]" módon, valamint a mértékegységeket "p / Pa" módon fogom jelölni. A leggyakrabban használt jelöléseket és rövidítéseket az alábbi táblázat foglalja össze; minden más jelölést, ahol szükséges, külön elmagyarázok az egyértelműséget szem előtt tartva.

Legfontosabb jelölések és rövidítések jegyzéke

Latin betűk	
a	Hőfokvezetési tényező
c_v	Izochor fajhő
e	Fajlagos belső energia
q_V	Térfogati hőforrássűrűség
r	Helykoordináta henger koordináta-rendszerben
s	Fajlagos entrópia
t	Idő
x	Helykoordináta Descartes-féle koordináta-rendszerben
L	Jellemző méret
T	Hőmérséklet
V	Térfogat
$\mathbf{q}$, q	Hőáramsűrűség vektora vagy annak komponense
$\mathbf{a}$	Félkövér kisbetűk vektorokat jelölnek
$\mathbf{A}$	Félkövér nagybetűk tenzorokat (esetleg mátrixokat) jelölnek

Görög betűk	
α	Hőátadási tényező
κ	Hosszdimenziójú transzportparaméter
λ	Hővezetési tényező
ρ	Tömegsűrűség
τ	Idődimenziójú transzportparaméter, relaxációs idő

Matematikai jelölések	
∂_t, ∂_x, ∂_r	Idő- (t) vagy helykoordináta (x vagy r) szerinti parciális deriválás
∇	Nabla operátor
Δ	Laplace-operátor

Rövidítések	
GK	Guyer–Krumhansl-egyenlet
JE	Jeffreys-egyenlet
MCV	Maxwell–Cattaneo–Vernotte-egyenlet
NSF	Navier–Stokes–Fourier-egyenlet
LFA	Light/Laser Flash Analyzer – Hőimpulzuselvű mérési módszer
DMA	Dynamic Mechanical Analyzer – Dinamikus mechanikai vizsgálatok
PLA	Politejsav
RGO	Redukált grafén-oxid

Dimenziótlan mennyiségek	
Bi	Biot-szám
Fo	Fourier-szám
$\hat{\square}$	Minden más esetben a kalappal jelölt mennyiségek dimenziótlanok

Indexek	
i, j, m, n	Tenzorok vagy sorozatok komponenseit jelölik
0	Referencia értéket vagy egy sorozat nulladik tagját jelöli
1, 2	Anyagi komponenseket vagy eltérő időskálákat jelölnek

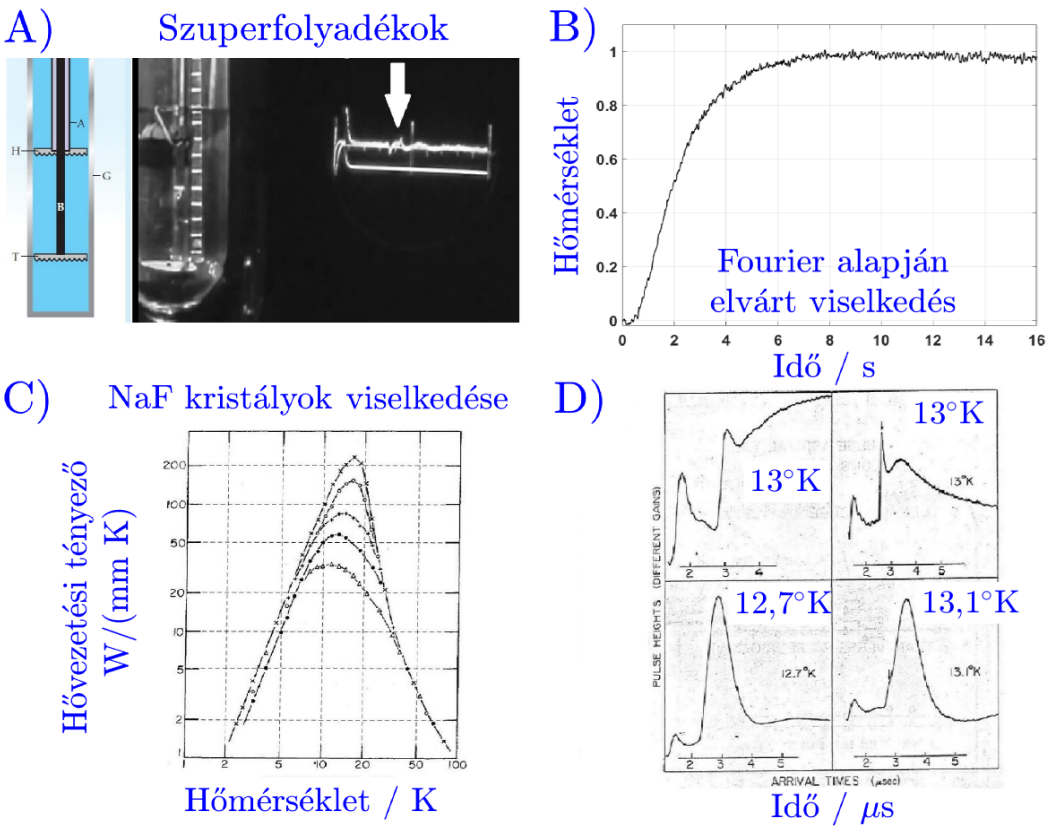
1. fejezet

Bevezetés

Az utóbbi évtizedekben igen sokféle termodinamikai megközelítés jelent meg, és mindegyik sajátos módszertannal rendelkezik a klasszikus transzportegyenletek kiterjesztésére. Habár a dolgozatban a hangsúlyt a hővezetési jelenségekre helyezem, tehát a Fourier-törvényt, valamint annak általánosításait tárgyalom, de elkerülhetetlen lesz, hogy helyenként kitekintést nyújtsak a kapcsolt jelenségek felé, mint például a termomechanika és a kapcsolt folyadék–hővezetési egyenletek. A szakirodalomban megtalálható számtalan megközelítés elterjedése meglehetősen nehézzé teszi a teljes szakterület áttekintését, így arra törekszem, hogy a bemutatott tudományos eredmények enélkül is érthetőek maradjanak. Az egyetlen megkötés az, hogy a hővezetési jelenségeket kontinuum-termodinamikai szemszögből kívánom tárgyalni.

Amikor egy transzportegyenlet általánosításáról beszélek, akkor azalatt az anyagot leíró, úgynevezett konstitúciós összefüggések kiterjesztését értem. Ezek a kiterjesztések a klasszikus összefüggésekhez képest, az adott modelltől függően, további idő- és térderiváltat tartalmazhatnak. A szakirodalom ezt a típusú kiterjesztést gyengén nemlokális általánosításnak nevezi [7–10]. Az erős nemlokális kiterjesztések integrálegyenletek formájában jelennek meg, azonban azok gyakran vitatható tulajdonságokkal rendelkeznek (például az anyagok végtelen memóriájának feltétele [6]), emiatt a dolgozatomban nem tárgyalom ezt a módszertant. Továbbá, a kapcsolt feladatok esetében gyakran előfordul a különböző tenzori rendű mennyiségek csatolása is. Erre jó példa a folyadékok esetén felmerülő nyomástenzor és a hőáramsűrűség vektorának csatolása, azaz a klasszikus esettől eltérően a csatolást nemcsak a mérlegegyenletek szintjén különféle forrástagokon keresztül [11], hanem a konstitutív egyenletek szintjén is be lehet vezetni, amihez a termodinamika nélkülözhetetlen segítséget nyújt [12–14]. A termodinamikai háttér egyaránt előnyös a második főtétellel való kompatibilitás biztosításában (így a megoldások stabilitásában), az arra épülő analitikus és numerikus megoldások megtalálásában, anyagi nemlinearitások kezelésében, és azoknak a mérnöki gyakorlatban való felhasználásában.

A hővezetési egyenletek fejlesztésére tett erőfeszítéseket elsőként Tisza és Landau elméleti irányú jóslatai [15–17], később pedig a nagy figyelmet kapott alacsony hőmérsékletű (< 20 K) kísérletek lendítették fel, elsősorban a XX. század második felében [18, 19]. Ezek a kísérletek bizonyítékot szolgáltattak arra, hogy a Fourier-törvény nem ad elégséges leírást, és bizonyosan szükség van annak kiterjesztésére.



1.1. ábra. A) Példa szuperfolyadékok hőimpulzuselvű kísérleti elrendezésére [20], jobb oldalon pedig a mért jelalak látható (részlet A. Leitner előadásából [21]). A folyadékba merített egyik lemezen termikusan gerjesztik, míg a másikon rögzítik a beérkező jeleket. A szenzor fel-le mozgatásával megfigyelhetőek lesznek a többször visszaverődési jelenségek is. B) Kizárólag a Fourier-egyenlet ismeretében egy hőimpulzuselvű mérésnél ezt a jelalakot várhatnánk el, azonban a korai, alacsony hőmérsékletű kísérletek ettől lényegesen eltérnek. C) Fontos szempont a test kiindulási hőmérséklete, mivel annak hővezetési tényezője akár nagyságrendeket is változhat [18,22]. D) A ballisztikus és a második hang hullámterjedési jelalakjai eltérő NaF makroszkopikus méretű kristályokra vonatkozóan, a megfigyeléseket μs időskálán kellett elvégezni, különben a gyors hullámjelenségek láthatatlanok maradnak [18].

Akkoriban kétféle, a Fourier-egyenleten túlmutató jelenséget figyeltek meg. Az első az úgynevezett második hang volt, ami egy csillapított, tisztán termikus hullámterjedési jelenség. A második hullámjelenséget a szakirodalom ballisztikus terjedésnek nevezi, és jellemzője, hogy a termikus jel mindig a közegre jellemző hangsebességgel terjed, így kontinuum szemléletben ez egy termomechanikai hullámjelenségként értelmezhető. A második hang mindig lassabban terjed, mint a ballisztikus jel, így a kísérletekben az észlelt jelterjedési sebesség egyértelmű módot ad arra, hogyan azonosíthatják be az egyes terjedési módokat. Az 1.1. ábra több példát is bemutat arra, hogy ugyanazzal a hőimpulzuskísérleti elrendezéssel hányféle eredményt kaphatunk, attól függően, hogy milyen anyagot, mekkora időskálán, milyen körülmények között vizsgálunk. Például egy NaF kristály hővezetési tényezője nagyságrendekkel eltérhet attól függően, hogy mekkora referencia-hőmérsékleten, vagy milyen tisztaságban vizsgáljuk [18,22]. Szintén lényeges, hogy a megfigyeléseinket mekkora időskálán vé-

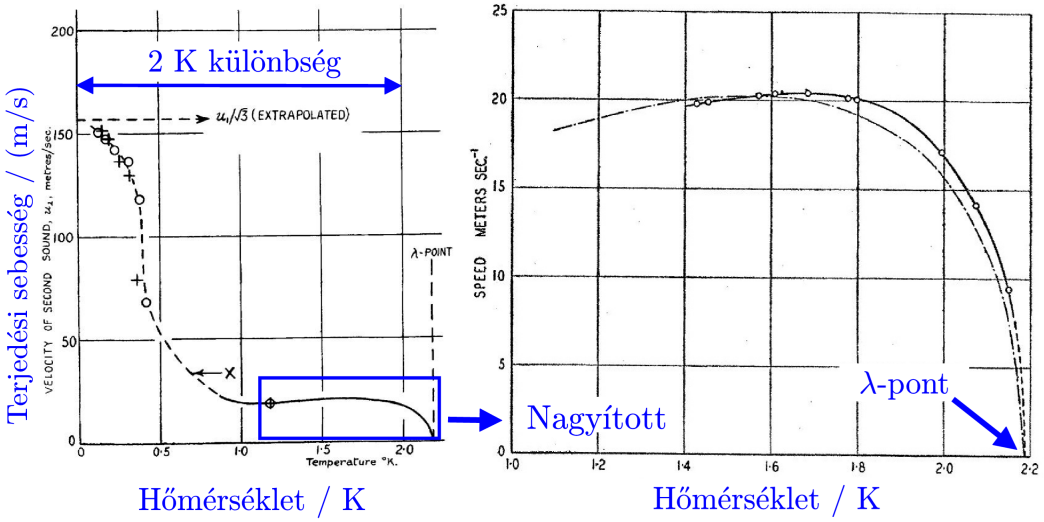
gezzük, például a felsorolt hullámjelenségeket csak μs időskálán tudták megfigyelni, igen alacsony hőmérsékleten.

Éppen a jelterjedési sebesség vizsgálata miatt preferálja a szakirodalom a hiperbolikus típusú egyenleteket, mivel ez a tulajdonság lineáris egyenletek esetén viszonylag könnyen vizsgálható[1], és egyben összhangban van a világképünkkel, miszerint minden jelnek véges a jelterjedési sebessége, szemben a parabolikus típusú egyenletekkel. A hiperbolikus típusú egyenletek további matematikai előnye a Cauchy-probléma korrekt kitűzöttségének biztosítása. Ennél a pontnál szeretném megjegyezni, hogy a mérnöki gyakorlat szempontjából viszont nincs probléma a parabolikus egyenletekkel sem, hiszen a Fourier- és a Navier–Stokes-egyenletek is parabolikusak, és mégis az általánosításaik szükségességét elsődlegesen nem ez indokolja, hanem a leírni kívánt jelenségek szélesebb köre. A valódi jelterjedési sebességeket és a hozzájuk tartozó időskálákat a vonatkozó anyagi jellemzők határozzák meg, a megoldások szempontjából nem jelent döntő különbséget a modellek ezen tulajdonsága. Továbbá, a gyengén nemlokális modellekben megfigyelhető egyfajta "hierarchia", amelyben a parabolikus és hiperbolikus modellek felváltva követik egymást, így minden kiterjesztett parabolikus egyenlethez létezik egy hiperbolikus kiterjesztés, és bármelyik típus a másik határeseteként képezhető [23, 24]. Emiatt ezzel a parabolikus-hiperbolikus kérdéskörrel a dolgozat nem kíván többet foglalkozni.

Sokáig a statisztikus fizikai leírások és a kétfolyadék modellek dominálták a megfigyelések értelmezését. Például a második hang esetében a kísérletekben egyszerre voltak jelen a hullámterjedési és a diffúziós hatások, vagyis a hővezetési folyamat két időskálán zajlott. Ebben a tekintetben a Fourier-törvény csak a diffúziós időskálát tartalmazza, így nem tekinthető megfelelő modellnek. Ezért olyan modelleket célszerű bevezetni, amelyekben a megfigyelt két időskála szintén megjelenik. Ezt két módon képzelték el. Az egyik az úgynevezett kétfolyadék modellekre vonatkozik, amelyekben az adott hővezető közeget szuperfolyadék és normál fázisok keverékeként tekintették [17, 25]. Ez abból a szempontból helytálló, hogy az első sikeres kísérleteket szuperfolyékony héliumon végezték el [26], azonban ezek a modellek igen bonyolultak, és nem általánosak.

A másik megközelítés a szintén statisztikusalapú fononhidrodinamika volt, amelyben a terjedést úgynevezett fononok – mint kvázirészecskék – és azok ütközése írja le, vagyis egy fononokból álló gáz állapotleírása a cél [12, 27]. Kétféle ütközési mechanizmus bevezetésével két időskálás modellt kapunk eredményül. Ez a két mechanizmus speciálisan a rezisztív és normál ütközéseknek felel meg, és ezek aránya határozza meg, hogy a diffúziós vagy a hullámterjedési mechanizmusok közül melyik fog dominálni. Az elnevezések arra utalnak, hogy a fononok, mint részecskék, ütközése közben az impulzusaik állandóak maradnak-e (normál ütközés) vagy sem (rezisztív ütközés), így a rezisztív ütközés felel meg a diffúziós terjedésnek. Ebben a keretrendszerben maradva a ballisztikus terjedés modellezése már csak egy lépés,

[1] A hiperbolicitás legkönnyebben a $\partial_t \mathbf{y} + \mathbf{A}\partial_x \mathbf{y} + \mathbf{B}\mathbf{y} = \mathbf{f}$ alakban vizsgálható, ahol $\mathbf{y}$ tartalmazza az egyes mezőket, például a T hőmérsékletet és a $\mathbf{q}$ hőáramsűrűséget, $\mathbf{A}$ és $\mathbf{B}$ együtthatómátrixok, $\mathbf{f}$ a forrástagokat tartalmazó vektor. Ekkor az $\mathbf{A}$ sajátértékei megadják a karakterisztikus terjedési sebességeket. Ha azok végesek, akkor hiperbolikus rendszerről beszélünk. Ha egy egyenletrendszer nem "teljes", tehát például nem tartalmaz minden mezőre időderiváltat, mint ahogyan a Fourier-törvény sem, akkor az feltételesen kiegészíthető egy ε együtthatóval, majd a sajátértékekben az $\varepsilon \to 0$ határértéket kell képezni. Ez a lineáris egyenletek esetén egyszerűen vizsgálható tulajdonság.



1.2. ábra. A második hang terjedési sebességének hőmérsékletfüggése, érdemes megfigyelni a 0 K közelében lévő meredek változást [28, 29].

ugyanis ekkor a fononok egymással nem ütköznek, hanem a test egyik peremétől a másikig zavartalanul terjednek, és csak a peremen való szóródás eredményezi a járulékot, tehát a harmadik időskála bevezetését. Ezeket a tulajdonságokat később matematikai formába öntöm, és konkrét hővezetési modellekhez kapcsolom. Az 1970-es évek közepére a szakirodalom már számos sikeres alacsony hőmérsékletű kísérletet dokumentált, amelyek jelentősen megelőzték az elméleti eredményeket. Ez a ballisztikus terjedés modellezésére különösen érvényes volt.

Ebből az időszakból három lényeges elméleti eredményt emelek ki, amelyek a dolgozatomhoz közvetlenül kapcsolódnak. Az első fontos mérföldkő a második hang terjedési sebességének hőmérsékletfüggésének sikeres modellezése, amelyhez a statisztikai háttér nélkülözhetetlen volt. Az 1.2. ábra szemlélteti, hogy milyen mértékben nemlineáris a terjedési sebesség hőmérséklettel való változása. Mivel a terjedési sebesség az anyagi tulajdonságok összességéből fakad, az anyagi nemlinearitások vizsgálata elengedhetetlen, ezért a dolgozatban kitérek a hőmérséklettől függő transzportegyütthatók kérdésére is.

A második eredmény Gyarmati Istvánhoz köthető, akinek sikerült a klasszikus kontinuum-termodinamikát olyan módon kiterjesztenie, amely keretek között a második hang jelensége is modellezhetővé vált [30]. Később erre alapozva alakult ki és terjedt el a nemzetközileg is elismert kiterjesztett irreverzibilis termodinamika elmélete. A dolgozatom részben ennek a megközelítésnek az örökségére épít, részben annak továbbfejlesztését mutatja be.

A harmadik, szintén nagy jelentőségű eredmény Guyer és Krumhansl nevéhez köthető, akik statisztikai alapokból kiindulva meg tudták jósolni, hogy egy adott szilárd közegben milyen módon, milyen frekvenciával kell a gerjesztést létrehozni ahhoz, hogy a második hang jelensége megfigyelhetővé váljon [27, 31], nem elhanyagolható módon, egy parabolikus modellt felhasználva. Ilyen becslés a ballisztikus terjedésre azóta sem létezik, de a technológiai viszonyoknak köszönhetően már nem szükséges. Ezt a becslést ablakfeltételnek nevezik, és a dolgozat szempontjából szin-

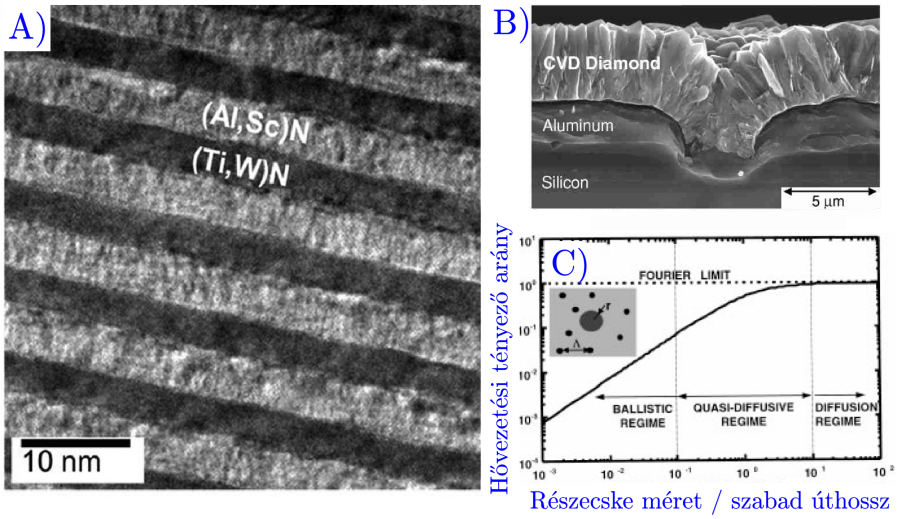
tén egy lényeges elemet, az időskálák szerepét hangsúlyozza. Annak ellenére, hogy a dolgozatban szoba-hőmérsékletű, makroszkopikus skálákra tervezett hőimpulzus-kísérletekről lesz szó, a különféle megfigyelések között analógiák figyelhetőek meg, amelyeket ilyen szempontból ki is használok a későbbiekben.

Habár a dolgozatban a második hang és a ballisztikus jelenségek modellezése a mérnöki alkalmazások szempontjából nem kap nagy hangsúlyt, de ezek ismerete fontos ahhoz, hogy különbséget tudjunk tenni a dolgozatban tárgyalt egyes hővezetési modellek és azok értelmezése között. Az utóbbi évtizedekben sok technológiai tényező megváltozott, amelynek következményeként a Fourier-egyenleten túlmutató modellek alkalmazási lehetőségei lényegesen kiszélesedtek, a szakirodalom számos modellt ajánl és így annak leszűkítése elengedhetetlen számunkra. Egy modern, a technológiai igényeket kellőképpen kiszolgáló hővezetési elmélet és keretrendszer felállítása megköveteli a mérnöki és fizikusi szempontok, ismeretek egyesítését. Emiatt bár lehetne külön-külön tárgyalni az elméleti és a gyakorlati eseteket, valójában nem érdemes. A hővezetési modellek kiterjesztése határozottan megköveteli több szempontrendszer átgondolását. Az imént említett keretrendszer nem más, mint az elméleti szempontok alapján kiválasztott hővezetési modell működtetéséhez és alkalmazásához szükséges eszközök megteremtése. Ez magában foglalja az analitikus és numerikus megoldási módszerek kidolgozását, fejlesztését, valamint az adott modell matematikai tulajdonságainak elemzését.

Ezek a szempontrendszerek elsősorban a technológiai fejlődés miatt kerülnek előtérbe. A Fourier-tól eltérő jelenségek nem csupán alacsony hőmérsékletű rendszerek esetén merülnek fel, hanem szoba-hőmérsékletű rendszerekben is. A megértést segíti a kinetikus gázelméletből ismert Knudsen-szám használata, amely egy adott összetételű gáz adott állapotára vonatkozó közepes szabad úthosszt arányosítja a rendszer karakterisztikus méretéhez (például a tartályhoz, amiben a gáz van). A fononhidrodinamikai elméletek akkor működnek megfelelően, ha a Knudsen szám eléri a 10^{-3}-os nagyságrendet, illetve annál nagyobb[2]. Statisztikus szemmel nézve, alacsony hőmérsékletű rendszerek esetén a közepes szabad úthossz jelentősen megnő, emiatt makroszkopikus méretű testekben is meg tudták figyelni a Fourier-egyenlettel nem modellezhető jelenségeket. A technológiai fejlődés, különösen a nanotechnológia egyre szélesebb elterjedésével válik fontossá, ugyanis szobahőmérsékleten, de mikrométeres, vagy annál még sokkal kisebb hosszskálákon is megfigyelhetők a korábban említett hullámjelenségek [6, 32–35]. Emiatt ezek a hullámterjedési hatások a vékonyrétegeknél, szuperrácsoknál ("superlattices"), és mikrotechnológiai eszközöknél egyaránt jelen vannak. Az 1.3. ábra szemlélteti a szuperrácsok szerkezetét, amelyeknél a hővezetési képesség a rétegszám és rétegvastagság helyes megválasztásával kontrollálható [36–38].

Ezeknél a karakterisztikus hosszskálájú testeknél jelentős méretfüggés figyelhető meg, tehát fontos, hogy az adott hővezetési modell megfelelő skálázási tulajdonságokkal is rendelkezzen. Lényeges megemlíteni, hogy a kontinuum hipotézis még nanoszerkezetű anyagok vizsgálata esetén sem feltétlenül sérül olyan értelemben, hogy amennyire a kinetikus elmélet a momentumsorfejtésen keresztül "átlagmezőket" használ, ugyanígy a kontinuumelméletet is fel lehet fogni átlagmezők leírásaként. Ennek következtében a dolgozatban tárgyalt termodinamikai megközelítés nem ve-

[2]Egzakt határérték nem definiálható erre, de a kísérleti tapasztalat ezt mutatja.



1.3. ábra. Az A) és B) ábrák $Ti_{0.7}W_{0.3}N$ és $Al_{0.72}Sc_{0.28}N$ rétegekkel rendelkező szuperrácsokra mutatnak példákat, [36, 39] alapján. C) A [32] irodalom alapján azt látjuk, hogy mikroszkopikus skálán a rendszer effektív hővezetési tulajdonságai attól is függhetnek, hogy mekkora nanorészecskékkel dolgozunk és azok mérete hogyan aránylik a közepes szabad úthosszhoz. A hővezetési tényező a ballisztikus terjedés megjelenésével nem feltétlenül javul, mivel a hővezetési csatornák, mechanizmusok száma csökken.

szíti érvényét, de a tézisek ezt a témakört nem érintik. Természetesen ettől még az is lehetséges, hogy a kiterjesztett egyenletek bizonyos kvantummechanikai hatásokat effektív módon vesznek figyelembe [40], de a hővezetési egyenletek kvantálása esetén még rengeteg a nyitott kérdés[3], és a dolgozat nem is kívánja ennél részletesebben tárgyalni ezt a témakört.

A technológiai fejlődés nem csupán a mikroszkopikus méretek elérésében nyilvánul meg, hanem a technológiailag megvalósítható időskálák is jelentősen, több nagyságrenddel lerövidültek. Erre kiváló példa Krausz Ferenc 2023-ban elnyert Nobeldíja, amely az attoszekundumos lézerek megalapozását is elismerte. Az időskálák szerepe további magyarázatra szorul. Az előbbiekben emlegetett, egyes hőterjedési mechanizmusokhoz külön-külön időskálák tartoznak, amik akár több nagyságrendben is eltérhetnek egymástól. Ha egy adott testet ilyen időskálán termikusan gerjesztünk, akkor a hullámszerű hatások – természetesen csak adott térskálán – megjelenhetnek. Ennek következtében közönséges anyagokban (például acélban) is megfigyelhetőek lennének a Fourier-egyenleten túlmutató jelenségek, de ezek mérése méréstechnikailag nem lehetséges, és a gyakorlat számára sem igazán releváns. Például a hőmérsékletet nem lehet mérni 10^{-10} s skálán, vagy még annál is gyorsabban, és az acélt a gyakorlatban nem is kívánják használni nanométeres méretskálán. Nanoszerkezetes anyagok esetén sem a hőmérsékletet mérik, hanem sokkal inkább a sugárzási vagy az elektromos vezetési tulajdonságok változását, amiből a lejátszódó

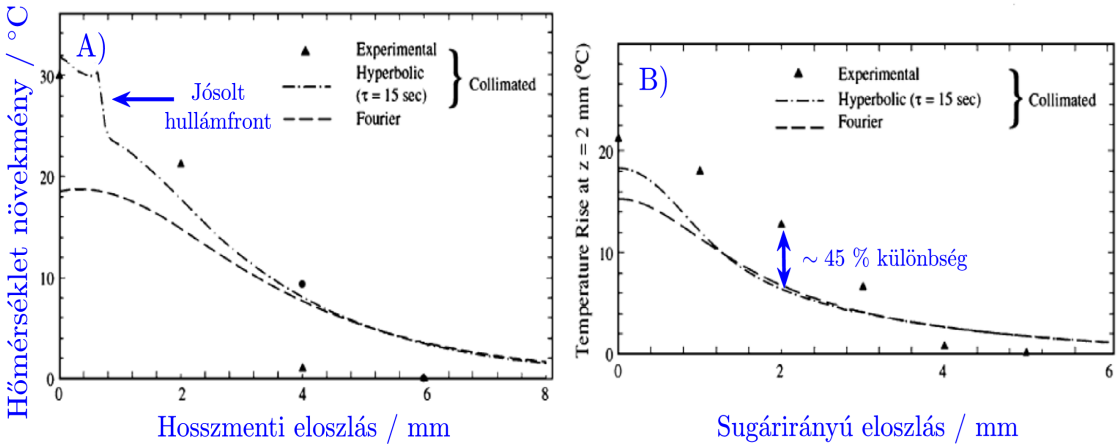
[3]Kvantummechanikai szinten nem a hővezetési egyenletet kvantálták, hanem a hővezetési tényezőnek vették észre a kvantálási tulajdonságait [41–43], tehát a hő csak bizonyos energiaegységekben adódik át, hasonlóan a fotonokhoz. Kvantummechanikai szinten a Fourier-törvény modellezésére több kísérletet is tettek, de ezek mind önkényesen felvett potenciálokon múlnak, nem levezetés eredményeképpen kapják, éppen emiatt nem is egyértelműek [6].

tranziens folyamatokra lehet következtetni [44, 45].

Szintén az időskálák fontosságát, valamint a kapcsolt folyadék–hővezetési modellek relevanciáját hangsúlyozza a lökéshullámok modellezése [46, 47], illetve ennél általánosabban fogalmazva a nagy gradiensekkel járó folyamatok leírása, például hegesztési eljárásokhoz kapcsolódóan. Az ilyen jelenségek modellezése szintén magával vonja az anyagi nemlinearitások vizsgálatát is, legegyszerűbb esetben például a hővezetési tényező hőmérséklettől való függését. Felmerül azonban a kérdés, hogy vajon a hőmérséklet gradiensétől való függés is lehetséges-e? Bonyolultabb, kapcsolt esetekben a nyomás, valamint a gradiensektől való függés is megjelenhet. A dolgozatban bemutatott eredményeknek ez egy lényeges eleme lesz az előbb említett matematikai keretrendszer vizsgálatával együtt.

A dolgozat központi eleme a heterogén anyagok termikus viselkedésének modellezése és annak tanulságai. A mérnöki gyakorlat számos ilyen anyagot használ, a különféle kompozitoktól kezdve a makro- és mikropórusos anyagokon át egészen a kőzetekig és biológiai rendszerekig. A 2000-es évek elejéig a szakirodalom egyértelműen és kizárólagosan a hullámjelenségeket tartotta az egyedüli, Fourier-egyenleten túlmutató jelenségnek. Ennek egyik hírhedt példája az úgynevezett "fagyott hús kísérlet" [48], amely során egy lefagyasztott hússzeletet hirtelen elkezdtek egyik oldalán melegíteni. A testben több ponton is mérve a hőmérsékletet azt figyelték meg, hogy egy hőmérsékleti front alakult ki, amelyet így a második hang jelenségének tulajdonítottak, mivel sikerült a mért hőmérséklet időbeli lefutását egy Fourier-tól eltérő csillapított hullámegyenlettel illeszteni. A kísérletet végül senkinek nem sikerült megismételni [49, 50], bár a megfigyelések magyarázata látszólag nem lenne bonyolult. A fázisátalakulás (olvadás) okozta késleltetés eredményezte az élesen kirajzolódó hőmérsékleti frontot. Ennek sikeres illesztése azonban rávilágít egy igen fontos értelmezésre, amit a dolgozatban is még többször hangsúlyozni fogok, ezt effektív modellezésnek nevezik. Egy másik érdekes példa, amikor fázisátalakulás nélkül, de egy mesterségesen létrehozott heterogén közeget kívántak egy hullámterjedést leíró hiperbolikus hővezetési egyenlettel modellezni [51], ami mögött a motiváció csupán annyi, hogy ha a Fourier-egyenletet nem lehet megfelelően illeszteni, akkor válasszunk egy olyan modellt, amiben eggyel több a paraméterek száma. Az 1.4. ábra tanulságai fontosak: egyrészt attól, hogy egy többparaméteres modellel dolgozunk, a fizikai interpretáció megőrzi fontosságát; másrészt a Fourier-egyenlet illesztésében kritikus szerepet kapnak a peremfeltételek, valamint a hőimpulzus által, térfogati elnyelődésen keresztül létrehozott hely- és időfüggő hőforrások [52].

Az effektív modellezés csak egy kontinuum-megközelítésben lehet értelmes feltételezés. Egy kinetikus elméleti megközelítésben elengedhetetlen a hővezetési mechanizmus leírása, és egyben meg is köti, hogy egy modell milyen célra, milyen tartományban és hogyan használható. Ennek az az előnye, hogy bizonyos transzportegyütthatók kiszámolhatóak mérések nélkül is. Ezzel szemben egy kontinuummodell nem igényel semmilyen konkrét feltételezést a jelenség mechanizmusára vonatkozóan. Az állapottér megfelelő megválasztása és a második főtétel célszerű alkalmazása lehetővé teszi a formailag azonos alakú, de akár eltérő értelmezést is megengedő modellek levezetését. Ez a fajta modell-flexibilitás, illetve univerzalitás lehetővé teszi, hogy egy kontinuummodellben a transzportegyütthatókat a feladatnak megfelelően értelmezzük. Ez az elv nem új, a Fourier-törvény esetén a



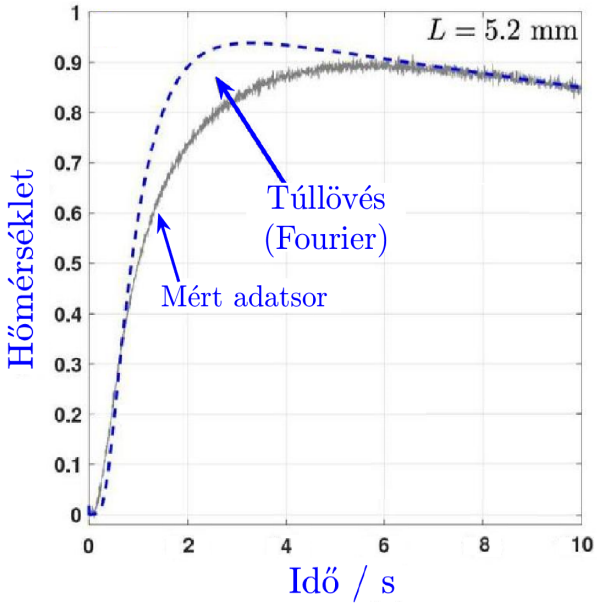
1.4. ábra. Az A) és B) ábrák a hengeres heterogén próbatest adott időpontbeli hőmérséklet-eloszlását ábrázolják a hossz- és sugárirányú dimenziók mentén [51]. Látható, hogy a mért adatok a jósolt hullámterjedést nem támasztják alá, és az illesztés jósága sem javult jelentősen a hiperbolikus modell alkalmazásával.

hővezetési (és a hőfokvezetési) tényező pontosan ugyanezt a szerepet tölti be, ezért a Fourier-törvény érvényessége alapvetően azon múlik, hogy a hővezetési jelenség egy időskálával leírható legyen, függetlenül attól, hogy az adott test homogén vagy sem. A Fourier-egyenlettől általánosabb kontinuummodellek esetén akkor lehet a kinetikus elméleti eredményeket is figyelembe venni, ha azok az egyenletek megőrzik a kinetikus elméleti modell szerkezetét, azaz ugyanolyan tagokat és operátorokat tartalmaznak, emiatt kompatibilisek. Ekkor választhatunk, hogy az együtthatókat mérések által, egy kontinuummodellezési szemmel határozzuk meg, vagy a hővezetési mechanizmus ismeretében kiszámoljuk a kinetikus elméleti eszközök segítségével.

Már többször is felmerült, és később még részleteiben is fogok beszélni a hőimpulzuselvű mérésekről. Egy tipikus, heterogén anyagok esetén gyakran megfigyelt példát mutat az 1.5. ábra, amely jól demonstrálja a megoldandó problémát. Ez a mérési eredmény egy zárt cellás alumíniumhab próbatestre vonatkozik, amelynek a cellái milliméteres nagyságrendbe esnek [53]. A hőimpulzuselvű mérési eljárás egy standard módszer az anyagok hőfokvezetési tényezőjének meghatározására a Fourier-egyenlet illesztésén keresztül. Habár az R^2 érték nem kiemelkedően jó, de a mérést a Fourier-egyenlet megoldásával összevetve sokkal komolyabb eltéréseket látunk. Az 1.5. ábrán az időskálák szétválása is jól kivehető, eleinte lassabb, majd később jelentősen gyorsabb a Fourier-egyenlet által jósolt hőmérséklet-változás, amely így a mért hőfokvezetési tényező értékét megbízhatatlanná teszi.

Ha egy heterogén test a modellezés során helyettesíthető egy vele egyenértékűen viselkedő homogén testtel, akkor ezt effektív modellezésnek nevezzük. A kérdés az, hogy ehhez milyen modellt kell választani, és az alumíniumhabos példából az olvasható ki, hogy egy kettő időskálás hővezetési modellre van szükség, de nem akármilyen modellre. Ahogy az előbbi gondolatokból kiolvasható, ennek a megközelítésnek természetesen további feltételei vannak.

A feltételek kapcsán az első amit ki kell emelni, a méréstechnikára vonatkozik. Ha a hőmérsékletmérés során elég nagy időlépéseket (mintavételezést) alkalmazunk, akkor a nem megfelelő mintavételezés elrejtheti az adatokban a lényeges elemeket.



1.5. ábra. Egy zárt cellás alumíniumhab tranziens viselkedése, és a Fourier-egyenlettel való legjobb illesztés összevetése [53]. A vizsgált heterogén test vastagsága $5,2$ mm volt, és az időbeli viselkedése egyetlen időskálával nem jellemezhető.

Ezért már a modellezés legelején döntést kell hozni, hogy milyen időskála részletességéig akarjuk a test termikus viselkedését leírni. Mindezek mellett meg kell vizsgálni az adott anyag karakterisztikus jellemzőit (méreteit, jellemző összetevőit), valamint a felhasználás szempontjából lehetséges peremfeltételek időskáláit, ezalatt elsődlegesen a hőátadást értve, de a hőmérsékleti sugárzás is releváns lehet. Ezen tulajdonságok – az anyag, a mérés, a peremfeltételek – összessége dönti el, hogy egy effektív leírás mennyire és milyen mértékig alkalmazható.

A megfigyeléseim szerint a Fourier-egyenlet nem minden feltétel nélkül használható heterogén testek leírására, összhangban az [54] irodalommal. A kutatási munkám legfontosabb eredménye, hogy mérnöki szempontból releváns alternatívát találtam a probléma megoldására, és a dolgozatomban az ide vezető utat, valamint a gyakorlati alkalmazásokba való átültetés szempontrendszerét mutatom be.

A Fourier-egyenlettől eltérő modellek mérnöki felhasználására effektív értelmezésen keresztül a dolgozatom mutat először példát, és ilyen értelemben a mérnöki gyakorlatban egyedülálló megközelítést. Továbbá, a bemutatott eredmények nem csupán az alkalmazás lehetőségeit vetik fel, hanem konkrét példákat, eseteket is tárgyalok, ipari és méréstechnikai alkalmazásokkal kiegészítve.

A dolgozatom második fejezetében részletesen tárgyalom az egyes hővezetési modellek kontinuum-termodinamikai hátterét. Ez alapozza meg a harmadik fejezetben kifejtett problémaköröket, a hővezetési tényező hőmérsékletfüggését helyezve a középpontba. A gyakorlati feladatok megoldásához elengedhetetlen volt egy megbízható megoldási módszertan kidolgozása, így a negyedik fejezetben az itt elért eredményeim és tapasztalataim foglalom össze. Végezetül, az ötödik fejezetben olyan összetett szerkezetű anyagokra mutatok példákat, amelyeken a kidolgozott elméleti

módszertan helyességét többször is tesztelhettem.

Ezeken a fejezeteken keresztül kívánom a Fourier-egyenlet esetén megszokott eszközöket új megvilágításba helyezni és rámutatok, hogy a több időskálás hővezetési modellek esetén ezeknek milyen korlátai vannak, és ezekre milyen alternatívákat javaslok. Természetesen egy ilyen munka nem lehet teljes, a Fourier-egyenlet esetén is rengeteg kutató több évtizedes munkájára volt szükség a manapság már hétköznapinak tekinthető eszközök kidolgozásához, akár a megoldási módszereket, akár a mérési-kísérleti technikákat tekintjük. A dolgozatom igyekszik minden alapot megadni ahhoz, hogy a Fourier-tól eltérő egyenleteket hogyan, milyen értelmezés és feltételek mellett lehet használni, ezzel támogatva minden jövőbeli kutatást.

2. fejezet

A Fourier-egyenleten túli modellek termodinamikai hátteréről

A szakirodalom legalább tíz különböző módszertant tart számon arra vonatkozóan, hogy a Fourier-törvényt miként lehet általánosítani. Ahhoz, hogy a tárgyalást tisztán és érthetően tartsam, ezek közül csak a kontinuumalapú, irreverzibilis termodinamikai módszertant és annak a releváns kiterjesztéseit tekintem. Ahol fontos, ott utalni fogok a kiterjesztett irreverzibilis termodinamika, vagy a racionális kiterjesztett termodinamika vonatkozó eredményeire, de azok módszertanát nem fejtem ki. A következőkben először a Fourier-törvényt mutatom be részleteiben, utána sorra veszem a releváns, komplexebb modelleket, egységes keretben tárgyalva. A legelterjedtebb módszertanok megismerésére a [6, 13, 33, 55–61] szakirodalmi forrásokat ajánlom, ezek tárgyalása sajnos lényegesen túlmutatna a dolgozat keretein.

2.1. Fourier-törvény

A klasszikus és a kiterjesztett irreverzibilis termodinamikai módszertan közös eleme a második főtétel megfogalmazása és annak kihasználása[1]. A következőkben kizárólag merev, izotrop közeget tekintek. Tegyük fel, hogy létezik a fajlagos entrópia (s) nevű potenciálfüggvény [64], amely csak az e fajlagos belső energia függvénye, azaz $s = s(e)$, és eleget tesz a $\mathrm{d}e = T\mathrm{d}s$ kényszerfeltételnek, amit Gibbs-relációnak neveznek, valamint ezen keresztül definiálható az abszolút hőmérsékletet (T), azaz $\mathrm{d}s/\mathrm{d}e = 1/T$. Mivel a Gibbs-relációt a teljes folyamat mentén érvényesnek tekintem, ebből az következik, hogy egyensúlyban, valamint azon kívül is ugyanazt a hőmérséklet-fogalmat használom[2]. A második főtétel matematikai alakját a (2.1) mérlegegyenlet fejezi ki,

$$\rho\partial_t s + \nabla \cdot \mathbf{J}_s = \sigma_s \geq 0, \tag{2.1}$$

[1] A második főtételben szereplő entrópiát az A. függelék részletesen definiálja a [62, 63] munkák alapján.

[2] Itt megjegyzem, hogy ezt a tulajdonságot a kiterjesztett hővezetési modelleknél is kihasználom. Ez nem minden megközelítésben van így, és különféle nemegyensúlyi hőmérsékletet vezetnek be [65, 66], amik kísérleti ellenőrzése a jelenlegi ismereteinek szerint nem lehetséges.

ahol ρ az állandó tömegsűrűség, ∂_t az idő szerinti parciális derivált, ∇ jelöli a nabla operátort, $\mathbf{J_s}$ az entrópia áramsűrűsége, valamint σ_s fejezi ki az entrópiaprodukciót. Emiatt σ_s, zárt rendszerben a folyamat mentén folyamatosan növekszik, egyensúlyban zérus. Az entrópiaáram, $\mathbf{J}_s$, teljes divergencialeválasztás útján meghatározható [11, 67, 68], amiből az következik, hogy $\mathbf{J}_s = \mathbf{q}/T$, ahol $\mathbf{q}$ a hőáramsűrűség[3].

A Fourier-törvény levezetéséhez a σ_s meghatározására, valamint a (2.1) egyenlőtlenség megoldására van szükség. Ehhez fel kell használni a fajlagos belső energia mérlegegyenletét is,

$$\rho\partial_t e + \nabla\cdot\mathbf{q} = 0, \tag{2.2}$$

amelyben a forrástagot most elhanyagolom. Behelyettesítések után a

$$\sigma_s = \mathbf{q}\cdot\nabla\frac{1}{T} \geq 0, \tag{2.3}$$

egyenlőtlenség adódik, amelynek a legegyszerűbb megoldása az, ha a $\mathbf{q}$ hőáramsűrűség és a hőmérséklet gradiense egymással arányosak, ahol az arányossági tényezőt izotrop anyagról lévén szó egy pozitív l konstans jelöli:

$$\mathbf{q} = -\frac{l}{T^2}\nabla T = -\lambda\nabla T, \quad \lambda = \frac{l}{T^2}, \quad l\in\mathbb{R}_0^+. \tag{2.4}$$

Ezt a fajta megoldást Onsager [69, 70] és Eckart is részletesen tárgyalják [71, 72], amit általánosan termodinamikai erők és áramok közötti arányosságként lehet értelmezni. Az l transzportegyüttható segítségével lehet a λ hővezetési tényező szükséges hőmérsékletfüggését megadni, valamint az $l = 0$ határeset jelenti a tökéletes hőszigetelőt. A Fourier-egyenlet esetén a szakirodalom gyakran használja a modell T-reprezentációját, mint transzportegyenletet, azaz a modell hőmérsékletre rendezett alakját, a térfogati hőforrást is figyelembe véve:

$$\rho c_v\partial_t T = \nabla\cdot(\lambda\nabla T) + q_V = \begin{cases} \lambda\Delta T + q_V & \text{ha} \quad \lambda = \text{ konst.} \\ \lambda(T)\Delta T + \frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}T}(\nabla T)^2 + q_V & \text{ha} \quad \lambda = \lambda(T), \end{cases} \tag{2.5}$$

amelyben q_V jelöli a térfogati hőforrást, és az $a = \lambda/(\rho c_v)$ fogja jelenteni a hőfokvezetési tényezőt.

A kiterjesztett, kontinuum-megközelítésű hővezetési modellek leginkább abban térnek el egymástól, hogy milyen állapotteret és entrópiaáramot választanak meg, de a második főtétel (2.1) alakja, valamint annak a fenti módon történő kihasználása változatlan marad. Fontos különbséget jelent, hogy amíg a q_V hőforrás időtől és helytől való függése a (2.5) Fourier-féle hővezetési egyenletnél nem ad extra járulékokat, addig a Fourier-tól eltérő modellek esetén annak további idő és hely szerinti deriváltjai jelenhetnek meg. Szintén lényeges lesz az a megállapításom, hogy addig, amíg a (2.5)-féle T-reprezentáció a Fourier-egyenletnél megbízhatóan használható, addig a nem-Fourier egyenletek esetén ez az alak már erősen félrevezető, és elrejti a

[3]Egy jelölésbeli konvencióra hívom fel a figyelmet: a $\mathbf{q}$ helyesebben $\dot{\mathbf{q}}$ lenne, mivel időegységre vetített energiaáramról van szó, de a pontot elhagyom, hogy ne keveredjen össze a szakirodalomban szintén elterjedten használt időderivált jelöléssel.

modell további lényeges tulajdonságait, főleg állapotfüggő együtthatók esetén. Amíg a Fourier-egyenlet esetén a T-reprezentációban való gondolkodás csak könnyebbséget jelent, de megszorítást nem, addig a nem-Fourier egyenletek esetén lényeges megszorításokat von maga után, és sokszor nem is használható.

Továbbá, a (2.5) egyenlet megoldásához szükség van kezdeti és peremfeltételek megadására. A Fourier-egyenlet esetén kezdeti feltételként elegendő csak a kezdeti hőmérséklet-eloszlást megadni, akár rendszerként, akár T-reprezentációként tekintünk a modellre. A (2.4) Fourier-törvény felhasználásával a kezdeti $\mathbf{q}$ hőárammező egyértelműen származtatható. Ez a Fourier-tól eltérő hővezetési modellek esetén szintén nem magától értetődő.

A peremfeltételek alatt a hagyományosan is használt első-, másod-, valamint harmadfajú összefüggéseket értem, azzal a kiegészítéssel, hogy ezek az elnevezések a klasszikus irodalomból ismert T-reprezentációt követik. Azaz, ha csak a hőmérséklet szerepel, mint egyetlen mező, úgy értelmes arról beszélni, hogy magát a hőmérsékletet, annak a gradiensét, vagy a kettő közötti arányosságot (leggyakrabban hőátadást) írják elő a test határain. Ha a modellre nem annak T-reprezentációjaként, hanem rendszerként nézünk – amit mindenképpen ki kell használnunk a Fourier-tól eltérő modellek esetén – akkor ezek az elnevezések nem egyértelműek. Így a következőkben összefoglalom, hogy milyen peremfeltétel alatt mit is értek.

- Elsőfajú: a peremen adott a hőmérséklet, $T(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{r} \in \partial\Omega$, azaz a test határán értelmezett, de hely- és időfüggés egyaránt megengedett.
- Másodfajú: ezalatt előírt hőáram feltételt értek, azaz $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{r} \in \partial\Omega$, amely csak a Fourier-törvény miatt esik egybe az előírt hőmérséklet-gradienssel. Fourier-egyenleten túl a kettő nem egyenértékű feltétel.
- Harmadfajú: ezalatt a hőátadás peremfeltételt fogom érteni, a klasszikus analógiát követve, amiben az első- és a másodfajú peremek egymással arányosak, azaz

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \alpha(T - T_\infty), \tag{2.6}$$

  ahol $\mathbf{n}$ a kifelé mutató felületi normális, T_∞ a környezeti fluidum hőmérséklete, $\alpha \geq 0$ a hőátadási tényező. Megjegyzem, hogy direkt nem arányosítom a hőmérsékletek különbségét a hőmérséklet gradienséhez, mivel az speciálisan csak a Fourier-törvényre igaz, annál általánosabb esetekben nem feltétlenül.

Ebből az osztályozásból látszik, hogy a Fourier-törvényen túli hővezetési egyenletek esetén nem lehet csak a hőmérséklettel, mint egyetlen mezővel dolgozni, az csak a Fourier-egyenletnek egy sajátossága, de nem általánosan érvényes tulajdonság. Ezt a kiterjesztett modellek esetén kiemelten fontos szem előtt tartani. A fenti összefüggések akkor kifejezetten hasznosak, ha a modellt egyenletek rendszereként tekintjük, változók kiküszöbölése nélkül, ami nemlineáris, állapotfüggő transzportegyütthatók esetében gyakran nem is lehetséges.

Ritkán alkalmazott, de igen hasznos a q-reprezentáció tárgyalása is. A T-reprezentációhoz hasonlóan az egyenletrendszert a $\mathbf{q}$ hőáramsűrűségre rendezve, konstans együtthatók esetén a Fourier-egyenlet a

$$\rho c_v \partial_t \mathbf{q} = \lambda \nabla \nabla \cdot \mathbf{q} = \lambda \Delta \mathbf{q} \tag{2.7}$$

alakot ölti, amely összefüggés a (2.5) Fourier-féle hővezetési egyenlettel fizikailag egyenértékű, és ebben az esetben a kezdeti feltételnek a hőáramra kell vonatkoznia, de ez a feltétel nem független a hőmérséklet kezdeti feltételtől. Továbbá, mivel a Fourier-törvény esetében a hőáramsűrűség egy skalármező gradiensével arányos, ezért a hőáramsűrűség rotációmentes, így a $\nabla\nabla \cdot \mathbf{q} = \Delta\mathbf{q} + \nabla \times \nabla \times \mathbf{q}$ kifejezés egyszerűsíthető, ezt fejezi a (2.7) utolsó egyenlősége; Fourier-egyenleten túli modellek esetén ez nem mindig érvényes. A (2.7) egyenlet természetesen a peremfeltételek kezelését is módosítja, és a q-reprezentáció olyan analitikus megoldások keresésénél célszerű választás, ahol a peremfeltételek közvetlenül a hőáramot írják elő [73]. Egy ilyen, hőáramsűrűségre felírt egyenlet esetében a hőmérséklet-peremfeltétel nem értelmes, de helyette a hőáram gradiensének előírása viszont megtehető. Az időskálák tekintetében ki kell emelni, hogy a Fourier-féle hővezetési egyenlet egy időskálás folyamatot ír le, amit a hőfokvezetési tényező és a test jellemző mérete adnak meg. Az ettől általánosabb modellek kettő, vagy akár annál is több hővezetési időskálát tartalmaznak. Emiatt egy érdekes következmény, hogy a hagyományosan a Fourier-egyenletre érvényes Fourier- és Biot-számok nem feltétlenül értelmezhetőek ugyanúgy. A Fourier-szám, egy alkalmasan választott L karakterisztikus mérettel,

$$\mathrm{Fo} = \frac{at}{L^2} \tag{2.8}$$

a hőfokvezetési tényezőt kihasználva definiálja a vonatkozó időskálát[4]. Ha egy hővezetési modell kettő időskálát ír le, akkor választás kérdése lesz, hogy melyiket jelöljük ki erre a célra, és mivel numerikus szempontból sokszor a gyorsabb időskálát célszerű választani[5], ezért a Fourier-szám már nem a hagyományosan ismert hőfokvezetési tényezőt fogja használni, így további egyértelműsítést tesz szükségessé. A Biot-szám,

$$\mathrm{Bi} = \frac{\alpha L}{\lambda}, \tag{2.9}$$

felfogható úgy, mint a hőátadási és hővezetési időskálák hányadosa. Emiatt lehetséges az, hogy bizonyos Biot-szám alatt a koncentrált paraméterű modellezés kellően jól közelíti a hővezetési folyamatokat, vagyis a hővezetési időskála lényegesen gyorsabb, mint a test határán létrejövő hőátadási folyamat. Ha a hővezetési folyamat több időskálára bontható, akkor megvizsgálandó, hogy a Biot-szám milyen értéke mellett alkalmazható a koncentrált paraméterű közelítés, ekkor viszont a lassabb időskálák jelenthetik a referenciát.

2.2. Két időskálás hővezetési modellek

Az előzőekben szándékosan nem kívántam a Fourier-egyenleten túli modelleket pontosan megnevezni, mivel a szakirodalom rengeteg különféle modellt tart számon.

[4]Meg kell jegyeznem, hogy a Fourier-szám az összes többi "számmal" ellentétben (például Reynolds-szám, Prandtl-szám, Nusselt-szám) nem egy paraméter, hanem egy független változó szerepét tölti be, emiatt a "Fourier-szám" elnevezés félrevezető, helyesebb lenne a "diffúziós időskála" vagy "Fourier-időskála" elnevezés.

[5]Ez egyben azt is jelenti, hogy a Fourier-tól eltérő hatások gyorsabbak, és azok numerikus lekövetése szükségszerű, de a peremfeltételeket is figyelembe véve célszerű a referencia időskálát megválasztani.

Az előzőekben említett Fourier-egyenleten túli sajátosságok mindegyikre egyaránt érvényesek maradnak. A következő termodinamikai levezetésekben csak a kontinuum hátteret használom ki, nem építek sem a fononhidrodinamikára, sem bármely egyéb kinetikus elméleti megközelítésre. Ez az egyenletek érvényessége szempontjából egy kulcsfontosságú tényező, mivel nem a mikroszerkezeti sajátosságokat, hanem a testek makroszkopikus eredő viselkedését kívánom leírni. A legfontosabb modellek: Maxwell–Cattaneo–Vernotte (MCV, amit gyakran Cattaneo–Vernotte vagy csak Cattaneo-egyenletnek neveznek), Guyer–Krumhansl (GK), valamint a Jeffreys-egyenlet. Ezek közül a GK és az MCV modellek nem függetlenek egymástól, az MCV a GK határeseteként értelmezhető. Termodinamikai szempontból a GK-egyenletnek van nagyobb jelentősége, de bizonyos speciális tulajdonságokat az MCV-egyenleten egyszerűbb és így célszerűbb bemutatni. E két hővezetési modell levezetése így összefoglalható, és nem is tárgyalom őket külön. Ezzel szemben a Jeffreys-egyenlet már ezektől különböző feltevésekből indul ki, és nem lehet a GK-egyenlet speciális eseteként értelmezni.

2.2.1. Guyer–Krumhansl-egyenlet

Az előzőekben használt, az e fajlagos belső energia által kifeszített $s = s_0(e)$ állapotteret ki kell bővíteni a $\mathbf{q}$ hőáramsűrűséggel, azaz $s = s(e, \mathbf{q})$, és

$$s = s_0(e) - \frac{k}{2\rho}\mathbf{q}\cdot\mathbf{q}, \quad k \in \mathbb{R}_0^+ \tag{2.10}$$

ahol az $s_0(e)$ jelöli a Fourier-egyenlet esetében is használt tagot, valamint továbbra is igaz az, hogy

$$\left.\frac{\partial s}{\partial e}\right|_{\mathbf{q}} = \frac{\mathrm{d}s_0}{\mathrm{d}e} = \frac{1}{T}. \tag{2.11}$$

Ezen a ponton meg kell jegyeznem, hogy a (2.10) egyenletben a ρ tömegsűrűséggel való osztás nem kötelező, és ennek nemlinearitások esetén komoly jelentősége is van. A levezetés végén erre vissza fogok térni. További eltérés, hogy a korábbiakban használt $\mathbf{J}_s = \mathbf{q}/T$ entrópiaáram helyett egy általánosabb [74],

$$\mathbf{J}_s = \left(\frac{1}{T}\mathbf{1} + \mathbf{B}\right)\cdot\mathbf{q} \tag{2.12}$$

formát használok, ahol $\mathbf{1}$ jelöli az egységtenzort, és $\mathbf{B}$ egy úgynevezett áramszorzó (Nyíri-szorzó [75]), egy másodrendű tenzor, amire a második főtétel további megkötéseket fog adni. A szakirodalomban megtalálható a

$$\mathbf{J}_s = \tilde{\mathbf{B}}\cdot\mathbf{q} \tag{2.13}$$

alak is [14, 76]. Habár ez ekvivalens eredményre vezet a (2.12) kifejezéssel, annyiban előnytelen, hogy a $\tilde{\mathbf{B}}$ áramszorzó fizikai jelentése elmosódik. Ezt az entrópiaprodukció egyenlőtlenségének a megoldása után világosabban lehet látni.

Felteszem, hogy a fenti általánosítások nem érintik a (2.2) energiamérleget. Ezekből a feltevésekből kiindulva a (2.1) egyenlőtlenség meghatározható, azaz

$$\sigma_s = \frac{\rho}{T}\partial_t e - k\mathbf{q}\partial_t\mathbf{q} + \left(\nabla\frac{1}{T} + \nabla\cdot\mathbf{B}\right)\cdot\mathbf{q} + \left(\frac{1}{T}\mathbf{1} + \mathbf{B}\right) : (\nabla\mathbf{q}), \tag{2.14}$$

amelyben az első tagnál figyelembe kell venni a (2.2) energiamérleget, az utolsó tagnál pedig kihasználom, hogy

$$\frac{1}{T}\mathbf{1} : (\nabla \mathbf{q}) = \frac{1}{T}(\nabla \cdot \mathbf{q}), \tag{2.15}$$

így ezekből a

$$\sigma_s = \left(-k\partial_t \mathbf{q} + \nabla\frac{1}{T} + \nabla \cdot \mathbf{B}\right) \cdot \mathbf{q} + \mathbf{B} : (\nabla \mathbf{q}) \geq 0 \tag{2.16}$$

egyenlőtlenség adódik. Ahogy a Fourier-törvény levezetésénél is, úgy itt is felteszem, hogy az entrópiaprodukció termodinamikai erőkből és áramokból épül fel, amelyek egymással arányosak. Mivel merev és izotrop közeget tekintek, ezért a Curie-elv szerint csakis azonos tenzori rendű mennyiségek között jöhetnek létre csatolások. Ez azt jelenti, hogy

$$\mathbf{q} = l\left(-k\partial_t \mathbf{q} + \nabla\frac{1}{T} + \nabla \cdot \mathbf{B}\right), \quad l \in \mathbb{R}_0^+ \tag{2.17}$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{L}^{(4)} : \nabla \mathbf{q}, \tag{2.18}$$

amelyben így egyértelműen kirajzolódik, hogy a $\mathbf{B}$ áramszorzó közvetlenül arányos a hőáram gradiensével, általános esetben egy $\mathbf{L}^{(4)}$ negyedrendű tenzoron keresztül. Más szóval, $\mathbf{B}$ egy úgynevezett relaxált változónak tekinthető [74], aminek az időbeli változása nem jelenik meg, de az alacsonyabb rendű (T, $\mathbf{q}$)-folyamatokhoz csatolódik. Ez teljes mértékig kompatibilis a kiterjesztett irreverzibilis termodinamika által használt formával. A (2.13) kifejezéssel az áramszorzó szerepe nem lenne ennyire világos, és a (2.17) egyenletben lévő $1/T$-s tag a (2.18)-ban jelenne meg, amit azonban a (2.12) alakban leválasztottunk. Lineáris esetben a végeredmény matematikai szempontból ugyanaz, de termodinamikai oldalról a bemutatott választás célszerűbb, így világosabb értelmezésre vezet.

Az $\mathbf{L}^{(4)}$ negyedrendű tenzor felbontható szimmetrikus ($\mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}$) és antiszimmetrikus deviatorikus ($\mathbf{L}^{\mathrm{d,A}}$), valamint gömbi ($\mathbf{L}^{\mathrm{s}}$) részekre, és a (2.16) egyenlőtlenség miatt elvárható, hogy

$$\mathbf{L}^{\mathrm{d,S}} \geq 0, \quad \mathbf{L}^{\mathrm{d,A}} \geq 0, \quad \mathbf{L}^{\mathrm{s}} \geq 0, \tag{2.19}$$

teljesüljenek. Ezen megkötések felhasználásával a (2.18) jobb oldala átírható,

$$\mathbf{L}^{(4)} : \nabla \mathbf{q} = \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}}{2}(\nabla \mathbf{q} + (\nabla \mathbf{q})^{\mathrm{T}}) + \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{s}} - \mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}}{3}(\nabla \cdot \mathbf{q})\mathbf{1} + \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{d,A}}}{2}\epsilon : (\nabla \times \mathbf{q}), \tag{2.20}$$

bevezetve az ϵ Levi-Civita szimbólumot. Ezzel a Guyer–Krumhansl-egyenlet onsageri alakja:

$$\mathbf{q} = l\left(-k\partial_t \mathbf{q} + \nabla\frac{1}{T} + \nabla \cdot \mathbf{B}\right), \tag{2.21}$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}}{2}(\nabla \mathbf{q} + (\nabla \mathbf{q})^{\mathrm{T}}) + \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{s}} - \mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}}{3}(\nabla \cdot \mathbf{q})\mathbf{1} + \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{d,A}}}{2}\epsilon : (\nabla \times \mathbf{q}), \tag{2.22}$$

amellyel kapcsolatban további megállapításokat tehetünk. A (2.21) egyenletben k helyett ρk jelenik meg, ha (2.10)-ben nem vesszük figyelembe a sűrűséggel való

osztást. A modell az MCV-egyenletre redukálódik, amennyiben $\mathbf{L}^{(4)} = \mathbf{0}$, azaz (2.22) eltűnik, és a Fourier-törvény csupán egy időbeli $\partial_t \mathbf{q}$ taggal egészül ki. A Fourier-törvénnyel ellentétben a $\mathbf{q}$ ebben az esetben nem örvénymentes, a (2.22) kifejezésben a $\nabla \times \mathbf{q}$ nem automatikusan nulla.

Továbbá, a GK-egyenletnek a (2.21)-(2.22) alakjából az olvasható ki, hogy bár $\mathbf{B}$ kiküszöbölhető, mégsem tehető meg minden további feltétel nélkül. A kiküszöbölés akkor célszerű, ha az összes $\mathbf{L}$ együttható konstans, máskülönben további deriváltak jelennek meg, és a modell jelentősen bonyolultabbá válik. Éppen emiatt azt a megállapítást teszem, hogy a hővezetési modellt annak (2.21)-(2.22) alakjával, vagyis onsageri szinten kell definiálni, ami egyértelműsíti a ρ és a $\mathbf{B}$ szerepét, valamint a konkrétan megválasztott termodinamikai erő-áram arányosságot is. Ez nemcsak a GK-egyenletre igaz, hanem bármilyen más, Fourier-egyenlettől különböző modellre is, és így egy teljesen új szemléletet jelent a Fourier-féle hővezetési egyenlethez képest. Amíg a Fourier-egyenletet annak (2.5) alakjával egyértelműen definiálni lehet, addig a GK-egyenlet esetén több más elengedhetetlen szempontot figyelembe kell venni, amelyek a mérnöki gyakorlat számára szintén kritikusak.

Feltéve, hogy a (2.21)-(2.22) egyenletekben az összes együttható skalár konstansként kezelhető, akkor a $\mathbf{B}$ kiküszöbölésével

$$\tau \partial_t \mathbf{q} + \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \eta_1 \Delta \mathbf{q} + \eta_2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{q}, \tag{2.23}$$

egyenlet adódik, amelyben

$$\tau = lk, \quad \lambda = \frac{l}{T^2}, \quad \eta_1 = l\frac{L^{\mathrm{d,S}} + L^{\mathrm{d,A}}}{2}, \quad \eta_2 = l\frac{2L^{\mathrm{s}} + L^{\mathrm{d,S}} - 3L^{\mathrm{d,A}}}{6} \tag{2.24}$$

transzportegyütthatókat kapjuk, ahol a tömegsűrűség a $\tau = \rho l k$ relaxációs időben is megjelenhet, választástól függően. A (2.24) összefüggésekből már a legegyszerűbb kiterjesztés szintjén is az látszik, hogy a makroszkopikus transzportegyütthatók, bár lineárisan függetlenek egymástól, nemlineáris esetben mégis az onsageri szintből kell kiindulni. A GK-egyenlet (2.23) alakja nem ad elégséges támpontot az együtthatók közötti összefüggések figyelembevételére. Mivel a mérnöki gyakorlatban jól ismert, hogy a λ hővezetési tényező T-függő, amiből $l = l(T)$ összefüggés következik, vagyis az összes együttható egyből T-függővé válik, már csak az $l(T)$ miatt is. Ennek részleteit a következő fejezetben fogom bővebben tárgyalni. Meg kell jegyeznem, hogy valójában nem a T, hanem az e fajlagos belső energia az állapottér eleme, tehát pontosabban a fajlagos belső energiától való függést kellene figyelembe venni. Viszont a fajhőt minden esetben konstansként kezelem, így számomra nem okoz különbséget, hogy e- vagy T-függést tekintek, de hangsúlyozom, hogy ennek a fajhő konstansként való kezelése a feltétele. Ezt a későbbiekben végig kihasználom. Termomechanikai esetben ez sem elegendő, és így a hővezetési tényező a mechanikai jellemzőktől is függhet. További részletekért Gróf [77] munkáját javaslom.

A szakirodalom a τ együtthatót relaxációs időnek nevezi, és a kinetikus elméletben a fononok ütközési frekvenciájához kapcsolódó fogalom. Ebben a kontinuumelméleti megközelítésben explicit jelentést nem tulajdonítok ennek a paraméternek, de egy további időskálát meghatároz. A Cattaneo-egyenlet szintjén ez az időskála a T-reprezentációban jobban látszik:

$$\tau \partial_{tt} T + \partial_t T = a \Delta T, \tag{2.25}$$

vagyis ebben a szemléletben a Cattaneo-egyenlet csillapított hullámegyenletként értelmezhető. Alacsony hőmérsékletű (< 20 K) kísérletekben ez helytálló, és a $\sqrt{a/\tau}$ hullámterjedési sebesség a mérvadó időskála. Effektív modellezési keretekben, főleg heterogén anyagok hővezetési tulajdonságait vizsgálva a Cattaneo-egyenletnek nincs valódi gyakorlati jelentősége [78].

Az $\eta_{1,2}$ paraméterek szerepe a kinetikus elméletben egyértelmű: η_1 a közepes szabad úthossznak feleltethető meg, míg egy speciális fononhidrodinamikai közelítés miatt $\eta_2 = 2\eta_1$, vagyis az $\eta_{1,2}$ paraméterek nem lineárisan függetlenek, ellentétben a kontinuumelméleti megközelítéssel. Az $\eta_2 = 2\eta_1$ összefüggésből az is kiolvasható, hogy bármely $\eta_1 = \eta_1(T)$ esetén az η_2 ugyanezt a függést örökli (amennyiben ez a kinetikus elméleti számolásokban megvalósítható). Fontos hangsúlyozni, hogy a kinetikus elméletben a GK-egyenlet egy hidrodinamikai közelítés, tehát megengedi a hőáram örvényességét is, ami például szuperfolyékony közegek modellezése esetén fontos. Az itt tárgyalt kontinuum-megközelítésben ez a kényszer nem áll fenn. A (2.21)-(2.22) GK-egyenlet fenntartja a lehetőségét, hogy figyelembe vegye az összes, kinetikus elmélet által adott kényszert, de hangsúlyozom, hogy ez csak lehetőség, ettől a kontinuummodell sokkal több mindent is megenged. Ez a szabadság az effektív modellezés és a nemlinearitások szintjén mutatkozik meg.

Az $\eta_{1,2}$ paraméterek kontinuum keretbeli jelentését újfent a T-reprezentáció teszi átláthatóvá, azaz

$$\tau\partial_{tt}T + \partial_t T = a\Delta T + (\eta_1+\eta_2)\partial_t\Delta T + \frac{1}{\rho c_v}\Big(q_V + \tau\partial_t q_V - (\eta_1+\eta_2)\Delta q_V\Big), \quad (2.26)$$

ahol a teljesség kedvéért a $q_V = q_V(\mathbf{r},t)$ térfogati hőforrást is figyelembe veszem. Egyrészt, effektív szempontból az $(\eta_1+\eta_2)/\tau$ paraméterek egy újabb diffúziós időskálát szabnak meg, ami a klasszikus a hőfokvezetési tényezővel összemérhető, ezek egyfajta statikus és dinamikus hőfokvezetési tényezők, amelyek megjelenése a hővezetési folyamatok sebességétől függ. Ez azt jelenti, hogy a lassú folyamatok esetén a dinamikus $(\eta_1+\eta_2)/\tau$ skála elhanyagolható, ellenben gyors folyamatoknál a dinamikus skála fog dominálni, analóg módon a mechanikában is ismert statikus és dinamikus Young-modulussal [79]. További újdonság, hogy kiterjesztett hővezetési egyenletek esetén a q_V hőforrásnak egyéb járulékai is megjelennek, ami tovább erősíti a T-reprezentáció elkerülését és az egyenletek rendszerében való gondolkodást. A (2.26) egyenlet $\eta_{1,2} = 0$ együtthatók esetén közvetlenül az MCV-egyenletre egyszerűsödik. Kontinuum szempontból az $\eta_{1,2}$ együtthatók további méretskála bevezetését jelentik, de ennek a jelentősége a heterogén anyagok modellezésében csekély, így ezzel az interpretációval nem kívánok hosszabban foglalkozni.

A kontinuum-megközelítés-alapú GK-egyenlet jelentőségét az adja, hogy egyrészt effektív interpretációjában jól használható heterogén anyagok modellezésére a második diffúziós időskála miatt, a kinetikus elméleti háttér hiánya az együtthatók sokkal rugalmasabban kezelését is megengedi. Másrészt kompatibilis a kinetikus elméleti párjával, amit így az adott modellezési feladatnak megfelelően figyelembe lehet venni, és ezáltal az alacsony hőmérsékletű rendszerekre, szilárd közegekre és folyadékokra egyaránt alkalmazható. Újra felhívom a figyelmet a korábban említett ablakfeltételre, amely segítségével meg lehetett becsülni, hogy milyen frekvenciatartományban figyelhető meg hullámterjedés. Ez a tulajdonság egyben azt is jelenti,

hogy a Fourier-tól eltérő viselkedés megjelenése függ a peremfeltételekben megjelenő időskáláktól is, például egy hőimpulzus hosszától. Ez összhangban van az előbb említett statikus és dinamikus jellemzők interpretációjával, valamint az ismert alacsony hőmérsékletű kísérleti eredményekkel is [18, 31, 80, 81].

2.2.2. Jeffreys-egyenlet

Az alternatív hővezetési modellek sorában az úgynevezett Jeffreys-egyenlet következik, ami az előzőekben bemutatott módszertanon keresztül szintén levezethető. Ehhez újfent szükség van az állapottér kiterjesztésére, az e fajlagos belső energián kívül még egy $\boldsymbol{\xi}$ vektoriális belső változót is figyelembe kell venni,

$$s = s_0(e) - \frac{k}{2\rho}\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi}, \quad k \in \mathbb{R}_0^+ \tag{2.27}$$

ahol a $\boldsymbol{\xi}$-hez most nem rendelek olyan pontos fizikai jelentést, mint a hőáramhoz. Ez egy általános eljárás az úgynevezett belső változós módszertan keretein belül. A második főtétel ennek ellenére megszorítást ad $\boldsymbol{\xi}$ időfejlődésére, valamint lineáris esetben $\boldsymbol{\xi}$ könnyen kiküszöbölhetővé válik [74]. Ahogy a GK-egyenlet esetén is, úgy most is fennáll az, hogy (2.27)-ben nem kötelező a ρ-val való osztást bevezetni. Ellenben, az entrópia áramsűrűsége marad a klasszikus $\mathbf{q}/T$ formában. Így a σ_s entrópiaprodukcióra az adódik, hogy

$$\sigma_s = -k\boldsymbol{\xi}\partial_t\boldsymbol{\xi} + \mathbf{q}\cdot\nabla\frac{1}{T} \geq 0, \tag{2.28}$$

ahol a Curie-elvet újra alkalmazva egy $\mathbf{q}$ és a $\boldsymbol{\xi}$ között egy csatolt egyenletrendszert kapunk:

$$\mathbf{q} = l_{11}\nabla\frac{1}{T} + l_{12}(-k\boldsymbol{\xi}), \tag{2.29}$$

$$\partial_t\boldsymbol{\xi} = l_{21}\nabla\frac{1}{T} + l_{22}(-k\boldsymbol{\xi}). \tag{2.30}$$

Ezt nevezem a Jeffreys-egyenlet onsageri alakjának, ami egy igen érdekes egyenletrendszer. Egyfelől, a $\boldsymbol{\xi}$-t a (2.29) úgy definiálja, mint a $\mathbf{q}$ hőáramsűrűség és a hőmérséklet gradiensének a különbségét, más szóval a Fourier-féle és a Jeffreys-féle hőáramsűrűség nem ugyanaz. A (2.30) egyenlet megadja $\boldsymbol{\xi}$ időfejlődését, valamint az együtthatókra a második főtétel a

$$l_{11} \geq 0, \quad l_{22} \geq 0, \quad l_{11}l_{22} - l_{12}l_{21} \geq 0 \tag{2.31}$$

megkötéseket teszi a pozitív szemidefinitás kielégítése miatt. Összességében véve a (2.29)-(2.30) egyenleteket tekintem a Jeffreys-egyenlet alapvető formájának. Ha a (2.27)-ben nem veszem figyelembe a ρ-val való osztást, akkor viszont a (2.30) egyenlet bal oldalán jelenik meg $\rho\partial_t\boldsymbol{\xi}$-ként, ez szintén modellezési választás kérdése.

Lineáris esetben, ahol az l_{ij} $(i,j = \{1,2\})$ együtthatók mind konstansok, a $\boldsymbol{\xi}$ kiküszöbölése után a Fourier-törvény átláthatóbb általánosítására jutunk. Elsőként az $1/T$ deriválásának elvégzése nélkül kapjuk, hogy

$$\tau\partial_t\mathbf{q} + \mathbf{q} = \tilde{\lambda}_1\nabla\frac{1}{T} + \tilde{\lambda}_2\partial_t\nabla\frac{1}{T}, \tag{2.32}$$

amiben az együtthatók

$$\tau = \frac{1}{l_{22}k}, \quad \tilde{\lambda}_1 = \frac{\det l_{ij}}{l_{22}}, \quad \tilde{\lambda}_2 = l_{11}\tau \tag{2.33}$$

módon alakulnak. Az $1/T$ deriváltjai után megjelenő $1/T^2$ tagot – főleg az utolsó vegyes deriváltak esetén – már konstansként is kezelhető egy T_0 referenciahőmérsékletet véve. Ezzel a feltétellel, a GK-egyenlettel ellentétben, már konstitutív szinten is jól láthatóvá válik a statikus és dinamikus időskála,

$$\tau\partial_t\mathbf{q} + \mathbf{q} = -\lambda_1\nabla T - \lambda_2\partial_t\nabla T, \tag{2.34}$$

amiben

$$\lambda_1 = \frac{\tilde{\lambda}_1}{T_0^2}, \quad \lambda_2 = \frac{\tilde{\lambda}_2}{T_0^2}. \tag{2.35}$$

Így (2.34) formailag tartalmazza a Fourier-törvényt, és annak idő szerinti deriváltját is. Egy igen fontos megállapítás az, hogy lineáris esetben a GK- és a Jeffreys-egyenletek kiegészítik egymást. A GK-egyenlet egy statikus és dinamikus hőfokvezetési tényezőt, a Jeffreys-egyenlet azonban egy statikus és dinamikus hővezetési tényezőt tartalmaz. Nemlineáris esetben a két modell lényegesen eltérő tulajdonságokkal rendelkezik.

Érdemes még a Jeffreys-egyenlet T-reprezentációját is megvizsgálni, amely

$$\tau\partial_{tt}T + \partial_t T = a_1\Delta T + a_2\tau\partial_t\Delta T, \quad a_1 = \frac{\lambda_1}{\rho c_v}, \quad a_2 = \frac{\lambda_2}{\tau\rho c_v} \tag{2.36}$$

alakot ölti a (2.7) mérlegegyenletet felhasználva. Az utolsó tagban szándékos a τ relaxációs idő beemelése, ugyanis ezzel a kombinációval az a_2 mértékegysége egyezni fog az a_1 hőfokvezetési tényezővel, és így értelmezhetővé válik a statikus és dinamikus hőfokvezetési tényezők megjelenése is. A (2.36) azt mutatja, hogy a Jeffreys-egyenlet effektív modellezési szempontból, térfogati hőforrások nélkül, lineáris esetben analóg lehet a GK-egyenlettel. Más szóval, eltérő hőárammezővel ugyanarra a hőmérsékleteloszlásra vezethet, de ennek feltétele, hogy a GK-egyenlet esetén a hőáramsűrűség örvénymentes maradjon. Mivel a gyakorlat számára a hőárammező lényegesen kisebb jelentőséggel bír, ezért ez a különbség nem lesz döntő fontosságú. Szintén lényeges tulajdonság, hogy bár a λ_2 együttható lehet nulla, vagyis vissza lehet kapni a Cattaneo-egyenletet, de ha a $\tau = 0$, akkor egyből a Fourier-törvényre redukálódik a modell. Ez csak az onsageri egyenletek szintjén látszik, a (2.36) T-reprezentáció ezt teljesen elfedi.

2.2.3. A 2-hőmérsékletű modell

Megkerülhetetlen alternatívát jelent a 2-hőmérsékletű modell, amellyel a GK-, valamint a Jeffreys-egyenlettel olyan módon analóg, hogy szintén két időskálát vezet be, de nem a Fourier-törvény általánosításán keresztül. A modellezési elképzelés

szerint a vizsgált rendszer két eltérő komponensre bontható, eltérő hőkapacitás-sűrűségekkel, hővezetési tényezőkkel, melyekre külön-külön igaz marad a Fourier-törvény. A két komponens a mérlegegyenleten keresztül egy hőátadási tagon keresztül csatolódik, azaz a (2.7) és a (2.4) egyenleteket felhasználva,

$$\rho_i c_i \partial_t T_i + \nabla \cdot \mathbf{q}_i = -h(T_i - T_j), \quad \mathbf{q}_i = -\lambda_i \nabla T_i, \quad i,j = \{1,2\}, i \neq j, \tag{2.37}$$

ahol h fejezi ki a két komponens közötti "térfogati" hőátadási tényezőt (ami nem egyezik a korábbiakban bevezetett α hőátadási tényezővel). A (2.37) T-reprezentációja, például az első komponensre további hőforrások bevezetése nélkül,

$$\tau \partial_{tt} T_1 + \partial_t T_1 = \Lambda \Delta T_1 + l^2 \partial_t \Delta T_1 - \gamma \Delta \Delta T_1, \tag{2.38}$$

a

$$\tau = \frac{\rho_1 c_1 \rho_2 c_2}{h(\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2)}, \quad \Lambda = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2}, \quad l^2 = \tau(a_1 + a_2), \quad \gamma = \tau a_1 a_2, \tag{2.39}$$

valamint az $a_1 = \lambda_1/(\rho_1 c_1)$ és $a_2 = \lambda_2/(\rho_2 c_2)$ együtthatókkal azt sugallja, hogy a (2.38) egyenlet lefedi a GK- és Jeffreys-egyenleteket, az utolsó tagban való eltéréssel. Ez egy igen félrevezető elképzelés, és az analógia csupán formális. Érdemes megfigyelni, hogy az együtthatók egyáltalán nem függetlenek egymástól, a hőkapacitás-sűrűségek és a hővezetési tényezők alkotják, ellentétben a GK- és Jeffreys-egyenletekkel, ahol az együtthatók lineárisan függetlenek egymástól. A 2-hőmérsékletű modell esetén értelmes még az átlaghőmérséklet bevezetése is,

$$\bar{T} = \frac{\rho_1 c_1 T_1 + \rho_2 c_2 T_2}{\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2} \tag{2.40}$$

módon, az egyes komponensek hőkapacitásaival súlyozva. Az átlaghőmérséklet emiatt akkor is értelmes marad, ha a h csatoló hőátadási tényező zérus, a komponensek egymástól szigeteltnek tekinthetőek.

A (2.37) hallgatólagosan magába foglalja azt is, hogy az egyes komponensek térben összefüggőek, ugyanis az egyes komponenseken belül hővezetést ír le. Ez a tulajdonság egy rétegelt kompozit esetén teljesülhet, de egy fémhab esetén már csak akkor, ha nyílt cellás szerkezetről beszélünk. Zárt cellás habok esetén az üregek csak a mátrixanyagon keresztül vannak kapcsolatban egymással, így ez a feltétel sérül.

A két hővezető komponens felírása nem jelenti azt, hogy a rendszer kizárólag két komponensből állhat, például egy kőzet esetén elképzelhető, hogy a vizsgált test számos további komponenst is tartalmaz. Ilyenkor a két hővezetési komponens külön-külön is lehet effektív, vagyis magukba foglalhatnak eredő, többkomponensű rendszereket is, ilyen lehet például egy szemcsékkel erősített fémhab, amelyben a mátrixanyagnak az effektív tulajdonságait tekinthetjük [82, 83]. Az elvárás az, hogy végül kettő hővezetési skálára redukálható legyen a vizsgált többkomponensű test (ez igaz a GK- és a Jeffreys-egyenletekre is).

A modell kritikus eleme a vizsgált test ismert szerkezetére, összetevőire vonatkozik. Tisztán kétkomponensű esetben az egyes komponensek pontos ismeretére elengedhetetlenül szükség van [83]. Ha ez a szituáció nem áll fenn, akkor mérések útján az ismeretlen paraméterek egyértelműen nem meghatározhatóak. Ez könnyen belátható a (2.40) *átlaghőmérséklet definíciójából. Egy mért átlaghőmérséklet bármilyen hőkapacitás-sűrűség kombinációval leírható, függetlenül a részrendszerek hőmérsékletétől.*

Továbbá, kettőnél több komponensű rendszer modellezése esetén az egyes részrendszerekre vonatkozó effektív paraméterek meghatározása szintén nehézségekbe ütközhet. Visszatérve a szemcsékkel erősített kompozitra, a szemcsék térfogataránya nem elegendő, mivel apróbb szemcsék alkalmazása esetén több kontaktfelület alakul ki, amelyek további kontaktellenállásokat hoznak létre [82].

A kezdeti és a peremfeltételek esetén további kérdések merülnek fel. Kétkomponensű rendszer esetén a feltételeket komponensenként kell megadni. Mivel az egyes komponensek például eltérő sugárzáselnyelő és kibocsátó tulajdonságokkal rendelkeznek, ezért a hőmérsékleti sugárzás kezelése a feladatot jelentősen bonyolítja. Térfogati hőforrások esetén szintén problémába ütközünk, például egy helyfüggő hőforrás leírása a komponensek határfelületein a folytonossági határok megszakadása miatt igen nehéz lehet. Egy habos szerkezetű anyagnál, még ha csak az egyik komponensben is írjuk elő a hőforrást, akkor is a teljes test egészére értendő (azaz a teljes mátrixanyagra), emiatt a hőforrások kezelése igen körülményessé válik. Kettőnél több komponensű rendszerben tovább nehezedik a feladat, akár a hőforrások, akár a mellékfeltételek helyes megadása esetén. Ugyancsak érdekes, de kihívást jelent a mérlegegyenletben lévő h hőátadási tényező kérdése is, amely nagyságrendjére egyáltalán nincsenek megkötések, így akár 10^{-2} – 10^{6} W/(m^3 K) között változhat, akár helyfüggő módon is.

Ezen tulajdonságok miatt a 2-hőmérsékletű modell alkalmazási lehetőségei rendkívül leszűkülnek, és a hagyományos hővezetési-hőfokvezetési tényező mérések kiértékelésére nem használható. Emiatt a továbbiakban nem kívánok erre a modellre nagyobb hangsúlyt fektetni, és nem is kívánom a Fourier-törvény alternatívájaként feltüntetni, az ismert matematikai és fizikai tulajdonságai ellenére.

Végül megjegyezem, hogy a szakirodalomban nem szokás a bemutatott 2-hőmérsékletű modell konzisztens irreverzibilis termodinamikai levezetését tárgyalni, amelyben a Curie-elv miatt a $\mathbf{q}_{1,2}$ hőáramsűrűségek csatolódnának. Az ok a modellbe impliciten beleértett tulajdonságban rejlik: a két komponens térben szeparált egymástól, ilyen módon nem keverékként tekintünk a vizsgált testre, ellentétben például a gázkeverékekkel, ahol a $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$ összeg értelmes és használatos.

A szakirodalomban további 2-hőmérsékletű modellek is ismertek [32, 59, 84], de azok már az MCV-, valamint a GK-egyenletek csatolását tartalmazzák, amelyekben kettőnél már lényegesen több a megjelenő hővezetési időskála, emiatt az ismeretlen paraméterek száma is, és így azok gyakorlati felhasználása további problémákba ütközik. Ezekről röviden, a teljesség kedvéért, a következő alfejezetben ejtek szót.

2.2.4. Duális fáziskésésű modell

A két időskálás modellek áttekintésekor az úgynevezett duális fáziskésésű modell (DPL - az angol "dual phase lag" rövidítéseként, a szakirodalomban ez a rövidítés terjedt el) [85, 86] szintén valódi alternatívának tűnhet, de a kapcsolódó hővezetési egyenletek nem egy konzisztens irreverzibilis termodinamikai levezetés eredményeként adódnak. Habár ez a tulajdonság a 2-hőmérsékletű modellre is igaz, de a Fourier-törvény jól ismert, és a modell viselkedése nem ütközik olyan módon a termodinamika főtételeibe, mint a DPL-egyenlet esetén. Ugyanis a DPL-egyenletnél a

kiindulási pont egy olyan konstitutív összefüggés, amely önmagában nem megoldható. Ezt a

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t + \tau_q) = -\lambda \nabla T(\mathbf{r}, t + \tau_T) \tag{2.41}$$

formában szokás megadni, ahol a τ_q és τ_T ismeretlen relaxációs idő paraméterek, az indexek tükrözik, hogy melyik mezőhöz tartoznak. Az alapötlet szerint a (2.41) egyenlet bal és jobb oldala az idő szerint egyaránt tetszőleges rendig Taylor-sorba fejthető. Ez az eljárás alapvetően nem kompatibilis a termodinamikai elvekkel, emiatt két eset lehetséges. Az első esetben minden feltétel nélkül instabil modellre jutunk, azaz bármely relaxációs idő párnál az egyenlet még közelítően sem lesz megoldható. A második esetben tisztán matematikai eredetű stabilitási feltételeket kapunk, amelyeknek nincs igazi fizikai tartalmuk, de a modell megoldhatóvá válik. Ezeket a feltételeket a [6, 87] szakirodalmak foglalják össze. Példaként tekintsük a $\{2, 1\}$-típusú DPL modellt, amely azt jelenti, hogy a bal oldalon másodrendig, a jobb oldalon első rendig történik a sorfejtés, azaz

$$\frac{\tau_q^2}{2} \partial_{tt} \mathbf{q} + \tau_q \partial_t \mathbf{q} + \mathbf{q} = -\lambda \nabla T - \lambda \tau_T \partial_t \nabla T, \tag{2.42}$$

amelyhez a

$$\frac{\tau_T}{\tau_q} \geq \frac{1}{2} \tag{2.43}$$

stabilitási feltétel kötődik, de a $\{2, 2\}$-típusú esetén ez a

$$2 + \sqrt{3} > \frac{\tau_T}{\tau_q} > 2 - \sqrt{3} \tag{2.44}$$

alakra módosul. Magasabb rendű sorfejtések esetén a feltételek rendkívüli módon elbonyolódnak, és nem átláthatóak. Érdemes megjegyezni, hogy a DPL modell első bevezetésekor Tzou [85, 86] bármely $\tau_q > \tau_T$ és $\tau_q < \tau_T$ esetet megengedve interpretálta a modell jelentését, félrevezetően. A vonatkozó szakirodalom azóta olyan méretűre duzzadt, hogy a modellek egységesítése és letisztázása, valamint a DPL-hez hasonló termodinamikailag inkompatibilis megközelítések kivezetése valószínűleg csak az igen távoli jövőben történhet meg.

Az előzőekben bemutatott GK- és Jeffreys-egyenletekkel összevetve be kell látni – túl a stabilitási feltételeken – hogy az együtthatók közötti összefüggések a termodinamikai háttér hiánya miatt nem látszanak. A stabilitási feltételek megkeresése igen fáradságos, és nem univerzálisak. Anizotrop vagy nemlineáris esetek tárgyalása a modellben ezen tényezők miatt kizárható, konzisztens termomechanikai csatolás nem valósítható meg. Mindemellett további, fizikai (téridőbeli) problémák is vannak [88], és tulajdonképpen a DPL-egyenlet nem lehet a Fourier-törvény érvényes és általánosan használható alternatívája, annak ellenére sem, hogy az $\{1, 1\}$-típusú DPL modell a lineáris Jeffreys-egyenletre vezet. Emiatt a továbbiakban a DPL modellel nem foglalkozom tovább.

2.3. Kettőnél több időskálás hővezetési modellek

Mivel a dolgozat nem használja ki a kettőnél több időskálát tartalmazó hővezetési modellek ismeretét, ezért itt csak a teljesség kedvéért, a jobb átláthatóságért és összevethetőségért, röviden összefoglalva mutatom be a lényegesebb modelleket. Ezt azért is tartom fontosnak, mivel a hazai szakirodalmi források ilyen tekintetben igen szerények. Részletesebb áttekintésekért a [6, 19, 89–91] szakirodalmakat ajánlom.

A két időskálás modellek esetén vagy két effektív diffúziós jelenség skáláit, vagy egy diffúziós és egy hullámterjedési jelenség skáláit tekintettem át, amik közül mérnöki szempontból az előbbi bír nagyobb jelentőséggel. A kettőnél több időskálás modellek esetén a második hang mellett a ballisztikus vagy egyéb termomechanikai jelenség jellemző időskálája jelenik meg. Ez kontinuum-termomechanikai oldalról magával hozza a másodrendű tenzoriális mennyiségek (mezők) bevezetését, de ennél tovább nem lép, ellentétben a kinetikus elméleti alapokon nyugvó fononhidrodinamikai megközelítéssel [12, 27]. Ugyanis, habár a jelenségek szintjén nem ad bővebb leírást, mégis alapvetően a Boltzmann-egyenlet momentumsorfejtésén keresztül egy olyan modellt vezet be, amely tetszőleges, megszámlálhatóan végtelen sok időderiváltat tartalmaz egyre növekvő tenzori rendű mennyiségekkel. Ez matematikailag, egy térdimenzióban a

$$\frac{\partial u_{\langle m\rangle}}{\partial t}+\frac{m^2}{4m^2-1}v\frac{\partial u_{\langle m-1\rangle}}{\partial x}+v\frac{\partial u_{\langle m+1\rangle}}{\partial x}=\begin{cases}0 & m=0\\ -\frac{1}{\tau_R}u_{\langle 1\rangle} & m=1\\ -\left(\frac{1}{\tau_R}+\frac{1}{\tau_N}\right)u_{\langle m\rangle} & 2\leq m\leq M\end{cases}, \tag{2.45}$$

alakot ölti, ahol v a fononok Debye-sebessége[6], valamint u az egyes momentumokat jelöli (például energia, impulzus, nyomás), de nem minden momentumhoz lehet explicit fizikai jelentést társítani, analóg módon a belső változós módszertannal. Továbbá $\langle\ \rangle$ jelöli az egyes tenzorok szimmetrikus nyomtalan részét, és M egy tetszőleges természetes szám lehet, $M = 30$ esetén kapható meg a hangsebesség elfogadható szintű közelítése. Ez a valóságban egészen harmincadrendű tenzori rendig tartó mezők kezelését követeli meg, a kezdeti és peremfeltételekkel együtt.

A korábbiakban emlegetett normál és rezisztív ütközések a τ_R és τ_N relaxációs időkben, valamint azok kombinációjában nyilvánulnak meg. A (2.45) egyenletrendszert az elmélet úgy építi meg, hogy bármely csonkolásos lezárás eredményeként (tetszőleges M esetén a legmagasabb tenzori rendű mennyiséget nullának választva) hiperbolikus rendszert kapjunk eredményül, emiatt a parabolikus modellek csak azok hiperbolikus kiterjesztésével férnek a (2.45) egyenletrendszerbe. Szintén a megközelítés érdekessége, hogy habár végtelen sok időderiváltat tartalmazhat, jelenségek szintjén mégis csak a három alapvető hővezetési mechanizmust írja le, a diffúziós, a második hang, valamint a ballisztikus terjedést, de minden momentumnak saját időskálája van. Ilyen a kontinuumelméletekben nem fordul elő, és ez élesen kihat a modellek interpretációjára, valamint gyakorlati alkalmazására is, hiszen (2.45)-höz igen nehéz (már ha lehetséges) a megfelelő fizikai tartalommal bíró kezdeti és peremfeltételek kijelölése, valamint azok megoldása, főleg $M > 2$ esetén.

[6] A transzverzális és a longitudinális terjedési sebességek kombinációjából adódik ki.

A (2.45) rendszer $M = 2$ esetére vonatkozó kontinuum megfelelője [14, 92]:

$$\rho\partial_t e + \partial_x q = 0, \tag{2.46}$$
$$\tau_q\partial_t q + q = -\lambda\partial_x T + l\partial_x Q, \tag{2.47}$$
$$\tau_Q\partial_t Q + Q = l\partial_x q, \tag{2.48}$$

ahol a Q három térdimenzióban egy másodrendű tenzor, és a $\mathbf{q}$ gradiensével arányos; valamint l egy térskálát jelöl, a fononhidrodinamikai megközelítésben ez megegyezik a közepes szabad úthosszal. Amennyiben τ_Q relaxációs időt nullának választjuk, az azt jelenti, hogy a Q mezőhöz tartozó folyamatok végtelen gyorsan játszódnak le, azaz a Q azonnal relaxált állapotba kerül, és így a Q értelmezése egybecseng a GK-egyenlet kapcsán a $\mathbf{B}$ áramszorzóról tett megállapításokkal. A (2.47)-(2.48) egyenletek közvetlenül visszaadják a GK-egyenletet (helyesebben szólva annak egy térdimenziós változatát). Speciális esetekben a τ_q és τ_Q relaxációs idők megfeleltethetőek a τ_R és τ_N rezisztív és normál ütközések karakterisztikus idejének a (2.45) egyenletrendszerrel való összevetés alapján, de a kontinuum-megközelítés ezeket szabad (de pozitív szemidefinit) paraméterként kezeli. Az l térskála egy kontinuummodellben a mérési eredményekhez illeszthető paraméter, például ennek segítségével, adott τ_q és τ_Q esetén, a terjedési sebesség pontosan beállítható, mint kísérletileg megfigyelt tény (amelyhez a korábban bemutatott hiperbolicitási tulajdonságokat kiválóan fel lehet használni). Ezzel szemben a fononhidrodinamikai megközelítésben ez egy fix paraméter, és emiatt lényegesen több egyenletre van szükség a terjedési sebességek pontos megadásához. A két megközelítés tehát itt élesen elválik egymástól, és ez nagyban elősegítette az úgynevezett NaF kísérletek kontinuummodellel történő kiértékelését [93]. Ezek a kiértékelések rávilágítanak a τ_q és τ_Q relaxációs idők hőmérséklettől való függésére is. Az ilyen típusú nemlinearitásokról bővebben a következő fejezetben lesz szó.

Az időskálák száma a 2-hőmérsékletű modellek kiterjesztéseiben tovább növekszik. Hasonlóan a (2.37) modellhez, dupla Fourier-egyenlet helyett dupla MCV-, vagy akár GK-egyenleteket is tekinthetünk, ami főleg elektron-fonon rendszerek viselkedését hivatott jellemezni [84], erre utalnak az "e" és "f" indexek is:

$$c_v T = c_{v,e}T_e + c_{v,f}T_f, \quad c_v = c_{v,e} + c_{v,f}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}_e + \mathbf{q}_f, \tag{2.49}$$

valamint a kapcsolódó fejlődési egyenletek,

$$\rho_e\partial_t e_e + \nabla\cdot\mathbf{q}_e = \bar{h}(T_e - T_f), \tag{2.50}$$
$$\rho_f\partial_t e_f + \nabla\cdot\mathbf{q}_f = \bar{h}(T_f - T_e), \tag{2.51}$$
$$\tau_i\partial_t\mathbf{q}_i + \mathbf{q}_i = -\lambda_i\nabla T_i, \quad (i = e, f), \tag{2.52}$$

amelyben a csatolást szintén egy hőátadás jellegű tagon keresztül valósítják meg. Következésképpen, a modellben két diffúziós és két hullámterjedési (második hang) időskála jelenik meg, valamint a hőátadáshoz, mint csatoláshoz is tartozik egy karakterisztikus időállandó. A (2.37) 2-hőmérsékletű rendszer esetén megfogalmazott kritikák most is érvényesek, és a kapcsolódó problémák csak bonyolultabbá válnak minden egyes kiterjesztési lehetőség hozzáadásával.

Egy harmadik, természetes alternatíva is van a ballisztikus terjedés figyelembevételére vonatkozóan [94–96]. Ez nem más, mint az MCV-egyenlet hőtágulással kiegészített modellje, vagyis ebben a fajlagos belső energia

$$e = cT + \frac{E}{2\rho}\varepsilon^2 + \frac{E\beta}{\rho}T_0\varepsilon, \tag{2.53}$$

már tartalmazza az ε-nal jelölt fajlagos alakváltozást (egy térdimenziós esetben), az E Young-modulust, a β hőtágulási együtthatót, valamint egy T_0 referencia-hőmérsékletet [97, 98]. Itt újra hangsúlyozom, hogy egy ilyen termomechanikai esetben a transzportegyütthatók fajlagos belső energiától való függése magával hozza például a fajlagos alakváltozástól való függést is, és ez már a Fourier-egyenlet szintjén is megjelenhet, de ezt mélyebben a dolgozat nem tárgyalja. Ez az előbbiekben említett NaF kísérletek modellezésére szintén alkalmas megközelítés [94], és egyben világosabb fizikai tartalommal is rendelkezik, szemben a fononhidrodinamikai megközelítéssel vagy az azzal analóg, Q, mint a hőáram áramát tartalmazó (2.46)-(2.48) egyenletekkel.

2.4. Összefoglalás

A dolgozatom a GK- és Jeffreys-egyenletekre építve fog tovább haladni, mivel úgy tekintek ezekre a modellekre, mint a Fourier-egyenlet valós, mérnöki szempontból is jól használható alternatíváira a két diffúziós időskála jelenléte miatt; emiatt ezek mélyebb termodinamikai bemutatása elengedhetetlen volt. A 2-hőmérséklet és a DPL modelleket a lehetséges alternatívák közül biztonsággal ki tudom zárni. A kutatási eredményeim nem a modellek levezését tekintve újak – azok már tőlem sokkal hamarabb a szakirodalom részét képezték – hanem a megközelítés miatt, ahogy a modelleket kezelem, és így a következő szakterületi ajánlásokat, mint a saját tudományos eredményeimet tudom megfogalmazni.

1. Tézis – A Fourier-egyenleten túli modellek definiálása

Kimutattam, hogy a Fourier-egyenleten túli modelleket azok onsageri alakjával kell definiálni, ami egyértelműsíti a termodinamikai erők és áramok közötti összefüggéseket, a makroszkopikus transzportegyütthatók közötti kapcsolatokat, valamint a kezdeti és peremfeltételek fizikai tartalmát. Az onsageri alak mellé meg kell adni a modellhez tartozó állapotteret. A transzportegyütthatók állapotfüggését onsageri szinten kell definiálni.

Az 1. tézishez kapcsolódó publikációk: [6, 14, 63, 74, 99–103].

2. Tézis – A két diffúziós időskálával rendelkező modellek értelmezése

Megállapítottam, hogy a Guyer–Krumhansl- és Jeffreys-egyenletek, mint két időskálás modellek megkülönböztetnek statikus és dinamikus hővezetési és hőfokvezetési tényezőket. Mivel meglátásom szerint a Guyer–Krumhansl- és Jeffreys-egyenletek esetében a Fourier-szám nem pontos és félreértésre ad okot, ezért a Fourier-szám elnevezést statikus és dinamikus időskálára javaslom módosítani.

A 2. tézishez kapcsolódó publikációk: [6, 103, 104].

3. fejezet

Az anyagi nemlinearitások szerepe

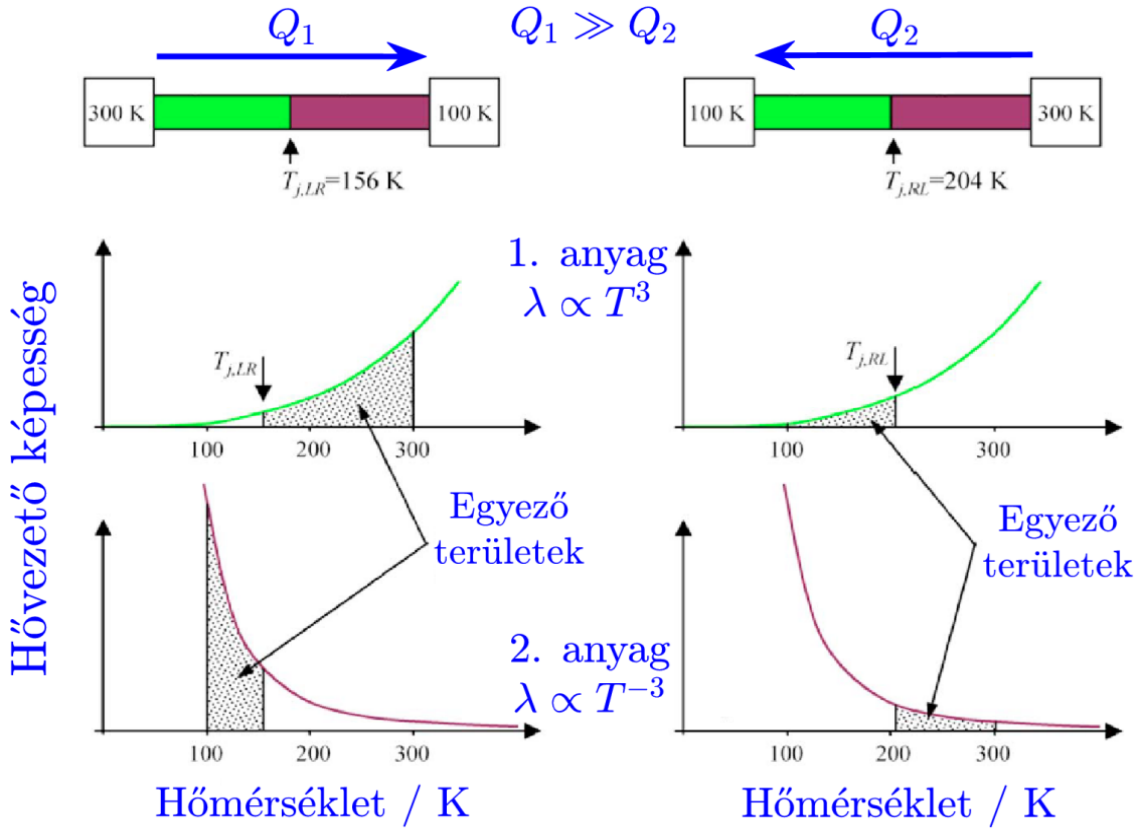
A Fourier-törvény és az azon túli modellek között több lényeges különbség is van, amelyeket a gyakorlati alkalmazásokban figyelembe kell venni. Korábban már említettem a kezdeti és peremfeltételeket, illetve azok definiálását, ezekkel részletesebben konkrét megoldásokon keresztül a következő fejezetben fogok foglalkozni. Ebben a fejezetben most az anyagi nemlinearitások kezelésére fókuszálok, mint például a transzportegyüttható hőmérséklettől való függésére. Ez azért is új és érdekes szempont, mert a Fourier-törvényben csupán egy transzportegyüttható található, a hővezetési tényező. Ez bizonyos speciális esetekben a hővezetési mechanizmus pontos ismeretének birtokában kiszámolható [12, 105], de általánosságban nem, és leginkább méréseken keresztül határozható meg.

Heterogén anyagok (például a különféle porózus szigetelések) esetén egy effektív hővezetési tényezőt mérhetünk ki, még akár az összenyomó erő függvényében is, megfigyelve, hogy a pórusok záródása milyen hatást gyakorol a hővezetési tényezőre [106]. A Fourier-féle hővezetési egyenletben (lineáris esetben) elég csak a hőfokvezetési tényezőt ismerni egy test tranziens viselkedésének a leírásához. Ezt szintén csak méréseken keresztül lehet megbízhatóan meghatározni, heterogén anyagok esetén ez is effektív jellemzővé válik. Ezt az effektív hővezetési tényezőt anyagszerkezettől függően igen sokféle mennyiség határozza meg (például habosított anyagok esetén az üregek helyzete, eloszlása, mérete, az azokat kitöltő anyagok), emiatt annak tisztán elméleti irányú meghatározása általános esetekre nem lehetséges, csakis az anyagszerkezet pontos ismeretében becsülhető speciális esetekben [105]. A helyzetet tovább nehezíti, hogy a hővezetési tényező függ az anyag állapotától is, például annak hőmérsékleti és nyomás viszonyaitól [77]. A Fourier-egyenlet esetén leggyakrabban a hővezetési tényező hőmérsékletfüggését szokás vizsgálni, ez mérések útján meghatározott anyagszerkezeti tulajdonság.

Fourier-egyenleten túli modellek esetén az állapottérnek nemcsak a fajlagos belső energia és azon keresztül a hőmérséklet, hanem a hőáramsűrűség is részét képezi, így a $\lambda = \lambda(T, \mathbf{q})$ összefüggés értelmes[1]. A $\mathbf{q}$-tól való függést például félvezetők vagy speciális nanoszerkezetű anyagok esetén értelmes figyelembe venni, ahol úgynevezett termikus diódákat, egyenirányítókat alakítanak ki erre a célra tervezett anizotrop

[1]Habár a dolgozatnak nem tárgya, de felvetődhet a kérdés, hogy ha egy anyag transzportjellemzője függ a benne kialakuló hőáramtól és annak irányától, akkor az objektivitási szempontokat (röviden csak megfigyelőtől való függetlenséget) milyen konstitutív összefüggés elégíti ki, főleg a Fourier-egyenleten túli esetekben [107–109].

vagy egyéb heterogén anyagi szerkezet segítségével [110–115]. Ekkor a hőtranszport mértéke függ a hőáram irányától is.



3.1. ábra. Felül látható a rendszer elrendezése és az alkalmazott hőmérséklet-peremfeltételek. Ha a két anyag jelentősen eltérő hővezetési képességgel rendelkezik, akkor a hővezetési tényező hőmérsékletfüggéséből adódóan a Q_1 és Q_2 hőáramok jelentősen eltérnek egymástól [116]. Az egyenlő területek azt mutatják, hogy mindkét anyagon ugyanaz a hőáram halad át.

Ennek létrehozásához elegendő egy egyszerűbb, speciális, de makroszkopikus esetet tekinteni, ami már elvben a Fourier-törvény esetén is meg tudja valósítani a termikus egyenirányítást, azaz elegendő hozzá a $\lambda = \lambda(T)$ összefüggésre és ennek következményeire koncentrálni. Ennek szemléltetéséhez egy olyan heterogén szerkezetet mutatok, amely két különböző anyagból áll és mindkét anyagnak figyelembe vesszük a $\lambda = \lambda(T)$ tulajdonságait. Részletes leírásért és további irodalomért a [116]-re hivatkozok, a következő példa és a 3.1. ábra is innen származik. Ezt a jelenséget az idézi elő, hogy a két anyag merőben eltérő $\lambda(T)$ függéssel rendelkezik, tehát a nemlinearitás kulcsfontosságú ahhoz, hogy egyfajta egyenirányítást lehet létrehozni. Mivel a szakirodalom ezt főként mikroszkopikus szinten vizsgálja, ezért egyrészt a Fourier-egyenleten túli modellek relevánsak, másrészt általában véve is a mérnöki gyakorlat számára fontos lehet az, hogy egy heterogén anyag effektív leírására használt Fourier-n túli modell hogyan viselkedik ilyen nemlineáris esetben. Emiatt ennek a fejezetnek a célja azt bemutatni, hogy a $\lambda(T)$ függés milyen következményekkel jár a GK- és Jeffreys-egyenletek szintjén.

3.1. MCV-egyenlet

A helyzet lényegesen bonyolultabbá válik már a legegyszerűbb kiterjesztett hővezetési modell esetén is. A GK-egyenlet onsageri alakját felidézve a modellt a

$$\mathbf{q} = l\left(-k\partial_t\mathbf{q} + \nabla\frac{1}{T} + \nabla\cdot\mathbf{B}\right), \tag{3.1}$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}}{2}(\nabla\mathbf{q} + (\nabla\mathbf{q})^{\mathrm{T}}) + \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{s}} - \mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}}{3}(\nabla\cdot\mathbf{q})\mathbf{1} + \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{d,A}}}{2}\epsilon : (\nabla\times\mathbf{q}), \tag{3.2}$$

egyenletek alapján definiáltam. Az alapvető nehézséget akkor lehet jobban átlátni, ha a $\mathbf{B}$ áramszorzót nullának tekintem (pontosabban szólva, ha egyáltalán nem is veszem figyelembe), akkor a modell az MCV-egyenletre egyszerűsödik,

$$\mathbf{q} = -lk\partial_t\mathbf{q} + l\nabla\frac{1}{T}, \tag{3.3}$$

amelyben a $\tau = lk$, $\lambda = l/T^2$ transzportegyütthatók jelentkeznek, valamint lehetőség van a ρ figyelembevételére is, ekkor $\tau = \rho lk$ adódik a korábbi, (2.10) egyenletnél részletezett gondolatmenetnek megfelelően.

A Fourier-törvényhez képest nem csak, hogy több a transzportegyütthatók száma (λ és τ), de ráadásul azok összefüggőek is, legalábbis annyira mindenképpen, hogy ha a λ hővezetési tényező hőmérsékletfüggővé válik, akkor a τ relaxációs idő is, viszont itt több választási lehetőség is van. Ismert $\lambda(T)$ esetén $l(T) = \lambda(T)T^2$ adódik, ami az $l(T)$ miatt öröklődik a τ relaxációs időre is, de ennek módja nem egyértelmű, és egy modellezési döntés köti meg. Ennek megfelelően döntés kérdése, hogy a $\tau(T)$ függvényt elfogadjuk-e olyannak, amilyennek $l(T)$-ből származna konstans k és ρ együtthatók mellett, vagy egy előírt vagy megmért függésre kell beállítani az utóbbi együtthatók felhasználásával. Ezen a ponton további döntéseket kell hozni. Egyrészt, ha a $k = k(T)$, akkor a konstitutív egyenlet levezetését újra kell kezdeni, mivel egy $\mathrm{d}k/\mathrm{d}T$-vel arányos járulék fog benne megjelenni [100],

$$\tau(T)\partial_t\mathbf{q} + \mathbf{q}\left(1 + \frac{l(T)}{2}\frac{\mathrm{d}k(T)}{\mathrm{d}T}\nabla\cdot\mathbf{q}\right) = -\lambda(T)\nabla T, \tag{3.4}$$

valamint megfontolandó, hogy az entrópiasűrűség (2.10)-szerinti konkáv eltolása milyen módon köti meg a $k(T)$ függvényt annak pozitív szemidefinitásán túl. A szakirodalom egyáltalán nem tekinti a $\nabla\cdot\mathbf{q}$ járulékot, és ez egy konzisztens termodinamikai háttér nélkül nem is látható meg. A $k(T)$ függvény helyett így lényegesen célszerűbb választásnak tűnik az, hogy ha k konstans, ezzel elkerülve a $\nabla\cdot\mathbf{q}$ járulékot és a kapcsolódó problémákat, de a (2.10)-ben nem osztunk le ρ-val. Emiatt $\tau = \rho lk$ adódik és a $k(T)$ helyett egy $\rho(T)$ függés látszik célszerűnek. Ez magával vonja azt, hogy a hőtágulást, mint alapvető termomechanikai jelenséget figyelembe kell venni. A [94] irodalomban ez motiválta a hőtágulással csatolt MCV-egyenlet kísérleti adatokon való tesztelését, ámbár lineáris keretek között. A $\rho(T)$ megléte nem feltétlenül igényli a teljes mechanikai háttér figyelembe vételét, de ekkor tisztában kell lenni azzal, hogy milyen módon csonkoljuk a rendszert. Ebből arra is lehet következtetni, hogy a megfelelő $\lambda(T)$ és $\rho(T)$ függésekkel rendelkező anyag megválasztása elengedhetetlen a ballisztikus hővezetés makroszkopikus megfigyeléséhez. Vélhetően az

alacsony hőmérsékleti viszonyok (< 20 K) mindenképpen szükségesek maradnak ahhoz, hogy a termomechanikai csatolás annyira erős legyen, hogy az már a kísérletileg is megfigyelhető tartományba esik.

Természetesen az is egy modellezési döntés, hogy az $l(T)$ függését nem származtatjuk át közvetlenül a τ-ra, de ekkor szintén egy csonkolt modell az eredmény, amely csonkolás a megfelelő termodinamikai háttér hiányában rejtve marad, vagy egy függetlennek gondolt $\tau(T)$ előírásával inkonzisztencia kerül be a modellbe. Végül megjegyzem, hogy az $l(T)$ függését egy inverznek látszó $k(T)$ függéssel nem lehet következmények nélkül "semmissé tenni". Azaz, ha $l(T) = aT$ és $k(T) = b/T$ alakú (ahol $a, b \in \mathbb{R}^+$), akkor az $l(T)k(T) = ab$ szorzatuk valóban független a hőmérséklettől, de a $k(T)$ függvény deriváltja és a kapcsolódó járuléka akkor is meg fog jelenni a modellben, tehát a τ hiába marad konstans, a modellt mégsem egyszerűsíti érdemben. Mindezek a tulajdonságok igazak maradnak a GK-egyenletre is, mivel az MCV-egyenlet annak egy $\mathbf{B} = \mathbf{0}$ határesete.

3.2. Guyer–Krumhansl-egyenlet

A követhetőség miatt megismétlem a GK-egyenlet onsageri egyenleteit,

$$\mathbf{q} = l\left(-k\partial_t \mathbf{q} + \nabla\frac{1}{T} + \nabla\cdot\mathbf{B}\right), \tag{3.5}$$

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}}{2}(\nabla\mathbf{q} + (\nabla\mathbf{q})^{\mathrm{T}}) + \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{s}} - \mathbf{L}^{\mathrm{d,S}}}{3}(\nabla\cdot\mathbf{q})\mathbf{1} + \frac{\mathbf{L}^{\mathrm{d,A}}}{2}\epsilon : (\nabla\times\mathbf{q}), \tag{3.6}$$

ahol az alábbiakban a $\mathbf{B}$ Nyíri-szorzóban az $\mathbf{L}$ tenzoriális együtthatókat az egyszerűség kedvéért skalárnak tekintem. Az MCV-egyenletre tett állítások kivétel nélkül most is igazak maradnak, ezeket most nem ismételem meg, ezen túlmenően azonban a GK-egyenletben lévő áramszorzó miatt további szempontokat is figyelembe kell venni.

Egyrészt, a (3.5)-(3.6) alakot tekintve az $l(T)$ függvény az L együtthatókat közvetlenül nem érinti, de a (2.24) formában (a $\mathbf{B}$ kiküszöbölése után) az η_1 és η_2 együtthatókban szerepet játszik a (3.5) következményeként. Ekkor egy lehetőség adódik arra, hogy a kívánt $\eta_1(T)$ és $\eta_2(T)$ függvényeket be lehessen építeni. Ez teljes egészében a kontinuum-megközelítés sajátja, a fononhidrodinamikai modellezésben sem a $\mathbf{B}$ áramszorzó (3.6) által adott alakja, sem az itt leírt szabadság nincs meg a kívánt nemlinearitások figyelembevételére. Mivel az η_1 és η_2 együtthatók a közepes szabad úthosszal közvetlenül arányosak, a fononok közötti elképzelt kölcsönhatások és azok állapotegyenlete teljes egészében megköti annak hőmérsékletfüggését[2].

További általános észrevétel, hogy habár a (3.6)-ban lévő minden L együttható ugyanannak a tenzornak a lineárisan független komponenseit reprezentálja, ezért fizikai szempontból válószerűbbnek tűnik, hogy ha az egyik hőmérsékletfüggő, akkor a többi is az. Viszont ez a keretrendszer megenged olyan speciális eseteket is, hogy bizonyos komponenseket konstansként kezeljünk. A kontinuum-termodinamikai szak-

[2] A félreértések elkerülése végett fontos tisztázni, hogy a fononok közepes szabad úthossza nem a rezisztív, hanem a normál ütközések relaxációs idejével arányos, így részben az ahhoz kapcsolódó hőmérsékletfüggés lesz releváns. Mindez csak relaxációs idő közelítésben érvényes, amikor a Boltzmann-egyenletben lévő ütközési integrál egyszerűsíthető [6, 12, 80].

irodalom nem jutott még el arra a szintre, hogy a (3.6) együtthatóinak hőmérsékletfüggését akár kísérletileg, akár elvi oldalról mélyebben elemezze. Ennek egyik oka az, hogy a GK-egyenlet kontinuumalapú tárgyalása még igen fiatal[3], első levezetése Ván Péterhez [8] köthető. A termodinamikai elmélet fejlesztésén túl a GK-egyenlet heterogén anyagokra vonatkozó effektív értelmezése még fiatalabb, összesen egy 10 éves múltra tekint vissza a [14,117–119] irodalmakkal kezdődően, amelyekből később több más elméleti és gyakorlati szempont fejlődött ki.

A fenti okok ellenére az alapvető szempontokat így is láthatóvá lehet és kell is tenni. A következőkben az egy térdimenziós esetet vizsgálom [63, 103], azaz

$$q = l\left(-k\partial_t q + \partial_x \frac{1}{T} + \partial_x B\right), \tag{3.7}$$

$$B = \tilde{L}\partial_x q, \tag{3.8}$$

ami a (3.5)-(3.6) rendszernek az egyszerűsített változata, valamint az $\tilde{L}$ feletti hullám egyrészt jelölésileg megkülönbözteti ezt az együtthatót a jellemző mérettől, másrészt arra utal, hogy az $\mathbf{L}$ lineárisan független részeinek összegeként kell erre tekinteni (vagyis az összes tenzoriális tag egybeesik). Ha $\tilde{L} = \tilde{L}(T)$, akkor (3.7) alapján

$$lk\partial_t q + q = -\frac{l}{T^2}\partial_x T + l\partial_x\left(\tilde{L}(T)\partial_x q\right) = -\frac{l}{T^2}\partial_x T + l\tilde{L}(T)\partial_{xx} q + l\frac{\mathrm{d}\tilde{L}(T)}{\mathrm{d}T}\partial_x T\partial_x q \tag{3.9}$$

alakul ki, azaz nem csupán egy együttható válik hőmérsékletfüggővé, hanem megjelenik benne a hőmérséklet gradiense is. Emiatt (3.9) átcsoportosítható úgy, hogy

$$lk\partial_t q + q = -l\left(\frac{1}{T^2} - \frac{\mathrm{d}\tilde{L}(T)}{\mathrm{d}T}\partial_x q\right)\partial_x T + l\tilde{L}(T)\partial_{xx} q, \tag{3.10}$$

ezáltal

$$\tau\partial_t q + q = -\tilde{\lambda}(T, q)\partial_x T + \eta(T)\partial_{xx} q \tag{3.11}$$

formában is felírható a GK-egyenlet, amiben a

$$\tau = lk, \quad \tilde{\lambda}(T, q) = l\left(\frac{1}{T^2} - \frac{\mathrm{d}\tilde{L}(T)}{\mathrm{d}T}\partial_x q\right), \quad \eta(T) = l\tilde{L}(T) \tag{3.12}$$

azonosításokat tehetjük meg. Itt $\tilde{\lambda}$-ot látszólagos hővezetési tényezőnek hívom, szándékosan megkülönböztetve az effektív hővezetési tényezőtől, mivel ezeket az együtthatókat két igen eltérő jelenségre leírására lehet használni. Heterogén anyagok esetén is lehetne az effektív hővezetési tényezőt látszólagosnak nevezni, mivel azt lehet mérni, de ebben a nemlineáris esetben a látszólagos hővezetési tényező jelentősen eltérő tulajdonságokkal rendelkezik. Ezeknek a tulajdonságoknak több, igen komoly következménye is van. A látszólagos hővezetési tényező nem csupán l/T^2 lesz, hanem azt az $\tilde{L}(T)$ függés módosítja, így még konstans l esetén is $\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}(T, q)$ függés figyelhető

[3] A kinetikus gázelmélethez, vagy az irreverzibilis termodinamika megszületéséhez képest viszonyítva.

meg, méghozzá egy igen speciális módon. A $\partial_x q$ háromdimenziós esetben a hőáramsűrűség gradiense, így akár előfordulhat olyan eset is, hogy a látszólagos hővezetési tényező nem kizárólag pozitív, és emiatt úgy tűnhet, mintha sértené a termodinamika második főtételét. Továbbá, a hőáramsűrűség gradiensétől való függés akár szélsőségesen meg is változtathatja a lokálisan megfigyelhető látszólagos hővezetési tényezőt, amelyre a hőimpulzuselvű kísérletek szintén egy jó példát szolgáltatnak. Habár a fenti megállapítások szélsőségesnek tűnhetnek, mégis tisztában kell lenni a modellek tulajdonságaival, hiszen a kísérletek kiértékeléséhez pontosan erre a matematikai és fizikai (termodinamikai) háttérre van szükség. Hangsúlyozom, hogy ezek a megállapítások a látszólagos hővezetési tényezőre érvényesek, a vizsgált testet felépítő anyag tulajdonságai ettől még nem válnak időfüggővé, és nem léteznek olyan esetek, hogy egy homogén test valódi hővezetési tényezője helyfüggő lenne. Viszont ezzel együtt is nehézségekbe fog ütközni a $\tilde{\lambda}$ és $\tilde{L}(T)$ együtthatók kísérleti meghatározása, de várhatóan a bemutatott termodinamikai háttér kellő iránymutatást tud adni a kísérleti elrendezésre és a kiértékelési módszertanra is. Ebből a szempontból azt látom célszerűnek, amit a gyakorlat a hővezetési tényező esetén is használ: a referencia-hőmérsékletet kis léptékben változtatva rajzolódik ki a transzportegyütthatók hőmérsékletfüggése. Látszólag ugyanez a módszertan a GK-egyenlet esetén is járható, de mivel ilyen irányban még nincsenek elérhető kísérleti adatok, ezért ez még csak feltételezés. Az onsageri alak nélkül az ilyen tulajdonságok, függvénykapcsolatok felismerése nem lenne lehetséges, és részben pont ez zárja ki a duális fáziskésésű modellt abból, hogy a Fourier-törvény egy valós alternatívájaként tekintsek rá; valamint éppen emiatt javaslom az onsageri alak figyelembe vételét, mint a modellt definiáló összefüggésrendszert. Az onsageri reprezentációból az is kiolvasható, hogy a ρ sűrűség végül milyen módon került a modellbe, és emiatt az is, hogy a hőtágulási hatásokat hogyan lehet a modellhez csatolni.

3.3. Jeffreys-egyenlet

A Jeffreys-egyenlet onsageri alakja

$$\mathbf{q} = l_{11}\nabla\frac{1}{T} + l_{12}(-k\boldsymbol{\xi}), \tag{3.13}$$

$$\partial_t\boldsymbol{\xi} = l_{21}\nabla\frac{1}{T} + l_{22}(-k\boldsymbol{\xi}), \tag{3.14}$$

ahol az együtthatókat a

$$l_{11} \geq 0, \quad l_{22} \geq 0, \quad l_{11}l_{22} - l_{12}l_{21} \geq 0 \tag{3.15}$$

kényszerek kötik a pozitív szemidefinit entrópiaprodukció miatt. A $\boldsymbol{\xi}$ kiküszöbölése után kapott alakot

$$\tau\partial_t\mathbf{q} + \mathbf{q} = \tilde{\lambda}_1\nabla\frac{1}{T} + \tilde{\lambda}_2\partial_t\nabla\frac{1}{T}, \tag{3.16}$$

$$\tau = \frac{1}{l_{22}k}, \quad \tilde{\lambda}_1 = \frac{\det l_{ij}}{l_{22}}, \quad \tilde{\lambda}_2 = l_{11}\tau, \tag{3.17}$$

újfent bonyolultabb használni akkor, ha állapotfüggő együtthatókkal kell dolgozni és további járulékokat eredményez, amelyek csak akkor vehetőek figyelembe korrektül, ha azok még onsageri szinten épülnek a modellbe. Ellenben, az onsageri egyenletek alkalmazása numerikus megoldások terén problémába ütközhet a peremfeltételek szempontjából. Az MCV- és GK-egyenletekkel szemben itt nem $\mathbf{q}$, hanem $\boldsymbol{\xi}$ függés is elképzelhető, elviekben, mivel a $\boldsymbol{\xi}$ az állapottér részét képezi, a $\mathbf{q}$ nem, emiatt a következőkben az l_{ij} együtthatóknak csak a hőmérsékletfüggését vizsgáljuk. A GK-egyenlethez képest a Jeffreys-egyenlet esetén lényegesen eltérő szempontok és együttható kapcsolatok játszanak szerepet, annak ellenére, hogy mindkét modell T-reprezentációja azonos is lehet.

Először tekintsük a $\lambda = \tilde{\lambda}_1/T^2$ hővezetési tényező hőmérsékletfüggését. Ebben az esetben nem csupán egyetlen l együtthatón keresztül van lehetőség a kívánt $\lambda(T)$ függvényt beépíteni, hanem erre sokkal komplexebb megoldások is mutatkoznak. Az első lehetőség az, hogy az l_{ij} keresztkomponenseit (l_{12} és l_{21}) használjuk fel, de ekkor ügyelni kell arra, hogy ha az $l_{11} = 0$ (MCV-egyenlet), akkor a (3.16) miatt $-l_{12}l_{21} \geq 0$-nak is teljesülnie kell, és ez megköti az egyes hőmérsékletfüggések deriváltjának előjelét is. Természetes elvárás az, hogy ha az egyik, csatolást biztosító keresztegyüttható függvény, akkor a másik csatoló együttható is az legyen (analóg módon a termoelektromosságból ismert Seebeck- és Peltier-hatásokkal), habár az $l_{21}(T)$ nem játszik különösebb szerepet[4]. Így, ha valamilyen fizikai elv nem köti a modellezést, akkor ezt nem kötelező figyelembe venni. Ebből az is kiolvasható, hogy önmagában az $l_{21}(T)$-vel is beállítható a hővezetési tényezőnek egy adott hőmérsékletfüggése. Kevésbé triviális eset az $l_{12}(T)$ járuléka. Ez a járulék a $\boldsymbol{\xi}$ kiküszöbölése után található meg a

$$\tau\partial_t\mathbf{q} + \mathbf{q} = \tilde{\lambda}_1(T)\nabla\frac{1}{T} + \tilde{\lambda}_2\partial_t\nabla\frac{1}{T} + \tau\frac{1}{l_{12}(T)}\frac{\mathrm{d}l_{12}(T)}{\mathrm{d}T}\partial_t T\left(\mathbf{q} - \frac{\tilde{\lambda}_2}{\tau}\nabla\frac{1}{T}\right) \tag{3.18}$$

kifejezés utolsó tagjaként. Ebből szándékosan kiemeltem a τ relaxációs időt, mivel így a $\tilde{\lambda}_2/\tau$ dinamikus hővezetési tényező expliciten is láthatóvá tehető, és egy igen érdekes elvi lehetőséget nyit meg. Eszerint, igen gyors folyamatokra inkább a dinamikus (időderiváltak által kijelölt) időskála fog dominálni, nem a statikus, vagyis a

$$\tau\partial_t\mathbf{q} = \tilde{\lambda}_2\partial_t\nabla\frac{1}{T} \tag{3.19}$$

közelítés értelmes, analóg módon a viszkoelasztikus mechanikai viselkedés leírásával [79,98]. A Jeffreys-egyenlet megoldásai nem vezetnek ki abból az $\mathcal{L}^2$ függvénytérből, amelyet a Fourier-egyenlet sajátfüggvényei és sajátértékei feszítenek ki, természetesen ugyanolyan peremfeltételekre vonatkozóan. Ezért jogos az a feltevés, hogy merev és izotrop közegekre a parciális időderiváltak mindkét oldalon elhagyhatók, ezáltal egy dinamikus Fourier-törvényt kapva eredményül. Amennyiben ez fennáll, hangsúlyozva, hogy ehhez igen gyors hővezetési folyamatokra van szükség, a bevezetett nemlinearitások kiegyszerűsödnek, és az eredeti nemlineáris Jeffreys-egyenletet

[4]Ez az onsageri egyenletekből, a $\boldsymbol{\xi}$ kiküszöbölése során válik jól láthatóvá, mivel az $l_{21}(T)$ együtthatót nem kell deriválni, emiatt további járulékai sem jelentkeznek.

vissza lehetett vezetni egy lineáris Fourier-törvényre, dinamikus hővezetési tényezővel. Ennek numerikus demonstrációja a B. függelékben tekinthető meg.

A következő lehetőség az, hogy ha $l_{11} \neq 0$, és ebben az együtthatóban valósítjuk meg a kívánt hőmérsékletfüggést, akkor azt $\tilde{\lambda}_2$ is örökölni fogja. Ennek a megközelítésnek is van egy triviálistól különböző járuléka a $\boldsymbol{\xi}$ kiküszöbölése után,

$$\tau\partial_t\mathbf{q} + \mathbf{q} = \tilde{\lambda}_1(T)\nabla\frac{1}{T} + \tilde{\lambda}_2\partial_t\nabla\frac{1}{T} + \tau\frac{\mathrm{d}l_{11}(T)}{\mathrm{d}T}\partial_t T\nabla\frac{1}{T}. \tag{3.20}$$

Az utolsó lehetőség az, hogy az $l_{22}(T)$ együtthatót használjuk, ami magával hozza az MCV-egyenlet esetén tett összes megállapítást, valamint a többi dinamikus transzportegyüttható egyaránt hőmérsékletfüggővé válik. További érdekesség, hogy a felhasznált $\tau(T)$ függvény közvetlenül öröklődik a $\tilde{\lambda}_2$ együtthatóra. Az egyenlet alakját nem bonyolítja el úgy, mint az előző (3.18) és (3.20) esetekben, mivel a $\boldsymbol{\xi}$ kiküszöbölését nem érinti, így a

$$\tau(T)\partial_t\mathbf{q} + \mathbf{q} = \tilde{\lambda}_1(T)\nabla\frac{1}{T} + \tilde{\lambda}_2(T)\partial_t\nabla\frac{1}{T} \tag{3.21}$$

konstitutív egyenletre vezet. Fel kell hívnom a figyelmet, hogy habár ez a megközelítés célszerűnek tűnik a bonyolult nemlineáris járulékok elkerülése miatt, a szükséges $\tau(T)$ függvény előállításához vagy a szintén problémás k együttható, vagy a ρ tömegsűrűség használható fel az MCV-egyenletnél megfogalmazott módon. Mivel ez utóbbi megközelítés tűnik járhatónak és fizikailag is elfogadhatóbb, interpretálhatóbb modellnek, ezért úgy tekintem, hogy $l_{22}(T)$ magával hozza a mechanikai csatolást is. A mérnöki gyakorlat szempontjából ez szolgáltatja a legjárhatóbb utat. Újfent megjegyzem, hogy a $\tilde{\lambda}_2(T)$-ra ugyanúgy nem állnak rendelkezésre mérési adatok, mint a GK-egyenlet esetén az $\tilde{L}(T)$ függvényre. Az időskálákra visszatérve természetes elvárásnak látszik az, hogy igen lassú folyamatokra a dinamikus időskála esik ki, tehát a (3.21) összefüggés egy nemlineáris Fourier-törvényre redukálódik, ha az időderiváltakat tartalmazó tagokat elhagyjuk, ez viszont már egy, a szakirodalomban jól ismert problémakörre vezet.

3.4. Navier–Stokes–Fourier-egyenletek

Az előző, Fourier-egyenleten túlmutató esetekben már említésre került, hogy a fajlagos belső energián kívül akár más változók is okozhatnak nemlinearitásokat a transzportegyütthatókban. Ezek azok a változók, amelyek a konstitúciós állapotteret alkotják, és az eddig bemutatott termodinamikai háttérben a fajlagos entrópia változójaként tekintettem rájuk. Van azonban egy másik, matematikai szempontból a feltételes egyenlőtlenségek megoldásán alapuló levezetési lehetőség is, a Liu-eljárás [62,120], ami már a klasszikus egyenletek esetén is új szempontokat vezet be. A Fourier-tól eltérő modellek konzisztens, Liu-eljárással való levezetése a mai napig nyitott kérdés, főként a Nyíri-szorzóval való kompatibilitási kérdések miatt [121,122]. A módszertan és az itt bemutatott számolások részletes hátterét a [62,101,120] szakirodalmak tárgyalják.

A lényeges eltérés abban rejlik, hogy a Liu-eljárás alkalmazásához az eddig bemutatott termodinamikai alapváltozók terén kívül szükség van egy úgynevezett kons-

titutív állapottér bevezetésére is, ami az alapváltozókon túl tartalmazza azok gradienseit is. Továbbá, ki kell jelölni egy folyamatirány teret, amiben a konstitutív állapottér időderiváltjai és gradiensei szerepelnek. A főbb különbségeket és azok következményeit a klasszikus Navier–Stokes–Fourier-egyenletek [11] példáján át demonstrálom a [101] alapján.

Ehhez először szükség van a tömeg, az impulzus és az összenergia ($e_{\mathrm{tot}} = e + \mathbf{v}\cdot\mathbf{v}/2$) mérlegegyenleteire,

$$\dot{\rho} + \rho\nabla\cdot\mathbf{v} = 0, \tag{3.22}$$

$$\rho\dot{\mathbf{v}} + \mathbf{P}\cdot\nabla = \mathbf{0}, \tag{3.23}$$

$$\rho\dot{e_{\mathrm{tot}}} + \nabla\cdot\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}} = 0, \tag{3.24}$$

ahol $\mathbf{v}$ a sebességvektor, a felül pont jelöli az anyagi vagy együtt mozgó időderiváltat a

$$\dot{\bullet} := \partial_t \bullet + (\bullet\otimes\nabla)\cdot\mathbf{v} \tag{3.25}$$

módon, a $\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}$ az összenergia áramsűrűségét jelöli, és $\mathbf{P} = \mathbf{P}^{\mathrm{T}}$ a szimmetrikus nyomástenzor (azaz nem-poláros folyadékokról van szó). A Liu-eljárás során a következő tereket kell felhasználni:

- termodinamikai állapottér: $\mathbf{x} := (\rho, \mathbf{v}, e_{\mathrm{tot}})$;
- a termodinamikai állapottér gradienseit is tartalmazó konstitúciós állapottér: $\tilde{\mathbf{x}} := (\rho, \mathbf{v}, e_{\mathrm{tot}}, \nabla\rho, \mathbf{v}\otimes\nabla, \nabla e_{\mathrm{tot}})$;
- folyamatiránytér: $\tilde{\mathbf{y}} := \Big(\dot{\rho}, \dot{\mathbf{v}}, \dot{e_{\mathrm{tot}}}, \dot{(\nabla\rho)}, \dot{(\mathbf{v}\otimes\nabla)}, \dot{(\nabla e_{\mathrm{tot}})}, (\nabla\rho)\otimes\nabla, (\mathbf{v}\otimes\nabla)\otimes\nabla, (\nabla e_{\mathrm{tot}})\otimes\nabla\Big)$.

A $\{s, \mathbf{J}_s, \mathbf{P}, \mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}\}$ a konstitutív függvények halmaza. A (3.22)-(3.24) mérlegegyenleteket a disszipációs egyenlőtlenségben kényszerként kell alkalmazni a Liu-eljárás során, a kényszereket Lagrange–Farkas szorzók segítségével lehet figyelembe venni. A számítások részleteit a C. függelék tartalmazza. A Liu-eljárás szintén egy olyan egyenlőtlenségre vezet, amely a 2. fejezetben tárgyalt módon oldható meg, és az onsageri egyenleteket kapjuk eredményül.

Ebben a konkrét esetben az onsageri egyenletek

$$\mathbf{q}(\tilde{\mathbf{x}}) = l(\hat{\mathbf{x}})\cdot\nabla\left(\frac{1}{T}(\mathbf{x})\right) = -\lambda(\hat{\mathbf{x}})\,\nabla\Big(T(\mathbf{x})\Big), \tag{3.26}$$

$$\mathbf{\Pi}(\tilde{\mathbf{x}}) = -\frac{\mu^{\mathrm{Vol}}(\tilde{\mathbf{x}}) - \mu^{\mathrm{Sh}}(\tilde{\mathbf{x}})}{3}(\nabla\cdot\mathbf{v})\,\mathbf{1} - \frac{\mu^{\mathrm{Sh}}(\tilde{\mathbf{x}})}{2}(\mathbf{v}\otimes\nabla + \nabla\otimes\mathbf{v}), \tag{3.27}$$

alakot öltik, ahol $\mathbf{\Pi}$ fejezi ki a viszkózus nyomástenzort, valamint $\mu^{\mathrm{Vol}} \geq 0$ és $\mu^{\mathrm{Sh}} \geq 0$ jelöli a térfogati és nyíró viszkozitásokat. A (3.26) és (3.27) egyenletekből kiolvasható, hogy a transzportegyüttható̋k az $\tilde{\mathbf{x}}$ konstitúciós állapottér változóitól függenek, nem az $\mathbf{x}$ termodinamikai állapottér változóitól, ami így klasszikus esetben is megengedi a hővezetési tényező hőmérséklet-gradienstől való függését. További, például objektivitási és téridőbeli [108, 123, 124] elvek az $\tilde{\mathbf{x}}$ állapotteret megköthetik, így

célszerűnek látszik, hogy a $\mathbf{v}$ sebességmezőtől az anyagi tulajdonságnak tekintett transzportegyütthatók ne függjenek. Az előbbieket összefoglalva az állítás az, hogy

$$\lambda = \lambda\left(T, \nabla T, p, \nabla p, \mathbf{v} \otimes \nabla\right), \tag{3.28}$$

$$\mu^{\mathrm{Vol}} = \mu^{\mathrm{Vol}}\left(T, \nabla T, p, \nabla p, \mathbf{v} \otimes \nabla\right), \tag{3.29}$$

$$\mu^{\mathrm{Sh}} = \mu^{\mathrm{Sh}}\left(T, \nabla T, p, \nabla p, \mathbf{v} \otimes \nabla\right) \tag{3.30}$$

együtthatók nemcsak a hőmérséklettől és a nyomástól, hanem azok gradienseitől is függhetnek, amik a klasszikus irreverzibilis termodinamika keretein belül is megengedhetőek, de Liu-eljárás nélkül nem válnak láthatóvá. Kísérleti szempontból a ∇T-től való függés a Fourier-egyenleten túli modellek esetén a hőáramsűrűségtől való függésként mutatkozhat meg, a Fourier-egyenlet esetén a kettő egybeesik, tehát ez a fajta függés már klasszikus szinten is értelmes, de nyilvánvaló méréstechnikai nehézségekbe ütközik, hasonlóan a ∇p nyomásgradienshez. Például hiába eredményeznek a Fourier-egyenleten túli modellek eltérő hőárammezőt, ha egyrészt a hőáramsűrűség méréstechnikája hőmérsékletmérésen, illetve annak gradiensének kimérésén alapszik; másrészt szenzortól függően egy néhány milliméter sugarú területen lehetséges átlagos hőáramsűrűséget mérni. Ez a gyakorlat számára nem feltétlenül probléma, hisz a modelleket kihasználva lehet közvetlenül nem mérhető információkat kinyerni [125], analóg módon ahhoz, ahogy az áramlástani szimulációk is mélyebb betekintést engednek a hőátadási tényezőt kialakító mechanizmusokba. Amíg az utóbbi már standard eljárásként működik a mérnöki gyakorlatban, addig az előbbi problémakör még csak ennek lehetőségét és megfontolását javasolja.

A méréstechnikai problémáktól eltekintve a gradiensektől való függéseknek komoly elméleti következményei várhatóak, hiszen lökéshullámoknál, szuperkritikus közegeknél, fázisváltó anyagokat felhasználó hőtárolásnál, vagy akár bizonyos gyártástechnológiai folyamatoknál (hegesztés, 3D nyomtatás) kiemelkedő szerepük lehet mindamellett, hogy ezeknek a folyamatoknak a nemlinearitásokat is figyelembe vevő modellezésére is szükség van.

A Navier–Stokes–Fourier-egyenletek kiterjesztése is része a termodinamikai szakirodalomnak, azonban ezek az eredmények már lényegesen bonyolultabb és technikásabb eljárásokon, főként kinetikus elméleti eredményeken nyugszanak. Ezekben a kiterjesztett modellekben a közös pont az, hogy a csatolások a konstitutív egyenletek szintjén valósítják meg, például a nyomástenzor a hőáramsűrűség gradiensével kerül kapcsolatba. Mérnöki szempontból ez magaslégköri, igen alacsony nyomású gázok (úgynevezett ritka gázok) modellezésénél hasznos[5]. Ez azt jelenti, hogy a nyomás csökkentésével válnak egyre hangsúlyosabbá a csatoló együtthatók és az extra időderiváltak, valamint a kísérleti adatok [126–129] szerint szintén a nyomás változása okozza a hangsebességben jelentkező változást. További részletekért a [99, 130–132] szakirodalmi forrásokat javaslom.

[5]Ez termodinamikai szempontból teljes egészében analóg a fononhidrodinamika során részletezett (2.46)-(2.48) egyenletrendszerrel.

3.5. Összefoglalás

Ebben a fejezetben azokra az új tudományos eredményeimre világítottam rá, amelyek az anyagi nemlinearitás következményeiként adódnak. A Fourier-egyenleten túlmutató modellek esetén az onsageri definíciók termodinamikailag konzisztens kiindulási alapot nyújtanak az állapotfüggő transzportegyüttható figyelembevételére. A fejezetben főként a hőmérsékletfüggő hővezetési tényező szerepére fókuszáltam, speciálisan a Guyer–Krumhansl- és Jeffreys-egyenletek esetén. Mindkét modellben olyan, a triviálistól eltérő járulékok megjelenését figyeltem meg, amelyek méréstechnikailag, kísérlettervezésileg, vagy a modellegyenletek értelmezésében jelentenek újdonságot. Továbbá, részletesen bemutattam, hogyan befolyásolja a hővezetési tényező hőmérsékletfüggése a többi transzportegyüttható. Ezeket a megállapításaimat foglalják össze az alábbi tézisek.

3. Tézis – A Guyer–Krumhansl-egyenlet nemlineáris tulajdonságai

A Guyer–Krumhansl-egyenlet esetén megállapítottam, hogy a hővezetési tényező hőmérséklettől való függése a transzportegyütthatók mindegyikére öröklődik. Ennek következménye, hogy a tömegsűrűség hőmérsékletfüggését figyelembe kellhet venni, így a hőtáguláson keresztüli termomechanikai csatolás a modellezési feladat függvényében jelentkezhet. A relaxációs idő hőmérsékletfüggését további nemlineáris járulék jelentkezése nélkül nem lehet figyelembe venni. A térben nemlokális taghoz tartozó transzportegyütthatók hőmérsékletfüggése nem várt módon módosítja a látszólagos hővezetési tényezőt, amely ilyen módon hőmérséklet- és hőáramsűrűség-függővé is válhat. Az egyes transzportegyütthatókban jelentkező anyagi nemlinearitások gyors folyamatok esetén nem küszöbölhetőek ki, mivel bármely együttható hőmérsékletfüggése mindkét időskála transzportegyütthatóit érinti.

A 3. tézishez kapcsolódó publikációk: [100, 102, 103, 133, 134].

4. Tézis – A Jeffreys-egyenlet nemlineáris tulajdonságai

A Jeffreys-egyenlet esetén megállapítottam, hogy a statikus hővezetési tényező hőmérséklettől való függése anélkül is figyelembe vehető, hogy az állapotfüggés a többi transzportegyütthatóban jelentkezne. Mivel a Jeffreys-egyenletben a statikus és dinamikus skálák már konstitúciós szinten is elkülöníthetőek, emiatt lehetséges a statikus hővezetési tényező hőmérsékletfüggésének dinamikus időskálán való kiküszöbölése. A relaxációs idő hőmérsékletfüggése vagy a tömegsűrűség hőmérsékletfüggését és így a hőtágulási hatások figyelembevételét, vagy pedig további nemlineáris járulékokon keresztül mindkét időskála módosítását vonja maga után.

A 4. tézishez kapcsolódó publikációk: részben a [6, 100] irodalmak tartalmazzák ezeket a megállapításokat, a teljes eredmény publikálás alatt áll.

4. fejezet

Megoldási módszerek

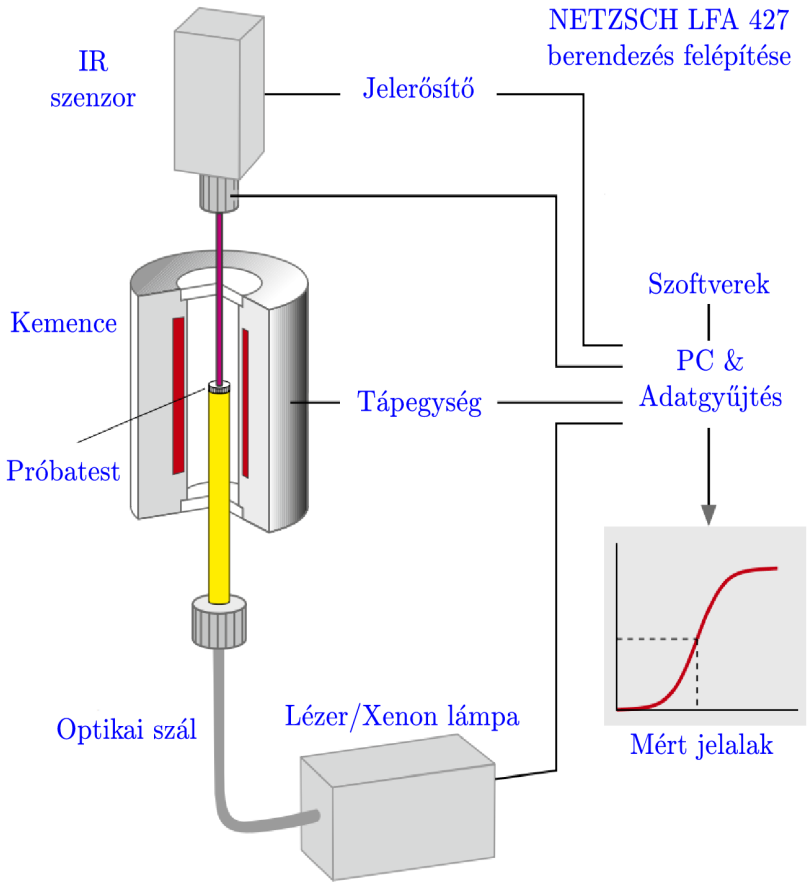
Az előző két fejezet során a Fourier-törvény mérnöki szempontból vett lehetséges alternatíváit mutattam be, ahol a hangsúlyt a modellek onsageri alakjának fontosságára, valamint az egyes nemlineáris tulajdonságok elemzésére helyeztem. A modellezés következő lépését az egyenletek megoldása jelenti, ami a Fourier-féle hővezetési egyenlethez képest szintén több újdonságot hordoz. Ebben a témakörben a kutatásom alatt elért eredmények nem új matematikai módszerek megalkotására, hanem az ismert módszerek Fourier-egyenleten túli alkalmazásaira irányulnak. Ez közel sem egyértelmű feladat, a hagyományos végeselemes szoftverek alkalmazása sem mindig jelent megoldást [135, 136].

Ebben a fejezetben az analitikus megoldások tekintetében arra fogok fókuszálni, hogy a Fourier-egyenlet esetén ismert szorzatszeparációs (vagy változók szeparálása [137]) módszerrel kapott sajátfüggvény-sajátérték egyenletek a Fourier-egyenleten túl is használhatóak-e a GK- és Jeffreys-egyenletek esetén [73,125]. Ez az utóbbi modell esetén nem meglepő állítás, mivel a konstitutív egyenletben a Fourier-törvény, valamint annak időderiváltja is megtalálható, tehát térbeli szempontból nincs változás. Ezzel szemben a Guyer–Krumhansl-egyenlet már más, hiszen abban a hőáramsűrűség további térderiváltjai is megjelennek.

Ebben a fejezetben további megerősítést nyer az a korábbi állításom, hogy a hővezetési modelleket parciális differenciálegyenletek rendszereként kell kezelni, még lineáris esetben is. Ezzel arra kívánok rávilágítani, hogy a kezdeti és peremfeltételek kezelése kritikus, könnyen lehet olyan megoldásokat kapni, amelyek nem valósak és negatív abszolút hőmérsékletre vezetnek a [138] irodalomban látható módon. A [103, 139] irodalmak azonban egyértelműen bizonyítják, hogy a GK-egyenlet matematikailag korrekt kitűzésű feladat, a megoldása létezik és egyértelmű, nem sérti a matematikai maximum elvet, de ehhez termodinamikailag kompatibilis modellre és fizikailag is helyes eljárásokra van szükség.

A peremfeltételek helyes realizálása éppen amiatt válik nehezebbé, hogy a Fourier-törvény által definiált arányosság helyett egy parciális differenciálegyenletet kell megoldani, amit hely- és időfüggő peremfeltételek esetén általánosan csak egyenletrendszerek formájában lehet kezelni. A kezdeti feltételek megfelelő kitűzése szintén további kérdéseket vet fel. A Fourier-egyenlet esetén elegendő a kezdeti hőmérséklet-eloszlást megadni, ebből a hőárammező a Fourier-törvény miatt egy-

értelműen következik. A Fourier-törvény kiegészítései esetén (akár már a legegyszerűbb MCV-egyenletet tekintve) a helyzet megváltozik, a modellek kezelése és a korrekt kitűzöttség kérdése további meggondolásokat igényelnek [103, 139, 140], elkerülve olyan félrevezető feltevéseket, amelyek nem veszik figyelembe az egyenletek szerkezetét, ilyeneket például a [141, 142] irodalmakban is lehet találni. Ebben a fejezetben ezeket a kérdéseket válaszolom meg.



4.1. ábra. A hőimpulzusmérés elvi vázlata a NETZSCH leírása alapján [143], magyar nyelvű feliratokkal ellátva. A BME Gépészmérnöki Kar Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszéken lévő berendezés tanszéki fejlesztésű, amely Gróf Gyula és Gyenis Ákos munkáját dicséri. Felépítése a kemencétől eltekintve ezzel egyező, abban a hőmérsékletmérés K-típusú termoelemmel megoldott, a hőimpulzust egy vaku idézi elő. A tanszéken történő mérések során az adatgyűjtést PicoScope-pal végeztük, az adatokat Matlab és Excel segítségével értékeltük ki.

4.1. Analitikus megoldások

4.1.1. A hőimpulzus-kísérlet egy térdimenziós megoldásai és a kezdeti feltételek szerepe

Több szempontból is érdekes és szemléltető ez a problémakör. A hőimpulzus-kísérlet egy standard mérési eljárás a különféle anyagok hőfokvezetési tényezőjének meghatá-

rozására. Ez egy tranziens elvű eljárás, amelynek sematikus összeállítását a 4.1. ábra szemlélteti. Mivel a kutatásaim alatt végzett kísérletekben központi szerepet tölt be a hőimpulzuselvű kísérlet, ezért ennek az analitikus és numerikus modellezése igen fontos feladatot jelentett. A mérés során a próbatestet egy rövid hőimpulzus-gerjesztés éri, ez egy időfüggő hőáram peremfeltétel segítségével modellezhető. A kísérlet tervezésénél arra törekednek, hogy egy térben egydimenziós modellel a mérések kiértékelhetőek legyenek, ennek feltételeit, valamint a mérési sajátosságokat a [144–147] irodalmak részletesen tárgyalják. Ezeket az ajánlásokat követem én is.

I. Dimenziótlanítás. A mérnöki alkalmazások során az egyenletek dimenziótlanítása kétségtelenül hasznos és fontos, a [53, 73, 104, 125, 148] publikációk is ennek a szellemében készültek. Azonban a dolgozatomban bemutatott módszertani kérdések a dimenziótlanítástól függetlenül is érvényesek. Továbbá, a dimenziótlanításokat adott alkalmazáshoz kell választani, és még akkor sem egyértelműek, a vonatkozó publikációkban sem ugyanazt a dimenziótlanítást használtam minden esetben. Emiatt a megoldásokat kizárólag a modellek dimenziós alakjára véve közlöm, elkerülve azt a nehézséget is, hogy több különböző dimenziótlanítást definiáljak.

II. Megoldás a változók szétválasztásával. A hőimpulzust a

$$q(x=0,t)=q_0(t)=\begin{cases} q_{\max}\left(1-\cos\left(2\pi\cdot\frac{t}{t_p}\right)\right) & \text{ha} \quad 0\le t\le t_p, \\ 0 & \text{ha} \quad t>t_p, \end{cases} \tag{4.1}$$

peremfeltétellel definiálom, ahol t_p a hőimpulzus hossza, $q_{\max}$ annak amplitúdója. A választott függvény numerikus szempontból igen előnyös annak simasági tulajdonságai miatt. Analitikus megoldások szempontjából a [73] publikációm volt az első olyan, amely a GK-egyenletre, véges tértartományra, időfüggő peremfeltétel esetére zárt alakú megoldást adott, így egyaránt alkalmas volt a numerikus megoldások validálására, valamint az akkori kísérleti eredmények részleges kiértékelésére[1]. A modell további feltevése, hogy a hőimpulzus után a testet szigeteltnek tekinti egyaránt annak elő és hátlapján, azaz $q(x=L,t)=q_L(t)=0$. További feltétel, hogy a hőimpulzus teljes egészében a próbatest felületén nyelődjön el, ami megfelelő minta-előkészítéssel megvalósítható [53, 117].

A feladat szobahőmérsékleten lineárisnak tekinthető. A Fourier-egyenletre a módszertant nem részletezem, ehelyett a [137, 149, 150] irodalmakra hivatkozok. Követve a [73] publikációm, a feladat megoldását az egydimenziós GK-egyenletre vonatkozóan mutatom be. A fajlagos belső energia mérlegegyenlete, valamint a konstitutív egyenlet:

$$\rho c_v \partial_t T+\partial_x q=0, \quad \tau\partial_t q+q=-\lambda\partial_x T+\kappa^2\partial_{xx}q \tag{4.2}$$

vagyis a test hőforrásmentes és a $\kappa^2=\eta_1+\eta_2$, és a konstitutív összefüggésben a hőáramsűrűségnek csupán a másodrendű térderiváltja jelenik meg a jobb oldalon.

[1] A "részleges" kifejezés úgy értendő, hogy akkor még nem volt annyira fejlett a kiértékelési eljárásunk, mint a [82, 104] irodalmakban, és egy analitikus-numerikus hibrid iterációs kiértékelést alkalmaztunk Fehér Anna doktorandusz hallgatómmal közösen kidolgozva.

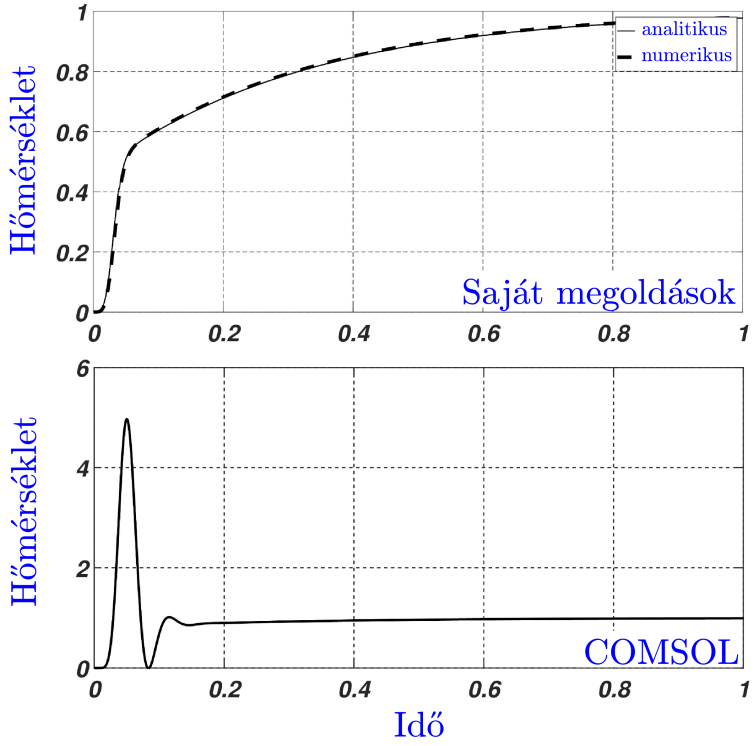
Érdemes megvizsgálni a GK-egyenlet T-reprezentációs alakját,

$$\tau\partial_{tt}T + \partial_t T = a\partial_{xx}T + \kappa^2\partial_{txx}T, \tag{4.3}$$

ahol egyrészt megfigyelhető, hogy a (2.26) egyenlettel összhangban csak a Laplace-operátor (annak is az egydimenziós alakja) jelenik meg, ellentétben a (2.38) 2-hőmérséklet modellel. Az operátorok linearitása miatt ez igaz marad a q-reprezentációra is,

$$\tau\partial_{tt}q + \partial_t q = a\partial_{xx}q + \kappa^2\partial_{txx}q, \tag{4.4}$$

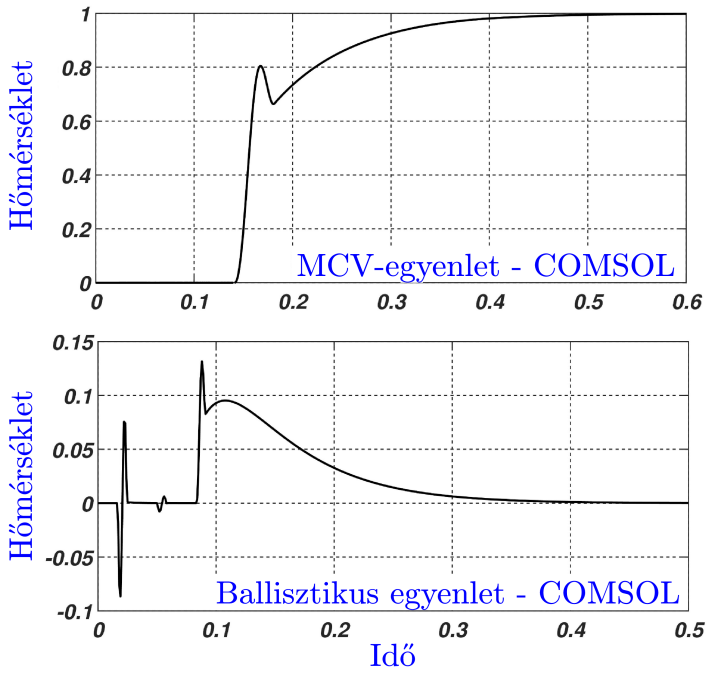
amiből az következik, hogy akár T-re, akár q-ra feltételezve, hogy a megoldásokat $\varphi(t)X(x)$ alakban elő lehet állítani, úgy mindkét esetben az egyenlet szeparálható, és mindkét esetben a $\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2$ operátor sajátfüggvényeit és sajátértékeit fogják a peremfeltételek meghatározni. Továbbá, első- és másodfajú peremfeltételeket tekintve ezek a sajátfüggvények és sajátértékek meg kell egyezzenek a Fourier-egyenlet esetében találtakkal, ugyanis mindkét esetben ugyanaz a Laplace-operátor játszik szerepet. Ebből az is következik, hogy a GK-egyenlet esetén nincsen szükség további peremfeltételekre. A kezdeti feltételeknek a $q(x, t = 0)$ és $\partial_t q(x, t)|_{t=0}$ értékeket kell előírniuk. Mivel a test kezdetben homogén egyensúlyban van, ezért mindkét kezdeti feltétel zérus, ez inhomogén hőmérséklet-eloszlásnál nincs így (lásd később).



4.2. ábra. A kereskedelmi COMSOL végeselemes szoftverrel kapott megoldás (alul) és a saját megoldások (felül) összevetése [135] alapján, hőimpulzus-kísérlet típusú kezdeti és peremfeltételek esetére. Ha csupán két eltérő módszerrel előállított numerikus megoldásunk van, akkor az önmagában kevés, egyik sem diszkvalifikálja a másikat. Az analitikus megoldás szabad minden numerikus eredetű hibától, és kellően sok tagot figyelembe véve lényegében egzakt megoldást kapunk eredményül. Tehát az analitikus megoldás megléte döntő fontosságú az ilyen kérdéses esetekben.

Ebben az esetben a változók szétválasztását csak úgy lehet elvégezni, ha a GK-egyenlet q-reprezentációját használjuk, majd a már ismert $q(x,t)$ mező ismeretében $T(x,t)$ előállítható. Ezt az eljárást a D. függelék írja le részleteiben.

A GK-egyenletre vonatkozóan az analitikus és a COMSOL kereskedelmi végeselemes szoftver által adott megoldásokat a 4.2. ábra hasonlítja össze, markáns különbségeket mutatva [135]. A COMSOL végeselemes megoldója reprodukálni tudja a Fourier-, MCV-, sőt, még a ballisztikus egyenletek megoldásait (4.3. ábra), de a GK-egyenlet esetén a $\kappa^2/\tau > a$ esetben az eltéréseket már nem numerikus hibák okozzák. A 4.2. ábrán látható hamis megoldás független a hálózástól és az időléptetésektől. Ebből azt a következtetést lehet levonni, hogy egyrészt újfajta hővezetési modellek esetén nagyobb óvatossággal kell eljárni, másrészt az analitikus megoldások szerepe hangsúlyosabbá válik a numerikus megoldások validálása érdekében. A numerikus megoldásokban előfordulnak olyan "mesterséges", a választott közelítés által létrehozott hibák – még stabil és konvergens módszerek esetén is – amelyek a megoldást lényegesen torzítják. Ilyen numerikus hibára látunk példát a 4.3. ábrán is. Hiperbolikus egyenletek esetén a COMSOL képes helyes megoldásra vezetni, amelyek még mesterséges oszcillációktól is függetlenek (MCV-egyenlet esete), de ezeket a megoldásokat jelentős erőforrásigény jellemzi[2].



4.3. ábra. Az MCV-egyenlet és a ballisztikus egyenlet COMSOL-lal történő megoldásai. Hiperbolikus modellek esetén a megoldások tükrözik a fizikai tartalmat, de könnyen mesterséges, megtévesztő numerikus hibákkal terhelté válhatnak.

[2]Az összehasonlítás végett: a térben egydimenziós MCV-egyenlet COMSOL-al való megoldásához 16 GB RAM-ra és egy nyolcmagos i7-es processzorra szükség (2018-as számolások) [135], de a ballisztikus egyenlet megoldásának mesterséges oszcillációktól mentes előállításához kevés volt ez a memória; mindehhez igen sok processzoridőre volt szükség. Ezzel szemben egy véges differenciák elvén megírt Matlab kód, vagy egy analitikus megoldás egy másodpercen belül ad jól követhető eredményt.

Ha a ballisztikus egyenletről csupán a 4.3. ábrán látott megoldás lenne az egyetlen rendelkezésre álló információ, akkor a mesterséges oszcillációk igen könnyen összetéveszthetőek a valós, fizikai megoldásból eredő hullámfronttal [76]. Éppen emiatt szükséges a termodinamikai és a matematikai szempontok, valamint a numerikus sémák tulajdonságainak az ismerete, amik a "fekete doboz"-jellegű kereskedelmi programokat ellenőrizhetővé teszik. Ezzel analóg problémákat és kihívásokat rejt a mechanikai modellek megfelelő numerikus kezelése is, főként a hullámterjedési feladatok tekintetében [151–153]. A [151, 152] irodalmak több olyan COMSOL-os példát is bemutatnak, ahol ugyanarra a feladatra, külön-külön időléptetési algoritmusok felhasználásával – hálózástól függetlenül – mindig eltérő megoldásokra vezet a szoftver. Tehát az sem járható út, hogy egyszerűen több beépített algoritmust használunk, mert nem biztos, hogy bármelyik helyes eredményt képes adni. Ráadásul ha az összes különböző, akkor hogyan választjuk ki a helyes megoldást? Ezeket a kérdéseket a modellek alapos ismeretében lehet jól megválaszolni.

III. További észrevételek a kezdeti feltételekre vonatkozóan. Természetesen adódik a kérdés, hogy mit lehet tenni egy olyan általános esetben, amikor csupán a kezdeti $T_0(x)$ hőmérséklet-eloszlás ismert. A válasz egyértelmű: bármely Fourier-egyenleten túli esetben a $T_0(x)$ ismerete kevés. A GK- és a Jeffreys-egyenletek esetén szükség van még egy további kezdeti feltételre, amely teljes egészében és egyértelműen meghatározza a hőáramsűrűséget és a hőmérsékletmezőt az energiamérleg és a konstitutív egyenletekkel kompatibilis módon. Az egyszerűség kedvéért először az MCV-egyenletet érdemes tekinteni egy kezdeti $t = 0$ időpillanatra vonatkoztatva,

$$\tau \partial_t q + q = -\lambda \partial_x T_0(x). \tag{4.5}$$

Ez az összefüggés felfogható úgy is, mint egy minden egyes térpontra vonatkozó időbeli közönséges differenciálegyenlet, ami felintegrálható és vehető annak a $t = 0$ helyettesítéssel kapott megoldása. Ekkor

$$q(x, t = 0) = -\lambda \partial_x T_0(x) + C(x) \tag{4.6}$$

adódik, ahol a $C(x)$ integrálási együtthatónak megengedhetjük a helyfüggését. Ezt a $C(x)$ együtthatót kell megkötni, valamint nem szabad megfeledkezni arról sem, hogy a peremfeltételek is befolyásolják a helyfüggését. Mivel a $q(x, t)$ hőáramsűrűségnek differenciálhatónak kell lennie, ezért a $C(x)$-nek is. Ha például az $x = 0$ helyen adiabatikus a peremfeltétel ($q(x = 0, t) = 0$), akkor a $C(x = 0) = \lambda \partial_x T_0(x = 0)$ egyenlőség elvárható a peremen. Hasonló gondolatmenettel lehet dolgozni akkor is, ha nullától eltérő peremfeltételt kell kielégítenie. Mindezek mellett még mindig szükség van egy további feltételre, ami teljesen lerögzíti a $C(x)$ függvényt. Ez a kiegészítő feltétel, habár tisztán matematikai oldalról könnyen megadható, annak fizikai tartalma azon túl ismeretlen, hogy egy adott kezdeti feltételt kell definiálni vele.

A fentiek tükrében, ha a $C(x)$ függvényt azonosan nullának választjuk, akkor a feltételezés az, hogy a Fourier-törvényt használjuk ki a kezdeti hőárammező kiszámítására. Ez az MCV-egyenlet esetén azt jelenti, hogy a hőárammező kezdeti időderiváltja nulla, melyet implicit módon írtunk elő. A második alternatíva az,

hogy a $T_0(x)$ eloszlást előidéző folyamatot is modellezzük, azaz a közeg "előéletét" állítjuk elő, amennyire a rendelkezésre álló információk ezt megengedik. Mivel mindkét megközelítés egyaránt hordoz bizonytalanságokat és közelítéseket, ezért nincs értelme arról beszélni, hogy melyik a pontosabb vagy jobb eljárás. Amennyire lehet, a Fourier-tól eltérő modellek esetén a vizsgált folyamatot homogén nyugalmi helyzetből kell elindítani, amivel a kezdeti feltételek közelítés nélkül előírhatók.

A feladat azonban lényegesen egyszerűbbé tehető a Galjorkin-módszer felhasználásával, ez a súlyozott reziduumok módszerének egy speciális alesetét jelenti most számunkra. Ennek alapgondolata az, hogy a q és T mezőket egy N-tagú véges összeg formájában keressük, azaz

$$q = \sum_{n=0}^{N} A_n(t)\varphi_n(x), \quad T = T_0 + \sum_{n=0}^{N} B_n(t)\phi_n(x), \tag{4.7}$$

ahol az $A_n(t)$ és $B_n(t)$ együtthatók időfüggőek, és azok egy közönséges differenciálegyenlet-rendszer megoldásaként számolhatóak ki. A φ_n és ϕ_n függvények a q és T mezők térbeli részét reprezentálják, bázisfüggvényeknek is nevezik ezeket. Végeselemes alkalmazások során – mivel a végeselem csak egy kisebb térbeli intervallumot fed le – a φ_n és ϕ_n függvények nem kell, hogy globálisan (a teljes térbeli tartományon) reprezentálják az adott mező viselkedését, elég, ha lokálisan közelítik azt[3]. Ebben az esetben viszont speciális, a térbeli függvények lokális reprezentációja helyett a globális reprezentációra törekszek, ahol a φ_n és ϕ_n kielégítik a homogén peremfeltételeket. Emiatt célszerű választás a szorzatszeparációs megoldás során kapott sajátfüggvények használata.

Az $A_n(t)$ és $B_n(t)$ együtthatók meghatározásához a (4.7) egyenletet vissza kell helyettesíteni a fejlődési egyenletekbe, valamint alkalmazva rájuk a megfelelő deriváltakat,

$$\rho c_v \sum_{n=0}^{N} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} B_n\phi_n + \sum_{n=0}^{N} A_n \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\varphi_n = R_1, \tag{4.8}$$

$$\tau \sum_{n=0}^{N} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_n\varphi_n + \sum_{n=0}^{N} A_n\varphi_n + \lambda \sum_{n=0}^{N} B_n \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi_n - \kappa^2 \sum_{n=0}^{N} A_n \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi_n = R_2 \tag{4.9}$$

az úgynevezett spektrális alakot kapjuk, amiben az $R_1(N)$ és $R_2(N)$ tagok a közelítésből adódó, N-től függő maradéktagok, amelyekre igaz, hogy $R_{1,2}(N \to \infty) \to 0$. A módszer másik alapfeltevése az, hogy ha az egyenletek mindkét oldalát a megfelelő sajátfüggvénnyel megszorozzuk és a teljes tértartományra integráljuk, akkor

$$\int_0^L R_1\phi_n \mathrm{d}x = 0, \quad \int_0^L R_2\varphi_n \mathrm{d}x = 0, \tag{4.10}$$

más szóval feltesszük, hogy a közelítésből származó hiba ortogonális a bázisfüggvényekre [154]. A következő megfigyelés – amit a szorzatszeparációs megoldás eleve magában foglal – az, hogy a bázisfüggvényeknek egy parciális differenciálegyenlet-rendszer esetén tisztelniük kell az egyenletek struktúráját is. Ezalatt azt értem, hogy

[3]Emiatt is kényelmes a tisztán hővezetési végeselemes módszerekben lineáris függvényeket használni, azok lokálisan éppen a hőellenállásokkal analóg módon viselkedő elemtípust eredményeznek.

a (4.8) energiamérleg spektrális alakjában a φ_n deriváltja arányos kell legyen ϕ_n-vel, más szóval az egyenletekben lévő térbeli differenciáloperátorok a bázisfüggvényeket egymásba kell képezniük. A (4.9)-ben található másodrendű deriválás emiatt ugyanabba a függvénytérbe képez vissza. Ez a módszer így a konstitutív egyenletekből kizár bizonyos tagokat, például a $\partial_x q$, vagy akár a $\partial_{tx} q$ tagok így értelmetlenek, tehát például a [155] irodalomban közölt modellek ezzel a módszerrel nem megoldhatóak[4].

A (4.8)-(4.9) egyenletekben a térbeli deriválásokat elvégezzük, majd az egyenletek mindkét oldalát megszorozzuk a nekik megfelelő bázisfüggvénnyel, ezután a teljes tértartományra vonatkozóan integráljuk. Ekkor a közelítésből származó hibák kiesnek, és az A_n, B_n együtthatókra kapott csatolt közönséges differenciálegyenletrendszer minden n módusra megoldható. A (4.8)-(4.9) egyenletek általánosságban is igazak a GK-egyenletre, a bázisfüggvények a peremfeltételekkel rögzíthetőek.

Visszatérve a kezdeti feltételekhez: például, legyenek $\varphi_n(x) = \sin(\beta_n x)$, $\phi_n(x) = \cos(\beta_n x)$, $\beta_n = n\pi/L$ bázisfüggvények, amely az adiabatikus peremfeltételeknek ($q(x = 0, t) = q(x = L, t) = 0$) megfelelő sajátfüggvény-sajátérték rendszer. Az előbbiekben megfogalmazott lépéseket követve a

$$\rho c_v \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} B_n + \beta_n A_n = 0, \tag{4.11}$$

$$\tau \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_n + \left(1 + \kappa^2 \beta_n^2\right) A_n - \lambda \beta_n B_n = 0 \tag{4.12}$$

rendszer adja meg az A_n és B_n együtthatók időbeli változását. Érdekessége, hogy a GK-egyenlet megoldása az MCV-egyenlethez képest egyáltalán nem hordoz további újdonságot, egyetlen együttható különbség van a két modell között; a $\kappa^2 = 0$ feltétellel a modell, valamint annak megoldása az MCV-egyenletre és annak megoldására egyszerűsödik. Ez a parciális differenciálegyenletek szintjén egyáltalán nem nyilvánvaló, de a Galjorkin-módszerrel a modell megoldása lényegesen egyszerűsödik. Ezzel kikerülhető a $C(x)$ függvény megválasztása, tisztábban látszanak a függvénykapcsolatok, és a GK-egyenlet esetén a $\partial_{xx} q$ tag miatti nehézségek is megkerülhetőek.

A Jeffreys-egyenlet esetén a $\varphi_n(x) = \sin(\beta_n x)$, $\phi_n(x) = \cos(\beta_n x)$, $\beta_n = n\pi/L$ bázisfüggvények nem változnak (változatlanul adiabatikus peremfeltételekre), ebben az esetben is öröklődnek a Fourier-egyenletnél használt sajátfüggvények és sajátértékek, így a modell spektrális alakja

$$\rho c_v \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} B_n + \beta_n A_n = 0, \tag{4.13}$$

$$\tau \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_n + A_n - \left(\lambda_1 + \lambda_2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right) \beta_n B_n = 0. \tag{4.14}$$

Adott $T_0(x)$ esetén, szintén feltételezve, hogy a kezdeti feltétel az adott bázison reprezentálható, a kezdeti $B_n(t = 0)$ együtthatók előállíthatóak. Itt is látszik, hogy egy

[4]Megjegyzem, hogy a [155] állítása ellenére várhatóan nem termodinamikailag konzisztens modelleket közöl. Amely modell kilóg az itt közölt Galjorkin-módszer hatásköréből, abban a differenciáloperátorok eleve is kivezetnek a megfelelő függvénytérből, így azok megoldása más módszerek esetén is problémákba ütközhet. A vezető modern termodinamikai megközelítések nem tudnak ilyen tagokat a konstitutív egyenletekben létrehozni. Habár ezt az állítást részletesen nem bizonyítom, a Galjorkin-módszer alkalmazásának kizárása önmagában is elég kérdést vet fel a [155] irodalomban közölt modellek terén, ami a GK- és Jeffreys-egyenletekkel összevetve komoly hátrány.

további feltételre szükség van, amely egyértelműen megköti az $A_n(t=0)$ együtthatót. A GK- és a Jeffreys-egyenletek is megengedik azt a választást, hogy a hőmérsékletmező időderiváltja kezdetben nulla legyen adott inhomogén $T_0(x)$ mellett, azaz

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}B_n = 0 \quad \Rightarrow \quad A_n = 0 \quad \Rightarrow \quad \tau\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_n = \lambda_1\beta_n B_n \tag{4.15}$$

összefüggés feltételt ad a hőárammező kezdeti időderiváltjára, ami nem nulla. Ez visszafelé is igaz, azaz

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_n = 0 \quad \Rightarrow \quad A_n \neq 0 \text{ ((4.12) vagy (4.14))} \quad \Rightarrow \quad \rho c_v\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}B_n = -\beta_n A_n, \tag{4.16}$$

vagyis a GK- és a Jeffreys-egyenletek a kezdeti feltételek rögzítéséhez megengedik a Fourier-törvénytől való eltérést. Hangsúlyozom, hogy adott inhomogén $T_0(x)$ esetén nem lehet mindkét mező kezdeti időderiváltja zérus, az inkonzisztens eredményre vezetne. Végül visszautalva a q-, vagy T-reprezentációkra, azok az A_n-re vagy a B_n-re való átrendezéssel analóg módon értendőek, a spektrális formában bármelyik kiküszöbölése nehézségektől mentes.

A teljesség kedvéért az E. függelék közli a [53] publikációra építve a hőimpulzus-kísérlet Galjorkin-módszerrel történő modellezését is. A fő különbség az, hogy ebben a megoldásban sikerült úgy figyelembe venni a test hűlését, hogy az előző esethez képest nem kellett a sajátértékeken és a sajátfüggvényeken módosítani, ez kicsi (0,1 alatti) Biot-számokra érvényes.

4.1.2. Nagy kiterjedésű testek hengerszimmetrikus leírása

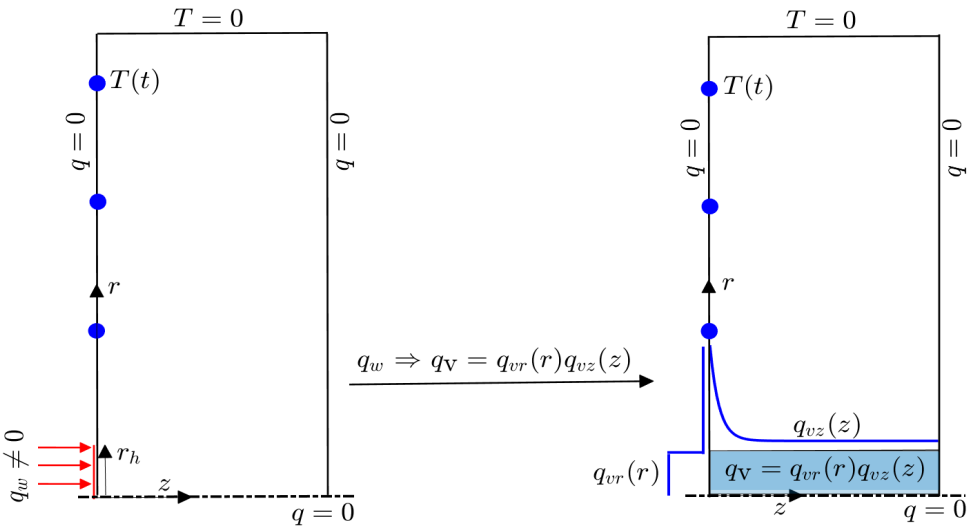
A térben kétdimenziós analitikus megoldások tekintetében mutatkozik meg igazán a Galjorkin-módszer hatékonysága. Egy lehetséges termikus mérési elrendezést vizsgál a következő problémafelvetés.

Mivel a mérnöki gyakorlatban sokszor nehéz kisméretű próbatesteket készíteni, kiváltképp a habosított heterogén anyagszerkezetek kapcsán, vagy akár már meglevő szerkezeteket kellhet utólag termikus szempontból roncsolásmentesen jellemezni, ezért ésszerű lehet a következő elrendezés [125]. A 4.4. ábrán egy olyan esetet láthatunk, ahol egy adott L vastagságú falat annak egy r sugarú felületén egyenletesen fűtünk. Meg kell jegyeznem, hogy egy ilyen helyfüggő peremfeltétel kezelése még a Fourier-egyenlet esetén is komoly kihívásokba ütközik, így a helyfüggő peremfeltételt egy helyfüggő hőforrással célszerű kiváltani, amely a fűtött felületre koncentrálódik, egészen pontosan a

$$q_v(r,z) = q_{\mathrm{v,max}}q_{vr}(r)q_{vz}(z), \quad q_{vr}(r) = \frac{1}{2}\Big(1-\tanh(C_1 r - C_2)\Big), \quad q_{vz}(z) = e^{-C_3 z} \tag{4.17}$$

függvényalak szerint, ahol a $C_{1,2,3}$ konstansok tetszőlegesen állíthatóak annak tükrében, hogy mekkora tértartományra kívánjuk a hőforrást koncentrálni $q_{\mathrm{v,max}}$ amplitúdóval.

A további peremfeltételek a 4.4. ábra szerint értendőek, azaz a testet hengeresnek tekintem, amiben kihasználom a hengerszimmetriát. Így az elülső (fűtött) felületen



4.4. ábra. A bal oldali elrendezés mutatja az eredeti elrendezést, a felületen helyfüggő hőáram peremfeltétellel. A jobb oldali elrendezés ezt a peremfeltételt váltja ki helyfüggő hőforrás alkalmazásával, amelynek karakterisztikáját a (4.17) összefüggés mellett a sötétkék vonalak is szemléltetik [125] alapján. Az elülső ($z = 0$) felületen elhelyezkedő kék pontok a lehetséges hőmérsékletmérési pontokat jelölik, tehát a modellek megoldásait ezeken a pontokon érdemes összevetni, mivel ezek könnyen mérhetőek.

és a forgástengelyen a hőáramsűrűség nulla, az egyszerűség kedvéért a hűlést elhanyagolom. A mérés ideje alatt a fűtött tartománytól a hátsó felületet elegendően távolinak tekintem, így az ottani hőmérsékletet adott peremfeltételnek írom elő. Ugyanígy járok el a forgástengelytől R távolságra lévő felületen is. A feladatot a lineáris Fourier-, GK- és Jeffreys-egyenletekre oldom meg a Galjorkin-módszer kihasználásával, hengerkoordinátákban, a [125] publikációm követve. Összefoglalva, a következő leíró egyenleteket használom a fajlagos belső energia mérlegére, valamint a konstitutív összefüggésekre,

$$\text{Mérleg:} \quad \rho c_v \partial_t T + \partial_r q_r + \frac{1}{r} q_r + \partial_z q_z = q_v(r,z), \tag{4.18}$$

$$\text{Fourier:} \quad q_r = -\lambda \partial_r T, \tag{4.19}$$

$$q_z = -\lambda \partial_z T, \tag{4.20}$$

$$\text{GK:} \quad \tau \partial_t q_r + q_r = -\lambda \partial_r T + (\eta_1 + \eta_2)\left[\partial_{rr} - \frac{1}{r^2} + \frac{1}{r}\partial_r\right] q_r + \eta_1 \partial_{zz} q_r + \eta_2 \partial_{rz} q_z, \tag{4.21}$$

$$\tau \partial_t q_z + q_z = -\lambda \partial_z T + (\eta_1 + \eta_2)\partial_{zz} q_z + \eta_1 \left[\partial_{rr} + \frac{1}{r}\partial_r\right] q_z + \eta_2 \left[\frac{1}{r}\partial_z + \partial_{rz}\right] q_r, \tag{4.22}$$

$$\text{Jeffreys:} \quad \tau \partial_t q_r + q_r = -\lambda_1 \partial_r T - \lambda_2 \partial_{tr} T, \tag{4.23}$$

$$\tau \partial_t q_z + q_z = -\lambda_1 \partial_z T - \lambda_2 \partial_{tz} T. \tag{4.24}$$

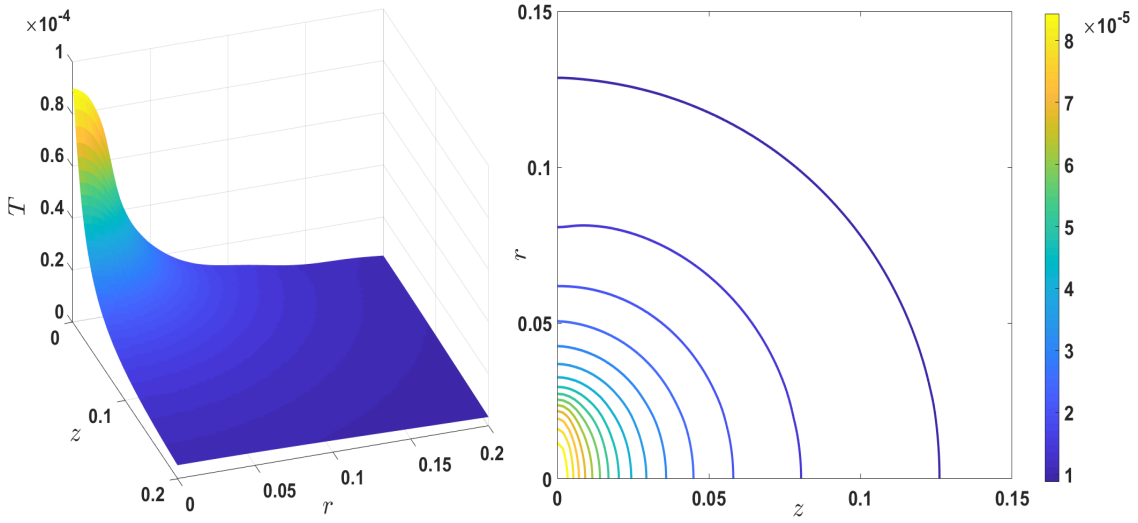
A Galjorkin-módszer alkalmazásához szükség van a Fourier-egyenlet által kijelölt sajátfüggvényekre és sajátértékekre, ami a hagyományos szorzatszeparációs megoldás során határozható meg. A térfogati hőforrás megléte miatt azonban a változókat

nem lehet azonnal szétválasztani. Emiatt célszerű két állapot szuperpozícióját tekinteni: egy inhomogén, de állandósult állapotot ($T_{\mathrm{st}}(r,z)$), valamint egy homogén, de időfüggő állapotot ($T_{\mathrm{h}}(r,z,t)$), azaz a $T(r,z,t) = T_{\mathrm{st}}(r,z) + T_{\mathrm{h}}(r,z,t)$ felbontásban a feladat megoldható. A megoldás részleteit az F. függelék tartalmazza.

Mindhárom modell megoldása ugyanabban az alakban, az egyes mezők együtthatóira vonatkozó közönséges differenciálegyenlet-rendszer formájában írható fel,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix} C_{nm}(t) \\ D_{nm}(t) \\ E_{nm}(t) \end{bmatrix} = \mathbf{M}_{nm}\begin{bmatrix} C_{nm}(t) \\ D_{nm}(t) \\ E_{nm}(t) \end{bmatrix}, \tag{4.25}$$

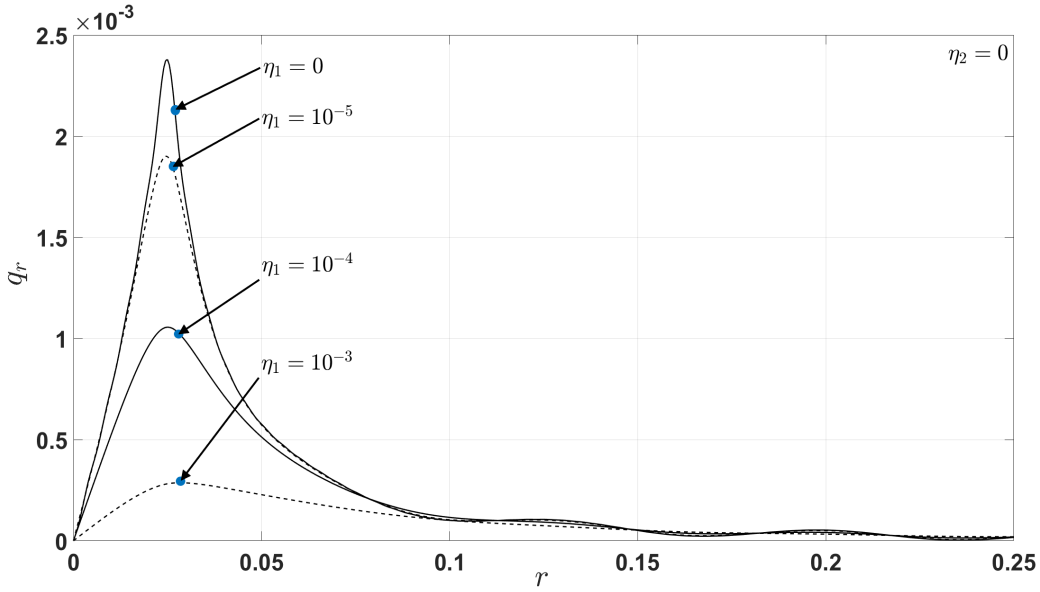
ahol az $\mathbf{M}_{nm}$ együtthatómátrix elemei az egyes modellek esetén eltérőek, valamint a C_{nm}, D_{nm} és E_{nm} együtthatók – az F. függelék jelöléseivel összhangban – rendre a T hőmérséklet, valamint a q_r és q_z hőáramkomponenseket kifejtő véges sor együtthatói. A megoldás tetszőleges, időben változó, de folytonos térfogati hőforrás-eloszlásra is igaz marad.



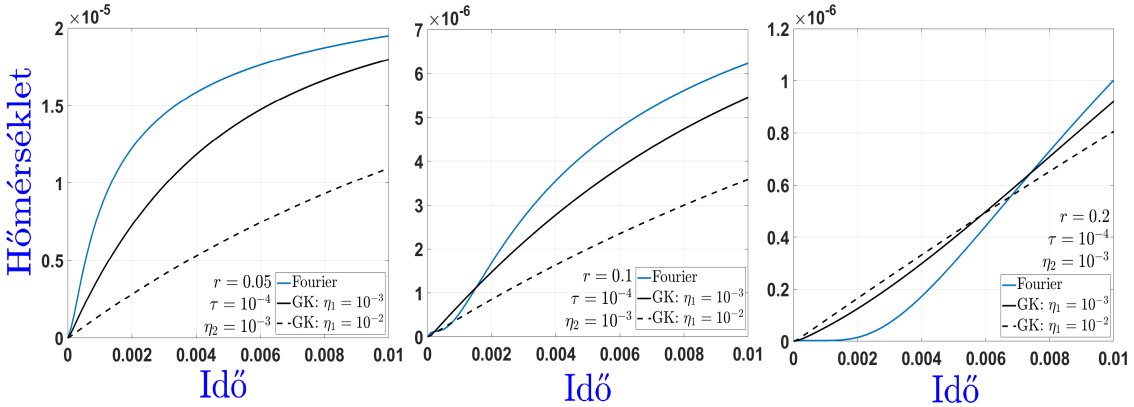
4.5. ábra. Az állandósult állapotú hőmérséklet-eloszlás jellegének demonstrálása, a bal oldali ábrán felületként, a jobb oldali ábrán az izoterm szintvonalak segítségével szemléltetve [125].

A megoldások jellegét a 4.5-4.7. ábrák demonstrálják, de a hangsúlyt a modellek megoldásának módszertanára kívánom helyezni. A Galjorkin-módszer ilyen irányú alkalmazása nem csak új ezen a szakterületen, de rendkívül hasznos és lényegesen leegyszerűsíti a megoldások menetét. Ehhez arra van szükség, hogy a GK- és Jeffreys-egyenletek ugyanazokat a térbeli bázisfüggvényeket (sajátfüggvény-sajátérték párokat) használják, mint a Fourier-egyenlet. Ez a modellek T-reprezentációjából, valamint az egyenletek szerkezetéből első- és másodfajú peremfeltételekre vonatkozóan belátható. A harmadfajú peremfeltétel miatt a sajátfüggvények és sajátértékek már függenek a konstitutív kifejezéstől is, így az nem feltétlenül származtatható a Fourier-egyenleten túli esetekre. Ez a módszertan ettől általánosabb, termodinamikailag kompatibilis modellekre is használható, a kezdeti és a peremfeltételek keze-

lése is lényegesen egyszerűbb, mint ahogy a szorzatszeparációs módszertan esetén kiadódna.



4.6. ábra. A GK-egyenlet esetén a felületi hőáramsűrűség sugárirányú eloszlása az η_1 paraméter függvényében [125]. Itt érdemes újra reflektálni a hőárammérésre vonatkozó korábbi megjegyzésünkre: a hőáramsűrűség értéke, eloszlásának karakterisztikája nagyságrendileg nem tér el attól, amit a Fourier-törvény jósol (itt az $\eta_1 = 0$ határeset), emiatt ilyen módon nem is lehet a Fourier-tól való eltérést megfigyelni a jelenleg rendelkezésünkre álló eszközökkel.



4.7. ábra. A GK-egyenlet által jósolt időbeli hőmérséklet-változás a 4.4. ábrán szemléltetett kék pontokon a $z = 0$ helyen [125]. Érdekesség, hogy a Fourier-egyenlettől való eltérés inkább a fűtéstől távolabbi pontokon jelentkezik, nem pedig közvetlenül a hőforrás közelében. Ez újra kiemeli a jelenség megfigyelhetőségének méretfüggését, és egyben ezek a számolások további támpontot adnak újabb méréstechnikai eljárások kidolgozásához, illetve azok kiértékeléséhez.

4.2. Numerikus megoldások

A mérnöki gyakorlatban számtalan esetben, akár a geometria, akár a modellegyenletek miatt (a peremfeltételeket is ideértve), szükség van a numerikus módszerek használatára. Ezek a módszerek a diszkretizáció folyamatán keresztül alakítják át az eredeti parciális differenciálegyenleteket algebrai egyenletekké. Fontos hangsúlyozni, hogy önmagában a diszkretizációs eljárás, mint módszer, hatékonyságáról értelmetlen beszélni, ez csak az adott parciális differenciálegyenlet-rendszerrel együtt értve értelmes. Erre egy igen bevilágító és a szakirodalomban alapvető példaként emlegetett modell az advekciós egyenlet[5] megoldása, amely a hővezetési modell esetén kiválóan működő FTCS[6] véges differenciás sémával mindig instabil megoldásra vezet [156]. Ezzel szemben a Lax-módszert kihasználva a nevezetes Courant-szám[7] stabilitási kritérium levezethető, és ehhez tulajdonképpen az FTCS sémának egyetlen elemén kell egy kisebb módosítást végezni, amitől a séma még mindig megőrzi az időben előrelépő, térben centrális jellegét, de a numerikus stabilitási tulajdonságok lényegesen megváltoznak.

A numerikus módszereknek ez a tulajdonsága általában véve is igaz, és így a következő alfejezetekben megfogalmazott állítások kizárólag a GK- és Jeffreys-egyenletekre (illetve azok aleseteként tekinthető MCV-egyenletre) érvényesek. A numerikus módszerek tárgyalása esetén a hangsúlyt a peremfeltételek kezelésére, valamint a stabilitási tulajdonságok vizsgálatára helyezem. A kezdeti feltételekre vonatkozó korábbi megállapítások most is érvényesek maradnak. A kutatásaim során a véges differenciás módszerek használatakor a séma pontosságának növelése nem volt célom, aminek az az oka, hogy ettől lényegesen kritikusabb a peremfeltételek helyes kezelése és a valódi megoldás megtalálása.

4.2.1. A peremfeltételek kezelése 1D-ben

Szemléltetésképpen érdemes a GK-egyenlet egy térdimenziós alakjából kiindulni,

$$\rho c_v \partial_t T + \partial_x q = 0, \tag{4.26}$$

$$\tau \partial_t q + q = -\lambda \partial_x T + \kappa^2 \partial_{xx} q. \tag{4.27}$$

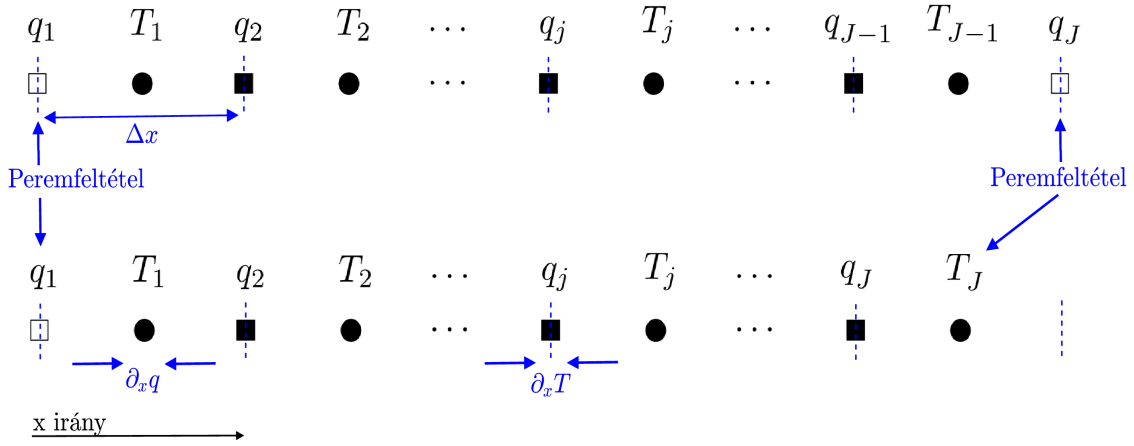
Amíg közönséges differenciálegyenleteknél jól mutatja a deriváltak rendje a szükséges peremfeltételek számát, addig a parciális differenciálegyenletek rendszerénél ez nem ennyire kézenfekvő. Kontinuum szemmel nézve minden térpontban mindkét mező (T és q egyaránt) létezik, így a peremen is. Ez azt jelenti, hogy akármelyik mezőre is vonatkozik peremfeltétel, azzal kompatibilisen kell a másik mezőre vonatkozó peremet is előírni. Ez a Fourier-egyenletnél nem ütközik nehézségekbe. A problémák a GK-egyenlet esetén jelentkeznek a másodrendű térderivált miatt, azaz ismerni

[5] Az advekciós egyenlet egy elsőrendű hullámegyenlet: $\partial_t u = v\partial_x u$, ami egy u mennyiség v sebességgel való transzportfolyamatát adja meg.

[6] A rövidítés az angol "Forward Time Centered Space" szavakból adódik, a szakirodalom is így használja, és az időben előrelépő, térben centrális véges differenciás közelítést jelenti.

[7] Hívják még Courant–Friedrichs–Lewy-számnak is, rövidítve CFL kritériumként található meg a szakirodalomban [156].

kellene a $\partial_{xx} q$ tagot minden időpillanatban a peremen. Ez a jelenlegi tudásunk szerint nem lehetséges, így a problémát meg kell kerülni.



4.8. ábra. Az eltolt mezős diszkretizálás sematikus ábrája és a peremfeltételek realizálása. A felső ábra a $q-q$-peremek esetét, az alsó ábra a $q-T$-peremek esetét mutatja be. A hőmérsékletek mindkét esetben egy Δx széles cella átlagát, a hőáramok a cellába be-, illetve kilépő áramokat reprezentálják, teljesen analóg módon a végestérfogatú megközelítéssel. Az alsó ábrán feltüntettük, hogy az egyes differenciál-operátorok honnan hová képeznek a diszkrét rácson.

Az egyik megoldás az úgynevezett eltolt mezős módszertanon alapul, aminek az alkalmazása a Fourier-egyenleten túli hővezetési feladatok esetén először a [135] publikációban jelent meg. Ez a véges differenciák módszerén alapszik, és a kívánt peremfeltételnek megfelelően kell az egyes mezőkhöz tartozó rácspontokat lehelyezni. Erre példát a 4.8. ábra mutat, azaz előírt q-perem esetén a q-hoz tartozó rácspont kerül a tartomány szélére, T-perem esetén a T-hez tartozó. Ez speciális esetekben egybeesik a véges térfogatok módszerével. Érdekesség, hogy ez a diszkretizáció csak a termodinamikailag kompatibilis egyenletrendszerek esetén működik jól. Ez impliciten magában hordozza a Galjorkin-módszer során is tett megállapításomat, miszerint az egyes differenciáloperátorok ugyanabba a függvénytérbe kell képezzenek. Ez az eltolás időben is lehetséges, ezáltal növelve az időbeli közelítés rendjét, valamint ez a módszertan egyesíthető a szimplektikus módszerekkel, amelyek igen előnyös numerikus tulajdonságokkal rendelkeznek, például eltünthetőek a numerikus disszipációs és diszperziós hibák [151, 152].

Mérnöki szempontból szintén hangsúlyos a végeselemes szempontok tárgyalása, így a következőkben a [136] közleményre építve bemutatom, hogy miért is adhat a COMSOL hamis megoldást a GK-egyenlet esetén. A hőimpulzus-kísérletnek is megfelelő q-peremeket használom. A megközelítés a (4.26)-(4.27) egyenletek gyenge alakjára épít, azaz

$$\int_V \left(\rho c_v \partial_t T + \partial_x q\right) w_1 \, \mathrm{d}V = 0, \tag{4.28}$$

$$\int_V \left(\tau \partial_t q + q + \lambda \partial_x T - \kappa^2 \partial_{xx} q\right) w_2 \, \mathrm{d}V = 0, \tag{4.29}$$

a leíró egyenletek integrális alakjára, ahol az úgynevezett $w_1(x)$ és $w_2(x)$ tesztfüggvényekkel kell megszorozni az egyenleteket, amelyek segítenek abban, hogy matematikailag kedvezőbb folytonossági tulajdonságokkal rendelkező megoldásokat keressünk. Habár a mérlegegyenletek esetén azok integrálalakja a természetes, és csak annak határértéke vezet a lokális, térpontra felírt differenciális alakra, a konstitutív egyenletek esetén ez már egy mesterséges lépés, mivel eredendően differenciálegyenletként, erős alakban származtathatóak. Ettől ez még egy lehetséges lépés, sőt, szükséges: a végeselem-módszer alapja ugyanis éppen az, hogy a vizsgált tartományt résztartományokra, úgynevezett végeselemekre bontjuk és a felhasznált bázisfüggvényeket lokálisan, egy elemre vonatkozóan definiáljuk úgy, hogy azzal biztosítani tudjuk a gyenge alak által a próbafüggvényekre, valamint a tesztfüggvényekre vonatkozó folytonossági feltételeket az elemhatáron. Ennek a speciális határesete az analitikus megoldásoknál használt Galjorkin-módszer, ahol ez globálisan, az egész testre vonatkozott. A mérlegegyenlet esetén a hőáramsűrűségen lévő deriváltat parciális integráláson keresztül át lehet hárítani a tesztfüggvényre,

$$\int_V \left(\rho c_v \partial_t T w_1 - q \frac{\mathrm{d}w_1}{\mathrm{d}x} \right) \mathrm{d}V = -[q_L(t) w_1(L) - q_0(t) w_1(0)], \tag{4.30}$$

amiből adódóan a q-ra előírt peremfeltételek az integrálási peremen megjelenő tagokba beépíthetőek lesznek, azaz a mérlegegyenletben forrástagként jelennek meg, az analitikus megoldásoknál peremleválasztással kapott megközelítéssel teljesen analóg módon. Ekkor w_1 esetén $w_1(0) \neq 0$ és $w_1(L) \neq 0$, máskülönben kiesnek a peremtagok. A módszertan ugyanígy jár el a konstitutív egyenlet esetén is, ott a másodrendű térderiváltból lehet egyet áthárítani a w_2 tesztfüggvényre,

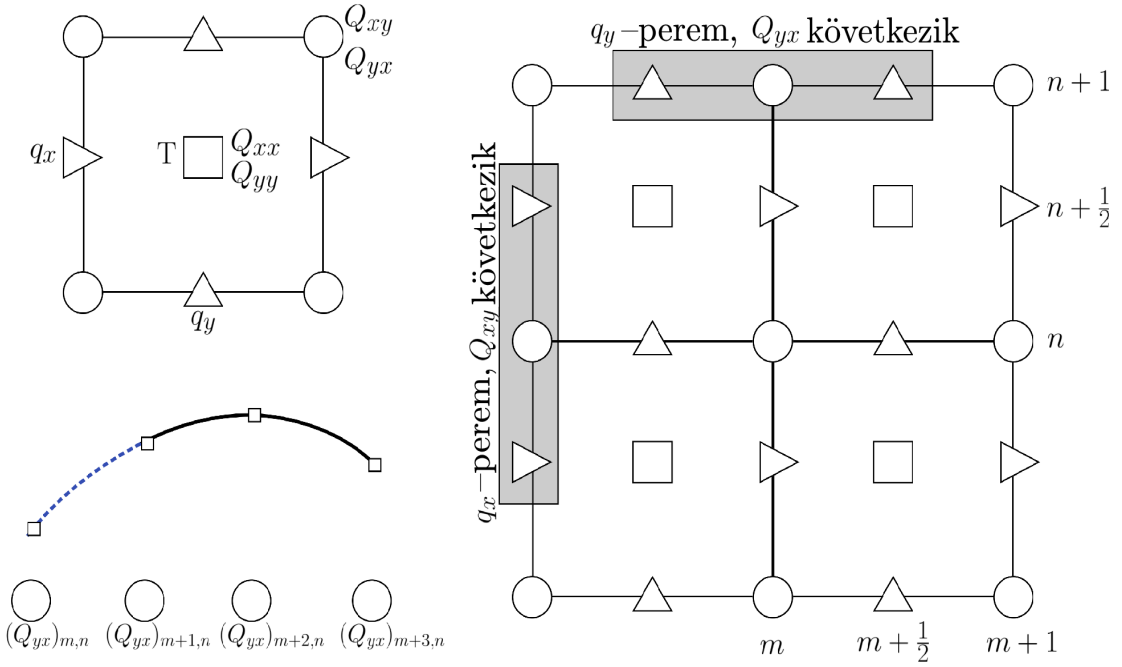
$$\int_V \left(\tau \partial_t q w_2 + q w_2 + \lambda \partial_x T w_2 + \kappa^2 \partial_x q \frac{\mathrm{d}w_2}{\mathrm{d}x} \right) \mathrm{d}V = \kappa^2 [\partial_x q(L) w_2(L) - \partial_x q(0) w_2(0)], \tag{4.31}$$

ahol azonban a $\partial_x q$ a peremen nem ismert és nem előírt függvény, ezért a peremen megjelenő tagokat szabadon hagyjuk. Ez arra is felhívja a figyelmet, hogy a GK-egyenlet ennek előírására is lehetőséget ad, ez választás és modellezés kérdése, és inkább a fononhidrodinamikai modellek esetében értelmes [157]. A teszt- és próbafüggvények felvétele után az integrálások elvégezhetőek és az integrálegyenletekből egy csatolt, időben közönséges differenciálegyenlet-rendszert kapunk, amiben különkülön szerepel a hőmérséklet és a hőáramsűrűség, emiatt ezt kétmezős módszernek nevezik, és megőrzi az egyenletek rendszerében való gondolkodást. Speciálisan, a [136] irodalomban az egyes mezőket és függvényeket polinomiális alakban kerestük, ahol a polinom fokszámának növelésével a hagyományos elemsűrítési eljárásnál sokkal gyorsabb konvergenciát lehet elérni.

A (4.30)-(4.31) összefüggésekből az olvasható ki, hogy a T, q és $w_{1,2}$ függvények nemcsak, hogy integrálhatóak kell legyenek, hanem a GK-egyenlet esetén azok deriváltja is. Ez azt jelenti, hogy ezek a függvények a $\mathcal{H}^1$ Szoboljev-tér elemei, valamint azok végessége miatt a $\mathcal{H}^1$ egy alterén alkotnak bázist és reprezentálják a megoldást. Ez egyrészt eltér az analitikus megoldásban látottaktól, ott ugyanis elegendő volt az, hogy az egyes függvények négyzetesen integrálhatóak, vagyis az $\mathcal{L}^2$ elemei

legyenek. Ugyanez az eltérés adódik a COMSOL-lal való összevetés esetén is. A COMSOL szintén csak $\mathcal{L}^2$-beli függvényeket használ [158], és a többmezős megfogalmazhatóság ellenére inkonzisztens megoldásokra vezet. Megjegyezem, hogy ez a GK-egyenlet sajátja, az MCV-egyenlet esetén az egyes függvényekre elegendő az $\mathcal{L}^2$-beli integrálhatóság, és így a COMSOL is helyes megoldásra vezet.

A Jeffreys-egyenlet szempontjából nincsenek ilyen függvénytérbeli inkompatibilitási problémák, mivel a modell csak időbeli kiterjesztéseket vezet be, így a további térderiváltak jelentette folytonossági és integrálhatósági nehézségek nem jelentkeznek. Ez megint csak rávilágít arra, hogy a Jeffreys-egyenlet matematikailag a GK-egyenlethez képest sokkal egyszerűbben, kényelmesebben kezelhető, és a Fourier-egyenlettel egyező függvényrendszerek numerikusan is működnek.



4.9. ábra. A kétdimenziós GK-egyenlet megoldására használt eltolt mezős diszkretizáció [159] alapján. A bal felső ábra mutatja az egyes mennyiségeknek a diszkrét rácson elfoglalt helyét, a jobb oldali a q-peremek és a $\mathbf{Q}$ keresztkomponensei közötti összefüggést. A bal alsó ábra egy Lagrange-polinomokra épülő extrapolációs eljárást szemléltet a $\mathbf{Q}$ peremen hiányzó keresztkomponenseire vonatkozóan.

4.2.2. A peremfeltételek kezelése 2D-ben

Ebben az alfejezetben újra csak a GK-egyenletre fókuszálok, ugyanis a Jeffreys-egyenlet esetén több térdimenzióban sem jelentkeznek a gradiensen felüli további térderiváltak. Az egyszerűség kedvéért a feladatot Descartes-koordinátákban tárgyalom, és az eltolt mezős módszertant alkalmazom a

$$\rho c_v \partial_t T + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \tag{4.32}$$

$$\tau \partial_t \mathbf{q} + \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \eta_1 \Delta \mathbf{q} + \eta_2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{q}, \tag{4.33}$$

egyenletek diszkretizációjára, követve a [159] irodalmat. Érdekes és fontos, hogy a

$$\mathbf{Q} := \mathbf{q} \otimes \nabla \tag{4.34}$$

bevezetésével

$$\tau \partial_t \mathbf{q} + \mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \eta_1 \mathbf{Q} \cdot \nabla + \eta_2 \nabla \mathrm{tr} \mathbf{Q} \tag{4.35}$$

alakra lehet a konstitutív részt átírni, azaz a $\mathbf{Q}$, mint a hőáramsűrűség gradiensének segédmennyiségként való bevezetése segíti a térderiváltak megfelelő diszkretizációját. Ebben jelen van a termodinamikai háttér is, mivel a $\mathbf{Q}$ az igen hasonló ahhoz a relaxált mezőhöz, amiről a Nyíri-szorzók kapcsán a 2. fejezetben szó volt. Az eltolt mezős módszerrel való rácspont kiosztást derékszögű koordináta-rendszerben a 4.9. ábra szemlélteti [159], ahol azt is jelöltem, hogyan viszonyul a $\mathbf{Q}$ a $\mathbf{q}$-ban adott peremfeltételekhez. Két fontos megállapítást kell tennem.

Az első állításom azt mondja, hogy a $\mathbf{Q}$ és a $\mathbf{q}$ nem függetlenek egymástól, és ha a $\mathbf{Q}$ szimmetrikus, akkor minden perempontja teljes egészében kiadódik a 4.9. ábrának megfelelően. Ezt a szimmetrikussági tulajdonságot mindig lehet előre ismerni, emiatt a második állításom azt mondja, hogy a $\mathbf{Q}$-beli peremfeltételek igen jó közelítését adja a belső térpontokból Lagrange-polinomok segítségével történő extrapoláció, amelyet szintén a 4.9. ábra szemléltet. Az extrapolációs megoldást úgy teszteltük, hogy a Fourier-egyenlet megoldását külön diszkretizációval, valamint a GK-egyenlet itt bemutatott megoldásával is előállítottuk, és 10^{-14} rendű hibán belül ugyanazt a megoldást kaptuk vissza térben és időben, valamint instabilitásokra nem vezetett [159]. Az extrapolációhoz mindenképpen csak egy másodrendű polinomot használtunk amiatt, hogy a tendenciát előjelőrző módon lehessen elvégezni. Ilyen tekintetben a fő kérdés, hogy a modellezésben figyelembe kívánjuk-e venni a hőáramsűrűség rotációját, ami a GK-egyenletnek szerves részét képezi, és ez például szuperfolyadékok termikus modellezésénél igen fontos járulékokat adhat [160]. Éppen emiatt a GK-egyenlet sokkal jobban tudja egyesíteni az alacsony hőmérsékletű jelenségeket a heterogén anyagok effektív leírásával, erre az egységes leírásra a Jeffreys-egyenlet csak igen korlátozottan képes. Ezzel szemben a Jeffreys-egyenlet megoldásait sokkal könnyebb előállítani, nincsenek kiemelkedő nehézségek sem az analitikus, sem a numerikus módszerek terén, amelyek instabilitásokra vagy hamis megoldásokra vezetnének. A további részleteket a G. függelék tartalmazza.

4.2.3. Nemlineáris feladatok

A megoldási módszerek lezárásaként három, térben egydimenziós nemlineáris modellt mutatok be, a Fourier-, az MCV- és a Jeffreys-egyenleteket, amelyekben a hővezetési tényező és a relaxációsidő-együtthatók hőmérsékletfüggőek, és azok numerikus, véges differenciák módszerére vonatkozó szempontjait vizsgálom a [100,133,134] irodalmak mentén, azon belül is főleg a numerikus stabilitási határok becslésére vonatkozóan. A következőkben kizárólag az előbb tárgyalt eltolt mezős módszertant fogom használni a diszkretizációhoz. Az állításom lényege az, hogy a lineáris egyenletekre használatos Neumann-módszer [156] ezekben a speciális – ámbár mérnöki szempontból igen lényeges – esetekben továbbra is használható, és annak egyfajta általánosítását adom meg anyagi nemlinearitásokra vonatkozóan.

I. Fourier-egyenlet. Ehhez először a Fourier-egyenlet példáját érdemes megvizsgálni, amiben a

$$\rho c_v \partial_t T + \partial_x q = 0, \tag{4.36}$$

$$q = -\lambda(T)\partial_x T \tag{4.37}$$

egyenleteket a véges differenciák módszerével diszkretizálom , valamint legyen $\lambda(T) = \lambda_0 + h(T - T_0)$, de a következőkben a T_0 referencia-hőmérsékletet elhagyom, mivel az egy eltolással nullába transzformálható. A

$$\frac{\rho c_v}{\Delta t}(T_{n+1,j} - T_{n,j}) + \frac{1}{\Delta x}(q_{n,j+1} - q_{n,j}) = 0, \tag{4.38}$$

$$q_{n,j} = -\frac{\lambda_0 + hT_{n,j}}{\Delta x}(T_{n,j} - T_{n,j-1}) \tag{4.39}$$

differenciaegyenletek stabilitási tulajdonságait kívánom meghatározni. A legegyszerűbb út az, ha a [161] alapján a $T_n \to T_{n+1}$ időpontok közötti leképezés tulajdonságait tekintjük, amellyel a stabilitási feltételt egzaktul meg lehet kapni. Ennek a leképezésnek a következő feltételeket kell kielégítenie:

1. a leképezés T-ben folytonos legyen;
2. a leképezés legyen szimmetrikus;
3. a leképezés mátrixának sorösszege legyen 1;
4. a leképezés mátrixának elemei legyenek nemnegatívak;
5. a leképezés mátrixának főátlójában lévő elemek legyenek pozitívak;
6. irreducibilis legyen, vagyis bármely T-hez egyértelműen tartozik egy $\lambda(T) > 0$ elem.

Ez a leképezés felírható egy tridiagonális mátrixként, amiben minden sorban a $[\gamma;\ 1-2\gamma;\ \gamma]$ elemek találhatóak, és

$$\gamma = \left\{ a_0 \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\lambda_0 + hT_{n,j}}{\lambda_0} \right\}. \tag{4.40}$$

Egy kivételével minden feltétel triviálisan teljesül, a negyedik feltétel megadja a stabilitási kritériumot, amely szerint $1 - 2\gamma > 0$, azaz a

$$1 > 2\mathrm{max}_{n,j} \left\{ a_0 \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\lambda_0 + hT_{n,j}}{\lambda_0} \right\} \tag{4.41}$$

feltételre vezet, vagyis γ akkor a legnagyobb, ha a $T_{n,j}$ maximumot vesz fel, és aminek a teljesülése szükséges és elégséges a nemlineáris Fourier-egyenlet megoldásához [100], és lineáris esetben ($h = 0$) a klasszikus FTCS séma által adott stabilitási feltételre redukálódik. Azonban ez a módszer nem látszott általánosíthatónak a

Fourier-egyenleten túlmutató esetekre vonatkozóan, de ez a felismerés motivált arra, hogy a Neumann-módszert a következők szerint módosítsam.

A Neumann-módszer lényege az, hogy a diszkretizáció eredményeként kapott differenciaegyenletek megoldását síkhullám formájában keressük, egyfajta diszkrét diszperziós relációként, például a hőmérsékletre felírva

$$T_{n,j} = \tilde{T}\psi^n e^{ikj\Delta x}, \tag{4.42}$$

ahol i a képzetes egység, k a hullámszám, $j\Delta x$ fejezi ki a j-edik térlépést, valamint ψ a hullám amplitúdója, amely minden n időlépésben hatványozódik. Ebből az következik, hogy akkor lesz stabil a hullám, ha annak ψ amplitúdója bármely n esetén felülről korlátos, tehát $|\psi| \leq 1$, $\psi \in \mathbb{C}$. A $\tilde{T}$ hőmérséklet-amplitúdó dimenzionális okokból szükséges, a módszer szempontjából nincs kiemelt jelentősége. Ha több mezővel kell dolgozni, akkor minden mezőre érvényes lesz a (4.42) alak, de eltérő amplitúdóval (például q mező esetén $\tilde{q}$-al). A (4.42) hullámmegoldást visszahelyettesítve a (4.38)-(4.39) egyenletekbe ψ-re egy $p(\psi) = p_2\psi^2 + p_1\psi + p_0$ karakterisztikus polinomot kapunk (lineáris esetben), amely polinom $p_{0,1,2}$ együtthatóira a

- $p(\psi = 1) \geq 0 \Rightarrow p_2 + p_1 + p_0 \geq 0$,
- $p(\psi = -1) \geq 0 \Rightarrow p_2 - p_1 + p_0 \geq 0$,
- $|p_0| \leq p_2$,

Jury-kritériumok [162] teljesülését írjuk elő. A kritériumok ellenőrzéséből kapjuk meg a numerikus stabilitási feltételeket. Ez azt jelenti, hogy a polinom gyökeit a komplex egységkörön vagy azon belül tartjuk, mindezt úgy, hogy csak a polinom együtthatóit használjuk fel. A polinom fokszámához képest mindig eggyel több feltételre van szükség, és ez a módszertan általánosan működik bármely lineáris egyenletrendszerre. Meg kell jegyezni, hogy a kiadódó stabilitási feltételek nem mindenképpen egzaktak, mivel a peremfeltételek hiányoznak belőlük, de a stabilitási kritériumokat igen jól közelítik, és a mérnöki gyakorlat számára ez is nagyon jó eredménynek mondható. Nemlineáris esetben a $p(\psi)$ polinom együtthatói hőmérsékletfüggőek lesznek, tehát a stabilitás is állapotfüggővé válik. Az ötletem az, hogy a $\lambda(T)$ függvényben a T helyére egy $T_{\max}$ maximális hőmérséklet értéket lehet behelyettesíteni, amely hőmérséklet a teljes folyamat alatt, térben és időben kialakuló maximális érték [100]. Mivel ez a hőmérséklet függ a kezdeti és peremfeltételektől, valamint a modelltől, emiatt erre egzakt értéket nem lehet mondani, még akkor sem, ha hőmérséklet-peremfeltételeket írunk elő. Ugyanis, általános esetben a Fourier-egyenleten túli modellek része a hullámterjedés (második hang) leírása, így ilyen modellek esetén a hőmérséklet lokálisan akár jóval meghaladhatja a peremfeltételként előírt hőmérsékletet is. Azt a meggondolást viszont kihasználom, hogy ezt a maximális hőmérsékletet a lineáris egyenlet megoldásából becsülhetem, mivel adott kezdeti és peremfeltételekre ezt gond nélkül elő lehet állítani. Ezt a Fourier-egyenlet példáján demonstrálva azt kapom, hogy a polinom együtthatói:

$$p_1 = 1, \quad p_0 = 4a_0\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\frac{\lambda_0 + hT_{\max}}{\lambda_0} - 1, \tag{4.43}$$

ahol $a_0 = \lambda_0/(\rho c_v)$ egy T_0 referencia-hőmérsékletre vett hőfokvezetési tényező. Ekkor a

$$\psi = 1 - 4a_0 \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\lambda_0 + hT_{\max}}{\lambda_0} \tag{4.44}$$

megoldást kapom, amire a $|\psi| \leq 1$ feltételt előírva azonnal meg is találom a (4.41) stabilitási kritériumot. Itt a Jury-kritériumokra azért nem volt szükség, mert az időben elsőrendű modell miatt egy igen egyszerű polinomot kaptam eredményül, de az MCV- vagy a Jeffreys-egyenletek kapcsán már összetettebb a helyzet.

II. MCV-egyenlet. Ezt az eljárást megismételem az MCV-egyenlet példáján, azaz a

$$\rho c_v \partial_t T + \partial_x q = 0, \tag{4.45}$$
$$\tau(T)\partial_t q + q = -\lambda(T)\partial_x T \tag{4.46}$$

egyenletrendszeren, amelyben feltételezem, hogy $\lambda(T) = \lambda_0 + h_1(T - T_0)$ és $\tau(T) = \tau_0 + h_2(T - T_0)$ alakban írhatóak, ahol h_1 és h_2 paraméterek lehetnek negatívak is, de természetesen a termodinamika $\lambda, \tau \geq 0$ követelményeivel összhangban, valamint $\lambda(T_0) = \lambda_0$, $\tau(T_0) = \tau_0$, és itt is elhagyom a T_0 referencia-hőmérséklet kiírását.

Alkalmazva az előzőekben is leírt véges differenciák módszerén alapuló eltolt mezős módszertant, a [100] irodalommal összhangban, a

$$\frac{\rho c_v}{\Delta t}(T_{n+1,j} - T_{n,j}) + \frac{1}{\Delta x}(q_{n,j+1} - q_{n,j}) = 0, \tag{4.47}$$

$$\frac{\tau_0 + h_2 T_{n,j}}{\Delta t}(q_{n+1,j} - q_{n,j}) + q_{n,j} = -\frac{\lambda_0 + h_1 T_{n,j}}{\Delta x}(T_{n,j} - T_{n,j-1}) \tag{4.48}$$

differenciaegyenleteket kapom, amibe a (4.42) egyenlet behelyettesítésével lineáris esetben ($h_1 = 0$, $h_2 = 0$) ψ-re egy $p(\psi) = p_2\psi^2 + p_1\psi + p_0$ karakterisztikus polinomot kapok, amely polinom $p_{0,1,2}$ együtthatóira a Jury-kritériumok teljesülését írom elő. A nemlineáris MCV-egyenlet példáján a harmadik Jury-kritérium adja meg a stabilitási feltételt, miszerint a Δt időlépésre

$$\Delta t < \frac{\Delta x^2}{4a_0} \frac{\tau_0 + h_2 T_{\max}}{\tau_0} \frac{\lambda_0}{\lambda_0 + h_1 T_{\max}}, \quad a_0 = \frac{\lambda_0}{\rho c_v} \tag{4.49}$$

feltételnek kell teljesülnie. A Fourier-egyenlet esetén a $T_n \to T_{n+1}$ közötti leképezésre ismert ez a stabilitási feltétel, de a Fourier-egyenleten túlra azonban az előbb bemutatott közelítés általánosítja a Neumann-módszert, amely speciálisan a Fourier-egyenletre ugyanazt a feltételt szolgáltatja. Ez nem ekvivalens egy linearizálással, de a nemlinearitást megszünteti, és a stabilitási feltételre egy jól használható becslést szolgáltat [100, 133]. Ez kétdimenziós esetekre is származtatható [134].

III. Jeffreys-egyenlet. Az anyagi nemlinearitások lehetséges figyelembevétele során mélyebben is elemeztem az időskálák szerepét és azt a megállapítást tettem, hogy a

$$q = -\frac{l_{11}}{T_0^2}\partial_x T + l_{12}(T)(-k\xi), \tag{4.50}$$

$$\partial_t \xi = -\frac{l_{21}(T)}{T_0^2}\partial_x T + l_{22}(-k\xi), \tag{4.51}$$

onsageri rendszerből a ξ belső változó kiküszöbölése után megjelenik egy nemlineáris kiegészítés, azaz

$$\rho c_v \partial_t T + \partial_x q = 0, \tag{4.52}$$

$$\tau\partial_t q + q = \tilde{\lambda}_1(T)\partial_x T + \tilde{\lambda}_2\partial_{tx}T + \tau\frac{1}{l_{12}(T)}\frac{\mathrm{d}l_{12}(T)}{\mathrm{d}T}\partial_t T\left(q - \frac{\tilde{\lambda}_2}{\tau}\partial_x T\right), \tag{4.53}$$

konstitúciós összefüggés jobb oldalán kapok egy igen bonyolultnak látszó nemlineáris tagot. A korábbi megállapításom szerint az egydimenziós modellben figyelembe vett $\lambda(T)$ függés gyors folyamatokra nagy részben kiküszöbölhető akkor, ha ezt a transzportegyütthatók is lehetővé teszik.

Az eltolt mezős diszkretizációs módszertan szerint a ξ és a q a diszkrét rácson ugyanott kell helyet foglaljon, mivel azok közvetlenül arányosak egymással. Ez azt jelenti, hogy egy q-perem esetén a ξ is a peremre kerül, így mellé a hőmérséklet gradiensét vagy a ξ belső változót is meg kell adni. Mivel a belső változó pontos fizikai jelentését nem ismerjük, a q és a $\partial_x T$ egymástól különbözik, és csak a q ismert, emiatt egyikre sem szeretnénk a peremen mesterséges feltételeket szabni, így a ξ kiküszöbölése szinte szükségszerű. Ráadásul, ha a ξ-t előírjuk a peremen, akkor abból a (4.51) miatt a $\partial_x T$ is következik, amiből q (4.50) miatt szintén kiadódik. Ez a probléma akkor okoz kevesebb kellemetlenséget, ha az $l_{11} = 0$ helyettesítéssel megfeleltetjük egymásnak a hőáramsűrűséget és a belső változót, így az MCV-egyenletre redukáljuk a modellt, tehát a fennálló arányosság miatt már a kétféle peremfeltétel meg fog egyezni. Tehát választhatunk: q-perem esetén kiküszöbölünk, vagy közvetlenül a ξ-re írunk elő peremfeltételt. De ez a választási lehetőség csupán elvi, hiszen egyrészt csak a hőáramsűrűséget ismerjük, mint fizikai mennyiséget, másrészt csak a kiküszöbölés során azonosított transzportegyütthatókat lehet a mérésekből egyértelműen meghatározni. Emiatt a (4.52)-(4.53) rendszer megoldása szükségszerű, és a kiadódó nemlinearitásokat az onsageri szinttől kezdődően követni kell, így ezért még hangsúlyosabb az időskálák és bizonyos nemlinearitások kiküszöbölhetőségének a szerepe. A $\lambda(T)$ függést l_{21}-en keresztül célszerű figyelembe venni, mivel az a kiküszöbölés után nem vezet be bonyolult nemlineáris járulékot, valamint szintén nem érinti a többi transzportegyütthatót.

A dolgozatomban közölt eredmények és állítások teljes követhetősége érdekében a (4.53) diszkretizációját is bemutatom. Legyen most $l_{12}(T) = l_{12,0} + h_1 T$, de l_{21}

maradjon konstans, ugyanis ez nem befolyásolja a nemlineáris járulékot, így

$$\frac{\rho c_v}{\Delta t}(T_{n+1,j}-T_{n,j})+\frac{q_{n,j+1}-q_{n,j}}{\Delta x}=0, \tag{4.54}$$

$$\begin{aligned}\frac{\tau}{\Delta t}(q_{n+1,j}-q_{n,j})+q_{n,j}=&-\frac{\tilde\lambda_0+h_1T_{n,j}}{\Delta x}(T_{n,j}-T_{n,j-1})\\&+\frac{\tilde\lambda_2}{\Delta t\Delta x}\Big(T_{n+1,j}-T_{n+1,j-1}-T_{n,j}+T_{n,j-1}\Big)\\&+\tau\mathrm{C}(T_{n,j})\frac{T_{n+1,j}-T_{n,j}}{\Delta t}\left(q_{n,j}-\frac{\tilde\lambda_2}{\tau}\frac{T_{n,j}-T_{n,j-1}}{\Delta x}\right),\end{aligned} \tag{4.55}$$

ahol a $C(T_{n,j})=h_1/(1+h_1T_{n,j})$ módon reprezentálható, mivel $l_{12,0}$-át az egyszerűség kedvéért egységnek is választhatjuk, a transzportegyütthatókat nem befolyásolja, de nulla nem lehet, valamint a $h_1=0$ határesetben kiejti a teljes nemlineáris kiegészítést. Az eddigiek alapján természetesnek tűnik, hogy a $\lambda(T)$ és $C(T)$ függvényekben vegyük figyelembe a $T_{\max}$ értéket, amit az adott hőmérséklet-peremfeltétel (legalább részben) meg tud kötni. Ezt a gondolatot ki kell terjeszteni a $\partial_t T$ tagra is, máskülönben nem lehet a Neumann-módszert használni. Ehhez szintén felhasználom a lineáris megoldást, illetve a peremfeltételt, és abból is elegendő a maximális értéket behelyettesíteni, mivel a stabilitási határt a leggyorsabb folyamatok adják meg, és ezt a két tagot egységesen $\tilde C(T_{\max})=C(T_{\max})(\partial_t T)_{\max}$ módon fogom jelölni. Ekkor a polinom együtthatói a következők:

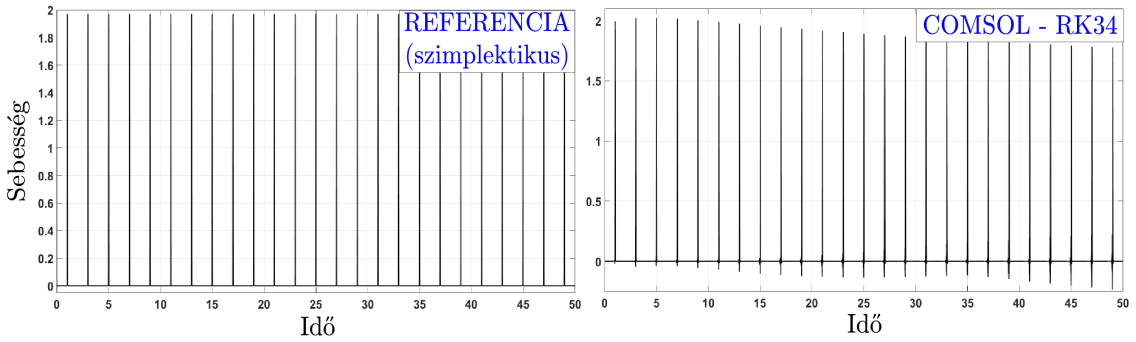
$$\begin{aligned}p_2&=1,\\ p_1&=\frac{\Delta t}{\tau}-\tilde C(T_{\max})\Delta t-\frac{4\Delta t\tilde\lambda_2}{\rho c_v\tau\Delta x^2}-2,\\ p_0&=1-\frac{\Delta t}{\tau}+\tilde C(T_{\max})\Delta t+\frac{4\Delta t^2}{\tau\rho c_v\Delta x^2}\left(\tilde\lambda_0+h_1T_{\max}+\frac{\tilde\lambda_2}{\Delta t}+\tilde C(T_{\max})\tilde\lambda_2\right),\end{aligned} \tag{4.56}$$

amelyekre adott paraméterek, peremfeltételek esetén a Jury-kritériumok ellenőrzését numerikusan azonnal el lehet végezni a beállított idő- és térlépések függvényében. Az együtthatóknál minden egyes tag dimenziótlan kell legyen, ami egy visszacsatolás a számolásunk ellenőrzéséhez. Az $l_{21}(T)=l_{21,0}+h_2T$, és konstans l_{12} esetet az előzőekből azonnal megkapom a $\tilde C(T_{\max})=0$ és $h_1\to h_2$ helyettesítésekkel, amiből a stabilitási feltétel

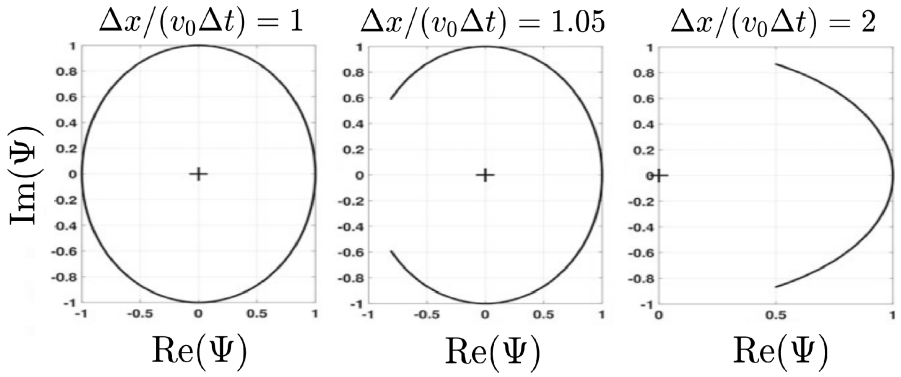
$$4\frac{\Delta t(\tilde\lambda_0+h_2T_{\max})+\tilde\lambda_2}{\rho c_v}\le\Delta x^2. \tag{4.57}$$

IV. Kiegészítés a Neumann-módszerhez: a disszipációs és diszperzív hibák. Újra visszatérve a lineáris (T-független) esetekre, a disszipációs hiba azt mondja meg, hogy az időben való léptetés során hogyan torzul a síkhullám amplitúdója, azaz a $|\psi|$ viselkedése a kérdés. Amíg a Jury-kritériumok úgy kényszerezik

a $p(\psi)$ polinom gyökeit, hogy azok a komplex egységkörön vagy azon belül legyenek (teljesítve a stabilitási feltételeket), addig a $p(\psi)$ gyökeit vizsgálhatjuk úgy, mint a diszkretizációs paraméterek, Δt és Δx függvényeként. Természetesen itt adottnak tekintjük az eredeti parciális differenciálegyenlet együtthatóit és a diszkretizációt, de ezenfelül az idő- és térlépések, valamint a transzportegyütthatók függvényeként is változik a $|\psi|$ viselkedése. Egy sémát konzervatívnak neveznek, ha $|\psi| = 1$, ettől eltérő esetekben a séma disszipatív.



4.10. ábra. Egy rugalmas hullámterjedési feladat numerikus megoldása. Balra: konzervatív ($|\psi| = 1$) tulajdonságú, szimplektikus módszer eredménye. Jobbra: a COMSOL Runge-Kutta-alapú megoldása. A hullámalaknak pontosan ugyanolyannak kell maradnia. A disszipációs hibát az amplitúdó csökkenése, a diszperziós hibát a visszaverődéseknél megjelenő mesterséges oszcilláció mutatja, [151] alapján.

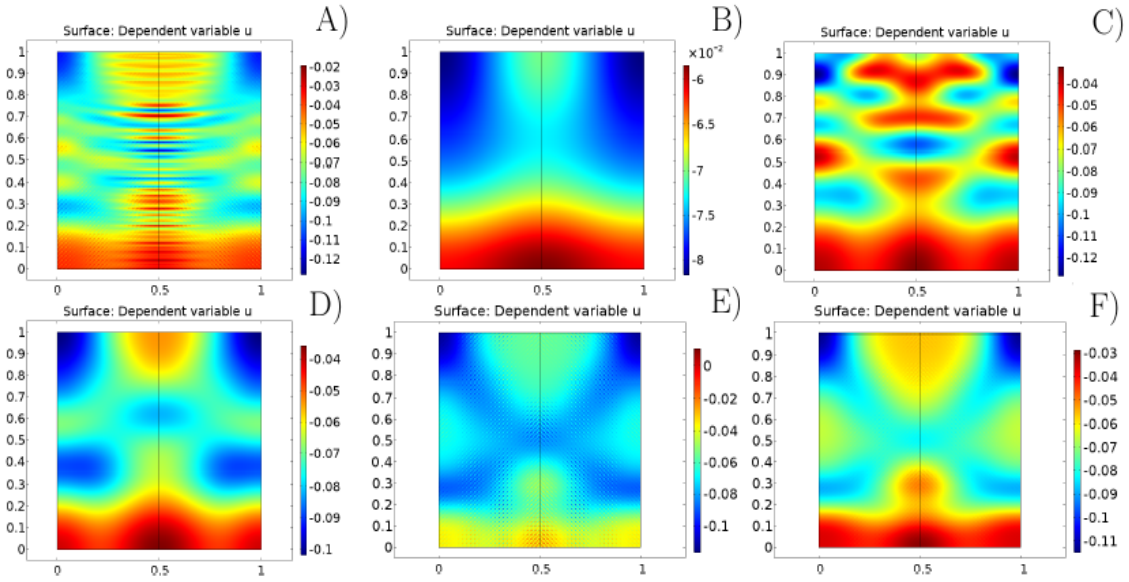


4.11. ábra. A $|\psi|$ viselkedése egy akusztikus hullámterjedési feladatra alkalmazott szimplektikus Euler séma esetére, [58] alapján. A séma konzervatív ($|\psi| = 1$), azaz mindig az egységkörön mozgunk, így disszipációs hibát várhatóan nem fogunk tapasztalni, de ettől még a teljes egységkört nem fedi le a ψ amplitúdó, tehát diszperziós, oszcillációs hibákra számíthatunk.

Ennek igazán konzervatív hullámterjedési esetekben van relevanciája (például rugalmas, akusztikus hullámterjedési szimulációk esetében [151,153], lásd a 4.10. ábrát), de akár disszipatív modellek, vagy csatolt termomechanikai jelenségek esetén is érdekes információ lehet, főleg a hiperbolikus hővezetési egyenletek megoldásában (4.3. ábra). Erre mutat rá a [135] publikációm is, ahol a tisztán implicit és a Crank–Nicolson sémák összehasonlításából is látszik ez a különbség, de leginkább

csak a hullámfront környezetében. Nemlineáris (T-függő) esetekben mindez úgyis vizsgálható, hogy a T-függő transzportegyütthatókban lévő hőmérsékletet szintén paraméterként kezeljük a T_0-tól kezdve $T_{\max}$-ig bezárólag [133,134]. Továbbá, a h_1 és h_2 együtthatókat is tekinthetjük paramétereknek, amelyek a nemlinearitás erősségét (meredekségét) szabják meg.

A Neumann-módszer további előnye, hogy a diszperziós hibák meglétére is becslést adhatunk. Lineáris esetben – figyelembe véve, hogy $\psi \in \mathbb{C}$, egy $\mathrm{Im}(\psi)$-$\mathrm{Re}(\psi)$ koordináta-rendszerben vizsgálhatjuk, hogy ψ mennyire fedi le a komplex egységkört (amennyiben $|\psi| = 1$), demonstrációs jelleggel ez látható a 4.11. ábrán. Ha teljes egészében bármely hullámszámra lefedi, az azt jelenti, hogy a választott diszkretizáció és a modell paraméterei (szintén ideértve a h_1, h_2, T-függéseket) a valós megoldást teljes egészében reprezentálni tudják, nincs olyan része a hullámcsomagnak, ahol levágás történne. Ezt szokták úgyis interpretálni, hogy a numerikus séma közelítése a pontos megoldáshoz képest fázishibát hoz létre. De ez annak köszönhető, hogy a közelítő megoldás nem tudja a valós megoldás minden részét előállítani, amit aztán mesterséges, fizikai tartalommal nem rendelkező oszcillációkként vehetünk észre.



4.12. ábra. COMSOL beépített akusztikus hullámterjedési moduljának demonstrációs jellegű megoldásai, amelyben a kezdeti és peremfeltételek, a hálózás és a terjedési sebesség azonos, az eltérés az egyes időintegrálási módszerekben van, [152] alapján. Az A)-tól D)-ig tartó ábrák a visszalépő Euler-módszert mutatják különféle rendig tartó közelítésekkel, főleg disszipatív hibával terhelve. E) Ötödrendű Dormand-Prince-módszer, főleg instabil megoldásokat eredményezve. F) Negyedrendű Runge-Kutta-módszer, stabil, de főleg disszipatív és diszperzív hibákkal terhelve.

A 4.10. ábra szintén mesterséges hibákkal terhelt hullámmegoldást szemléltet, minden visszaverődés esetén oszcilláció figyelhető meg, ami nem része a valós megoldásnak. Ez egyaránt jellemző a véges differenciák és végeselemes módszerekre, de a Neumann-módszer segítségével a véges differenciák esetén erre konkrét becsléseket is lehet adni. A COMSOL esetén ezt a viselkedést különféle hálózással, hálótípusokkal, időintegrálási sémák tesztelésével lehet vizsgálni. Ebből a szempontból különösen

érdekes a 4.12 ábrán látott viselkedés, amely a COMSOL beépített, skalármezős hullámterjedést szimuláló moduljával készült [152]. Azonos hálózásra a különféle időintegrálási módszerek eltérő megoldásokat adnak, és ez a hálózás finomításával sem változik.

4.3. Összefoglalás

Ebben a fejezetben olyan módszereket mutattam be, amelyek az MCV-, a GK- és a Jeffreys-egyenletekre analitikus és numerikus úton adnak megbízható megoldásokat. A tesztfeladatok arra világítanak rá, hogy az egyenletek rendszerében való gondolkodás elkerülhetetlen. Ezt lineáris esetben a peremfeltételek helyes kezelése követeli meg, de nemlineáris esetben nincs is más lehetőség. Az analitikus megoldások tekintetében a legfontosabb megfigyelésem az, hogy a Fourier-egyenlethez képest nincsen szükség további peremfeltételekre, valamint az első- és másodfajú peremfeltételek esetén a sajátfüggvény-sajátérték rendszerek a GK- és Jeffreys-egyenletekre átszármaztathatóak. Numerikus szempontból a peremfeltételek kezelése, valamint a nemlineáris hővezetési egyenletek numerikus stabilitásának becslése a legfőbb kutatási eredményem, a következő tézisek ezeket az eredményeket foglalják össze.

5. Tézis – Az analitikus megoldások sajátosságai

A Guyer–Krumhansl- és a Jeffreys-egyenlet hőmérséklet-reprezentációja alapján megállapítottam, hogy első- és másodfajú peremfeltételek esetén ugyanaz a sajátfüggvény-sajátérték rendszer használható. Erre építve kidolgoztam egy speciális, Galjorkin-módszerre épülő analitikus megoldási technikát. Megadtam az inhomogén kezdeti feltételek következményeit, és egy termodinamikailag konzisztens módszert ajánlottam a kezdeti időderiváltak figyelembevételére.

Az 5. tézishez kapcsolódó publikációk: [6, 73, 103, 125, 133, 139, 140].

6. Tézis – A nemlineáris hővezetési egyenletek numerikus stabilitása

A nemlineáris, hőmérsékletfüggő transzportegyütthatókkal rendelkező Fourier-, Guyer–Krumhansl- és a Jeffreys-féle hővezetési egyenletek numerikus stabilitásának vizsgálatához kiterjesztettem a Neumann-módszer érvényességét és egy módszert adtam a stabilitási határok becslésére. Megállapítottam, hogy a transzportegyütthatókat az anyag olyan állapotán kell figyelembe venni, ahol a leggyorsabb a karakterisztikus terjedési sebesség, és ennek becslésére a lineáris megoldásból kapott hőmérsékletbeli szélsőérték használható.

A 6. tézishez kapcsolódó publikációk: [58, 100, 102, 133, 134].

5. fejezet

Heterogén anyagok termikus jellemzése

Ebben a fejezetben a gyakorlati felhasználásokra, valamint a kísérleti tapasztalatok összegzésére helyezem a hangsúlyt. Ezek a kísérletek a 4.1. ábrán már korábban bemutatott hőimpulzuselvű mérések. A fejezetben bemutatott kísérleti eredményeket Fehér Anna doktoranduszhallgatómmal közösen értük el, ezek részletes dokumentációját az ő Ph.D. dolgozata tartalmazza. Az effektusok reprodukálhatóságát hosszútávú, 100 mérésből álló sorozatokkal ellenőriztük, a közölt adatokat ±5%-os pontosság jellemzi.

5.1. Az effektív leírás jellemzői

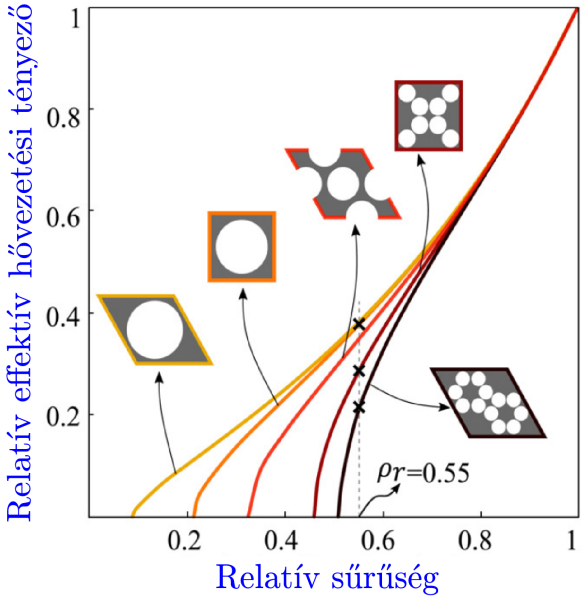
A gyakorlati alkalmazások során válik igazán hangsúlyossá a vizsgált kontinuummodellek univerzalitása, vagyis az, hogy a javasolt hővezetési egyenletek alkalmazása nem szerkezetspecifikus. Ez alatt azt értem, hogy a hővezetési modell független a konkrét anyagi szerkezettől, a Fourier-törvényhez hasonlóan ezt a GK- és a Jeffreys-egyenletek is teljesítik. A szakirodalomban gyakran használnak olyan közelítő összefüggéseket – főleg a hővezetési tényezőre – amely teljes mértékig kihasználja az adott heterogén szerkezet tulajdonságait. Ez azt jelenti, hogy ezeknek az összefüggéseknek a használatához ismerni kell nemcsak az anyagszerkezetet, hanem azok gyártásának technológiai paramétereit is. Ennek az az oka, hogy a határfelületeken létrejövő kontaktellenállás függ a mechanikai jellemzőktől, így a nyomástól is. Ha egy adott heterogén anyagot nagy nyomáson állítanak elő, akkor ott várhatóan a határfelületeken is kisebb ellenállás jön létre. Mivel akár igen nagy is lehet a határfelületek mértéke, ezért az eredő hővezetési tulajdonságok is jelentősen függenek ettől. A teljesség igénye nélkül néhány példa [163–166] irodalmakban található effektív hővezetési tényező becslésekre:

Voigt-típusú :
$$\lambda_{\text{eff}} = \hat{V}_1\lambda_1 + \hat{V}_2\lambda_2, \tag{5.1}$$

Reuss-típusú :
$$\lambda_{\text{eff}} = \frac{1}{\frac{\hat{V}_1}{\lambda_1} + \frac{\hat{V}_2}{\lambda_2}}, \tag{5.2}$$

Markworth és mtsi :
$$\lambda_{\text{eff}} = \hat{V}_1\lambda_1 + \hat{V}_2\lambda_2 + \hat{V}_1\hat{V}_2\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\frac{3}{\frac{\lambda_1}{\lambda_1}-1} + \hat{V}_1}, \tag{5.3}$$

kovacsr_325_25



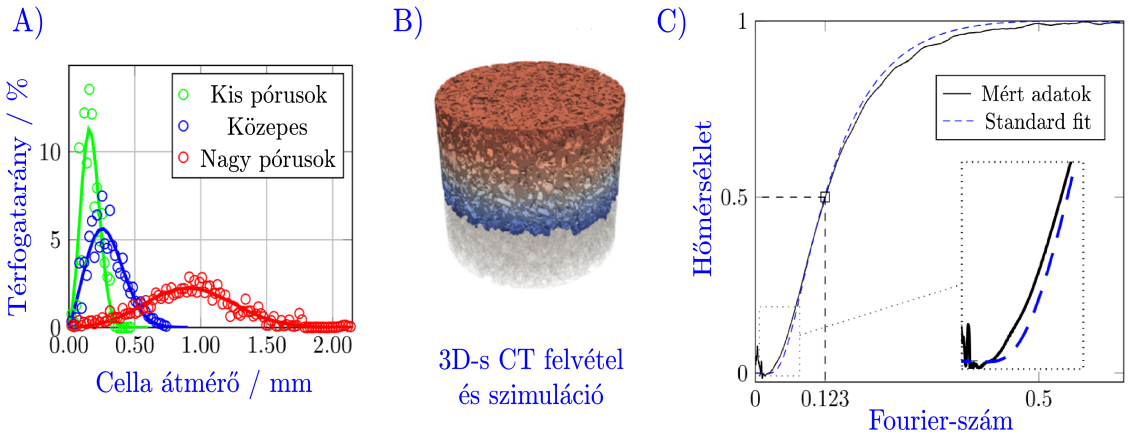
5.1. ábra. Az anyag szerkezetétől függő effektív hővezetési tényező változása a sűrűség függvényében, [167] alapján. A relatív jelzők a mátrixanyaghoz képesti jellemzőkre értendőek.

amelyekben az "1" és "2" indexek a két komponensre vonatkoznak, és a λ, $\hat{V}$ mennyiségek a komponensekhez tartozó hővezetési tényezőt és azok térfogatarányát jellemzik. Az ilyen képletek mögött igen sokféle elgondolás húzódik, például az, hogy a komponensek egymáshoz képest hogyan helyezkednek el (soros, párhuzamos kapcsolások vagy ezeknek valamilyen keveréke), azok térfogati arányai, a heterogenitások geometriai jellemzői (gömb, hasáb, rétegelt, stb.), de igen nehéz figyelembe venni az érintkező felületeken jelentkező hőellenállásokat. Erre egy igen kiváló példát a szemcseerősített mátrixú kompozit fémhabok esetén látunk [82], ahol egyértelműen az mutatkozik meg, hogy a szemcseerősítő anyag azonos térfogatarányban, de eltérő méretekben való alkalmazása jelentősen befolyásolja a kialakuló hővezetési képességet, tehát a heterogenitások számossága, mennyiségi jellemzése is fontos, nem csak azok minőségi jellemzői. Ez azt jelenti, hogy minél több a szemcse, annál nagyobb az érintkező felület mértéke, tehát annál több hőellenállás jelentkezik a rendszerben.

Ezeknek a vizsgálatoknak egy igen fontos és mérnökileg releváns tanulsága az, hogy habár a részletes modellezési megközelítés, az anyagi szerkezet pontos figyelembevétele is egy lehetőség, de ezt a gyakorlatba igen nehéz átültetni, rendkívül specifikus és korlátozott érvényességi tartománnyal bír. Erre szintén egy jó szemléltetés található a [167] irodalomban, ahol különféle belső szerkezet esetén vizsgálják az effektív jellemzők változása okozta hőmérséklet-változást. A belső szerkezet hatása a nagyobb porozitások (kisebb relatív sűrűségek) felé haladva egyre erősödik (lásd az 5.1. ábrát). Bármely változtatás esetén a teljes kísérlet- vagy szimulációsorozatot újra kell kezdeni és új korrelációkat kell keresni. A heterogén anyagok lehetséges típusainak igen nagy száma miatt ez a fajta modellezési megközelítés egyelőre általánosan nem járható.

A fémhabok részletes modellezési megközelítésére egy érdekes és fontos példát A. Lunev és munkatársai mutattak [54]. Fontos kiemelni, hogy ezek független méré-

sek voltak szabványos hőimpulzuselvű berendezésen. Az 5.2. ábra szerint a Fourier-egyenlettől való eltérést ugyanolyan alakban figyelték meg, a [117,119,148] publikációimhoz teljesen hasonló módon. A méréseik valódiságát úgy ellenőrizték, hogy az adott próbatestről pontos háromdimenziós modellt készítettek egy szkennelési eljárás segítségével. Azon belül minden határfelületre megadták a megfelelő hőátadási és sugárzási peremfeltételeket és a kísérletet végeselemes módszerrel modellezték. A mátrixanyag hővezetésére a Fourier-törvényt használták. A kisméretű üregek miatt igen finom hálózásra van szükség, valamint több időlépésekénti iterációra a sugárzási peremfeltételek nemlinearitása miatt. Ez már egy szuperszámítógép számítási teljesítményét igényli, mindezt azért, hogy a valóságban egy nagyságrendileg 5 másodperc alatt lejátszódó folyamatot modellezni lehessen egy adott próbatestre vonatkozóan. Lunev és munkatársai konklúziója szerint a szimulációk a méréseket pontosan reprodukálták, de a mérést a Fourier-egyenlettel effektíven nem lehet leírni, két időskálára van szükség [54]. Ez is tovább motiválja a két időskálás hővezetési modellek létjogosultságát.



5.2. ábra. Lunev és mtsi. munkája alapján [54]. A) Háromféle fémhab próbatestet készítettek elő, nagyságrendileg 60%-os porozitással rendelkeztek. A) Pórusméretek eloszlása a három esetben. A legkisebb pórusok mérete 0,2 mm körüli, a legnagyobb 1 mm feletti. B) Egy részletes CT felvétel és az azon végzett hőimpulzus-kísérlet szimulációját szemlélteti a közepes pórusmérettel rendelkező mintán. C) Egy LFA hőimpulzus-berendezéssel mért hátfali hőmérséklet és az ahhoz illesztett Fourier-egyenlet megoldása.

5.2. Az effektív leírás következményei

5.2.1. Statikus és dinamikus termikus paraméterek

A második szempont az, hogy a szabványos hőimpulzuselvű mérőberendezések csak igen korlátozott próbatest vastagságig használhatóak. Ez a gyakorlatban azt jelenti, hogy 5, esetenként 6 mm lehet a legnagyobb próbatest vastagsága. Ez a méretartomány összemérhető lehet a heterogenitások (például az üregek) méretével, de egyben várhatóan messze el is marad attól a mérettől, ahonnan már kiátlagolhatónak lehetne tekinteni a heterogenitások hatásait. Egy általános ökölszabály szerint a heterogenitások jellemző méretétől legalább hat, de inkább azok nyolcszorosa felett

tekinthető a próbatest reprezentatívnak. Ezt ilyen esetekben nem lehet teljesíteni, és ez nem csak a hőimpulzuselvű mérések sajátossága. Például egy dinamikus termomechanikai teszthez egy DMA[1] berendezésbe nem lehet 15-20 mm vastagságú fém próbatestet behelyezni, mivel általában véve sem maga a mérőcella mérete, sem a berendezés által kifejtett erőhatások nem elegendőek ehhez. Ebből az következik, hogy egy ilyen LFA rendszerű hőimpulzuselvű mérés során, amely kifejezetten a hőfokvezetési tényező tranziens elvű meghatározására szolgál, a mérésekben nem feltétlenül csak egy hővezetési időskála válik megfigyelhetővé. Felidézve, a Fourier-féle hővezetési egyenletben csak egy hőfokvezetési tényező szerepel, így csak egy időskála jellemzésére használható. Ha ez megfelelően illeszti a heterogén test termikus viselkedését, akkor azt mondhatjuk, hogy a többkomponensű szerkezet hővezetési tulajdonságai kiátlagolódnak.

Ez azonban függ a folyamatok sebességétől is, vagyis az alkalmazott peremfeltételektől. Ezt a szakirodalom általában csak úgy hivatkozza, hogy "gyors folyamatok esetén a Fourier-törvény érvényét veszítheti". Ehelyett helyesebb azt mondani, hogy a peremfeltételként jelentkező időskálák (melegítés, hűtés) és a komponensek hővezetési tulajdonságaiból jelentkező időskálák hogyan viszonyulnak egymáshoz. Egykomponensű anyag esetén a mikroszkopikus folyamatok "tehetetlensége" eredményezheti a Fourier-törvénytől való eltérést[2], kétkomponensű anyag esetén pedig az, hogy a peremfeltételen alkalmazott gerjesztés a két komponens időskálájával összemérhető. Ilyen értelemben érdemes visszagondolni akár a Jeffreys-egyenlet vagy a GK-egyenlet T-reprezentációjára (egy térdimenzióban, hőforrások nélkül),

$$\tau\partial_{tt}T + \partial_t T = a\partial_{xx}T + \kappa^2\partial_{txx}T \Rightarrow \Big(\partial_t T - a\partial_{xx}T\Big) + \tau\partial_t\Big(\partial_t T - \frac{\kappa^2}{\tau}\partial_{xx}T\Big) = 0, \tag{5.4}$$

amelyben a a Fourier-egyenlet (GK-értelemben statikus) hőfokvezetési tényezője, valamint a Fourier-egyenlet időderiváltja κ^2/τ dinamikus hőfokvezetési tényezővel jelentkezik.

Ez az alak teljesen megegyezik a Jeffreys-egyenletével, annak ellenére, hogy konstitutív szinten eltérő modellekről van szó[3]. A kísérletek során mindig azt vettük észre, hogy a κ^2/τ dinamikus skála mindig gyorsabb, mint az a által adott statikus skála, teljesen analóg módon a kőzetek reológiai viselkedésével [79], ezt szemlélteti az 5.3. ábra is. Erre látunk példát az 5.1 táblázatban is hét különböző kőzettípusra vonatkozóan, ahol a dinamikus és statikus paraméterek aránya kivétel nélkül egynél nagyobb ott, ahol a GK-egyenlet használatára is szükség volt [148]. Ez nemcsak kőzetekre érvényes, hanem például szén- és fémhabokra is [82, 168]. Az 5.4. ábrán éppen ennek a két időskálának a megjelenését figyelhetjük meg egy szársomlyói kőzetmintán, ahol a Fourier-egyenlet illesztése a gyorsabb időskálához konvergált,

[1] A "Dynamic Mechanical Analyzer" szavakból adódik, dinamikus termomechanikai mérőgépet jelent, ahol a dinamikusságot az adja, hogy egy beállított előterhelés környezetében adott frekvenciájú terhelést lehet megvalósítani.

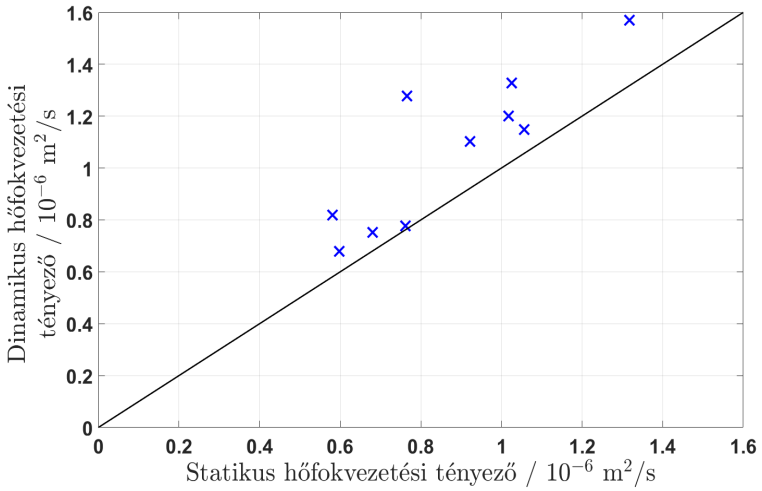
[2] Ezt kísérletileg leginkább alacsony hőmérsékletű (20 K alatti) állapoton figyelték meg, és elsősorban az MCV-egyenletet használták ennek modellezésére.

[3] A GK- és Jeffreys-egyenletek háromdimenziós esetben is vezethetnek azonos T-reprezentációra, de annak az a feltétele, hogy a GK-egyenletben a $\nabla\nabla\cdot\mathbf{q}$ tagot elhagyjuk, ehhez $\eta_2 = 0$ szükséges, a részletekért lásd a (2.23) egyenletet.

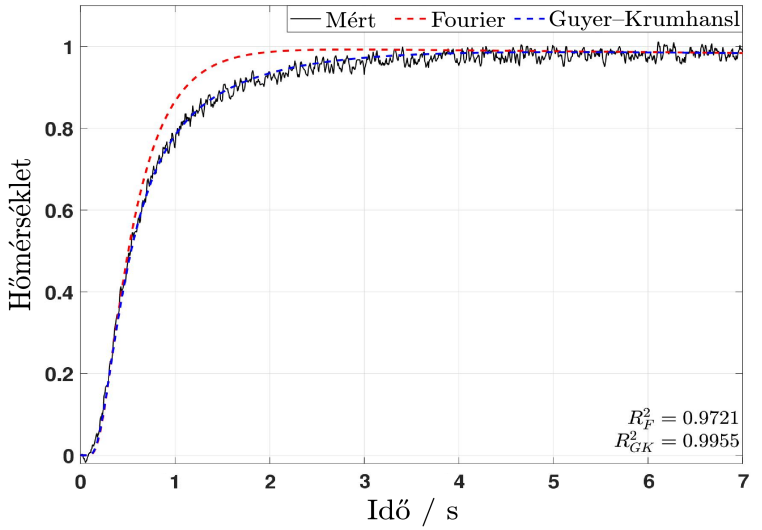
	Minta vastagsága (mm)	Fourier	Guyer–Krumhansl		
		Hőfokvezetési tényező (10^{-6} m^2/s)	Hőfokvezetési tényező (10^{-6} m^2/s)	Relaxációs idő τ (s)	Hosszskála négyzete κ^2 (10^{-6} m^2)
1/a	2	0,678	0,581	0,588	0,481
1/b	2,15	1,259	1,025	0,547	0,726
1/c	2,85	0,919	0,766	0,503	0,643
1/d	3,85	1,074	1,018	0,612	0,735
2/a	3,05	1,544	1,434	0,370	0,643
2/b	3,8	0,978	0,922	0,648	0,715
2/c	3,9	1,115	1,057	0,597	0,685
3/a	1,9	0,956	-	-	-
3/b	2,7	1,441	1,317	0,351	0,551
3/c	3,7	1,422	-	-	-
4/a	1,9	0,798	0,762	0,331	0,257
4/b	2,7	1,023	-	-	-
4/c	3,8	0,558	-	-	-
5/a	1,9	0,708	0,680	0,400	0,301
5/b	2,3	0,895	-	-	-
5/c	3,7	0,862	-	-	-
6/a	1,86	0,632	0,598	0,352	0,239
6/b	2,75	0,687	-	-	-
6/c	3,84	0,778	-	-	-
7/a	1,9	0,504	-	-	-
7/b	2,74	0,553	-	-	-
7/c	3,82	0,570	-	-	-

5.1. táblázat. Az egyes kőzetmintákon végzett mérések eredményei [148] alapján. A próbatestek azonosítói: 1) szársomlyói mészkő formáció, 2) és 3) szászvári formációk eltérő lelőhelyről, 3) tiszai metamorf képződmény, 4) bodai agyagkő formáció, 5) sötétszürke bazalt, 6) mátrai andezit formáció. A vonalak azt jelzik, hogy nem volt szükség a GK-egyenlettel való illesztésre.

emiatt a felfutó kezdeti szakaszban jól illeszkedik a méréshez, majd a lassabb melegedési szakaszon lényegesen elválnak.



5.3. ábra. Az 5.1. táblázat alapján a statikus és dinamikus hőfokvezetési tényezők arányának összevetése. A vonal feletti értékek azt mutatják, hogy a dinamikus tényező értéke nagyobb, mint a statikus tényezőé.

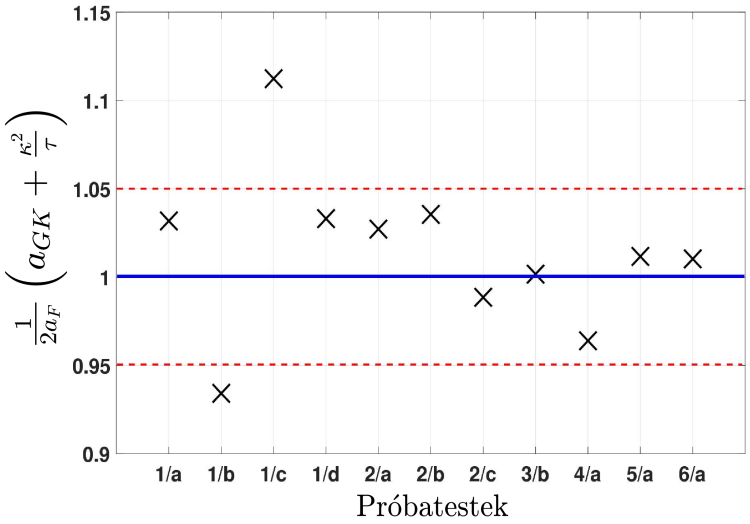


5.4. ábra. Egy 2,15 mm vastagságú szársomlyói mészkő mintán végzett hőimpulzuselvű mérés jellemző eredménye, [148] alapján. Érdemes megfigyelni, hogy a Fourier- és GK-egyenletekhez tartozó R^2 értékek között nincs lényeges eltérés, legalábbis annyira biztos nem látványos, mint amennyire a Fourier-egyenlet megoldása a mért adatok fölé tud lőni. Ebben az esetben a Fourier-egyenlet illesztése a gyorsabb időskálára konvergált, a felfutó szakaszt jól írja le, de emiatt a lassú, kiegyenlítődési szakaszon már nem megfelelő az illesztés.

Matematikai szempontból is az olvasható ki ebből, hogy ha a peremfeltételek ezekhez az időskálákhoz képest lényegesen gyorsabb folyamatokat írnak elő (például egy hőkezelési eljárást), akkor az időderivált tagban jelentkező dinamikus skála fog

számítani, és a Fourier-egyenlet a dinamikus hőfokvezetési tényezővel használható. Ez igaz fordítva is, ha a lassú folyamatokat tekintjük. Ha a peremfeltétel időskálája (egy hőimpulzus hossza) egy nagyságrendbe esik az a és a κ^2/τ hőfokvezetési tényezők által kijelölt időskálákkal, akkor a mérésekben mindkettő hatása észlelhetővé válik, tehát a GK-egyenlet – és így a Jeffreys-egyenlet is – valós alternatívaként lép fel.

Ezenfelül, amikor $a = \kappa^2/\tau$ fennáll, akkor a két hővezetési időskála egybeesik, tehát a Fourier-törvény megoldását kapjuk vissza, ezt Fourier-rezonanciának nevezzük [117]. Hogy teljessé tegyem az időskálákról alkotott képet, vissza kell térni a Fourier-számhoz, amiben a referencia időskála a hőfokvezetési tényező mellett a vizsgált test L karakterisztikus méretétől is függ, tehát L^2/a vagy $L^2\tau/\kappa^2$ arányok adják meg a karakterisztikus időskálákat. Ennek közvetlen következménye, hogy akár homogén anyagok esetén is számíthat a mérés gyorsasága, és ez a próbatest méretétől, valamint az alkalmazott peremfeltételektől függ, ezt az 5.1 táblázat is jól tükrözi. A kőzetmintákon folytatott mérések alkalmával figyeltük meg, hogy az illesztések igen sokszor a statikus és a dinamikus időskála számtani átlagára konvergálnak, ezt szemlélteti az 5.5. ábra az 5.1 táblázat adatai alapján.



5.5. ábra. Az 5.1 táblázatban közölt, többféle típusú és méretű kőzetmintán végzett mérések alapján a statikus és dinamikus paraméterek viszonya a Fourier-egyenlet által adott hőfokvezetési tényezőhöz képest, [148] alapján.

Összevetve a Fourier-féle hővezetési egyenlettel, nemcsak mélyebb betekintést kapunk a heterogén anyagok tranziens viselkedésébe, hanem akár egyetlen mérés segítségével is meg lehet határozni a statikus és dinamikus időskálákat, nincsen szükség rendkívül idő- és gépigényes pásztázó mérésekre. Mindezen felül fontos belátni, hogy a Fourier-egyenlet nem biztos, hogy használható egy mérés kiértékelésére, a mérés és az illesztés közötti eltéréseket nem lehet feltétel nélkül magyarázni a Fourier-egyenlet segítségével, és ilyenkor az illesztés nem vezet megbízható hőfokvezetési tényezőre. Fizikai, termodinamikai szempontból az a természetes, hogy egy idő után a Fourier-egyenlettől való eltérések kiátlagolódnak, így ha a modellezés során úgy döntünk, hogy nem kell a sokkal részletesebb és bonyolultabb GK-, vagy

Jeffreys-egyenletet implementálni (például egy végeselemes környezetbe), akkor a mérésből kapott statikus és dinamikus skálák

$$a_{\text{Fourier}} = \frac{1}{2}\left(a_{\text{GK}} + \frac{\kappa^2}{\tau_{\text{GK}}}\right) = \frac{1}{2}\left(a_{\text{JE}} + \frac{\lambda_2}{\tau_{\text{JE}}\rho c_v}\right) \tag{5.5}$$

átlagaként lehet egy Fourier-közelítést adni az összetett tranziens viselkedésre, ahogy azt többféle kőzetminta esetén is kísérletileg megfigyeltük [148] (lásd az 5.5. ábrát). Itt a követhetőség miatt megkülönböztettem a GK- és Jeffreys-paramétereket egymástól, de azok megegyezhetnek, és speciális esetekben meg is feleltethetőek egymásnak [104]. Egy ilyen közelítés használatakor tisztában kell lenni azzal, hogy a statikus és a dinamikus időskálák közé eső időfüggő folyamat során ez hibákat okoz, mely hibák nem feltétlenül monoton módon változnak, a valós hőmérsékletet néhol alá, máshol fölé tudja becsülni, pont ahogyan a mérések kiértékelésén is látható. Az 5.1 táblázathoz visszatérve, a mért adatokból az olvasható ki, hogy bizonyos kőzeteknél egy adott vastagságon megfigyelhető, majd később, egy nagyobb vagy kisebb vastagságon már eltűnik a Fourier-egyenlettől való eltérés. Ez éppen a fent részletezett okokra vezethető vissza, azaz állandó időtartamú hőimpulzussal nem feltétlenül lehet minden időskálát gerjeszteni a test méretétől függően.

Ezenfelül, a peremfeltételek ismeretében abban is döntést kell hozni, hogy csak a statikus vagy csak a dinamikus skálát használjuk-e fel a Fourier-egyenletben, a vizsgált folyamat gyorsaságának (vagy éppen lassúságának) megfelelően. Tehát a GK- és Jeffreys-egyenletek nemcsak olyan módon használhatóak, hogy mindenképpen minden számolást és szimulációt azokkal kell elvégezni, hanem a termikus jellemzők bővebb ismerete a Fourier-egyenletben is felhasználható, amelyhez a vizsgált folyamat peremfeltételeiről, időskáláiról részletes ismeretekkel kell rendelkezni.

5.2.2. Méretfüggő tulajdonságok

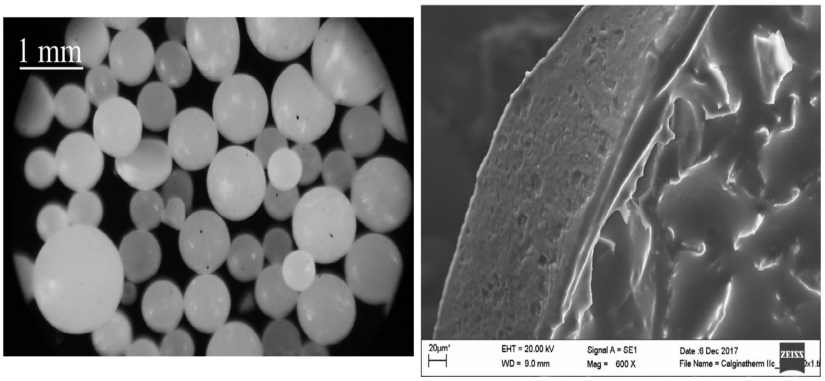
Heterogén anyagok effektív leírása emiatt szintén méretfüggővé válik, és ez a függés egyáltalán nem a GK-, vagy a Jeffreys-egyenlet sajátossága, hanem a Fourier-egyenletnél is jelentkezik, valamint a statikus és a dinamikus skálák megjelenése csak megfelelő próbatestméret esetén figyelhető meg. Ebből az következik, hogy ennek nem csupán olyan kisméretű próbatestek esetén lehet jelentősége, amelyeket a hőimpulzus-kísérletek során lehet felhasználni, hanem akár nagyságrendekkel nagyobb méretű testek esetén is, anyagösszetételtől és peremfeltételektől függően. Ehhez elegendő akár az évszakok változását tekinteni, aminek a hatása még relatíve mélyebben is érződik, jó példa erre a [169] irodalomban is tárgyalt Bátaapáti atomhulladék-lerakó környezetében végzett extenzométeres mérések. A méretfüggés másik forrása éppen a heterogenitásokban rejlik. Figyelni kell arra, hogy a heterogenitások méretei akár összemérhető nagyságrendbe is eshetnek a próbatest méreteivel (amit a mérőberendezés korlátoz), emiatt az effektív modellezés a termikus paraméterek méretfüggését vonhatja maga után, ahogy azt a kőzetek esetén többször is megfigyeltük, és az 5.1 táblázatból jól is látható [148]. Fontosnak tartom kihangsúlyozni, hogy itt a próbatestek befoglaló méretéről van szó, nem a heterogenitások (például üregek) méretétől való függésről. Mindkettő befolyásolja egy test mérhető tulajdonságait, az utóbbira példát a [170] irodalom mutat.

A méretfüggések megjelenésére tekinthetünk előnyként és hátrányként is. Hátrányként úgy, hogy ez egy olyan további szempont, aminek a kísérleti vizsgálata nehézségekbe ütközik és egy konkrét gyakorlati eset modellezése esetén figyelembe veendő. De egyben előnyként is tekinthetünk rá, mert a méretfüggések ismerete további betekintést enged az adott heterogén anyag termikus viselkedésébe. A gyakorlatban felhasznált heterogén testeket mindig a kívánt felhasználáshoz kell tervezni. Például, a CERN ALICE csoportja által fejlesztett harmadik generációs detektor [4] szerkezeti anyagául használt nagy porozitású szénhab rétegeket minél vékonyabbra kívánják tervezni, néhány milliméteres méretben. Tehát hiába állítjuk azt, hogy egy 90%-os porozitású szénhab méretfüggése csak 15 mm felett szűnik meg és ott lenne javasolt méréseket végezni, ha a végfelhasználás tekintetében ettől akár lényegesen kisebb, például fele vagy harmad ekkora vastagságú testre van szükség [168]. Erre érdemes inkább előnyként tekinteni.

A fenti okokból kifolyólag a GK- és Jeffreys-egyenletek két kiemelkedő gyakorlati felhasználását látom. Egyrészt, a heterogén anyagokon történő mérések kiértékelésére jól használhatóak, ehhez a megfelelő analitikus és numerikus módszereket is kidolgoztam, és amely mérésekből a statikus és dinamikus hőfokvezetési és hővezetési tényezők az alapját jelentik bármely későbbi termikus tervezési eljárásnak. Mindezt természetesen – pontosan, ahogy a Fourier-egyenlet esetén is történt – több méretben, több referencia-hőmérsékleten kell a jövőben végrehajtani. Ez a modern berendezések automatizálhatósága miatt nem jelent szűk keresztmetszetet. A statikus és dinamikus termikus tulajdonságok ismerete a szakirodalom és a mérnöki gyakorlat számára is teljesen új szempontokat nyit meg a termikus tervezési eljárások során, és ez a második fontos gyakorlati szempont. Nem csupán a mérések kiértékelésében, de akár az anyagszerkezet tervezéséhez is támpontokat ad, ha a konkrét felhasználási feltételek ismertek, és így az időskálák tervezhetővé válnak. Ebben a tekintetben azok a szakirodalmi eredmények sem mutatnak lényegesen előrébb, aminek a segítségével valamilyen összetett szerkezetű anyagokra jól lehet a hővezetési tényezőt becsülni. Az csak az egy időskálás, Fourier-egyenlethez kapcsolódó hővezetési tényező, a statikus és dinamikus paraméterekben jelen ismereteim szerint csak a Fourier-egyenleten túli két időskálás modellek segítségével lehet különbséget tenni. Az így tervezett anyagokat termikus metaanyagoknak nevezik, és főként termikus álcázásra, egyenirányítása, és különféle nanoszerkezeti tervezésekre használják [6,110,111,167,171], de a dolgozatomban részletezett eredmények a makroszkopikus testekre vonatkozóan a metaanyagok egy teljesen új osztályát jelenti.

5.3. Példák heterogén anyagokra

A következőkben négy olyan példát emelek ki, amelyeknek közvetlen ipari hasznosulása van, és ennél fogva a mérnöki gyakorlat számára hasznos ezeket az eseteket tömören bemutatni. Az előzőleg bemutatott kőzeteket Kovács Lászlónak (Kőmérő Kft.) köszönhetjük, a kompozit fémhabokat Orbulov Imrének (BME GPK), a fémorganikus térhálós anyagok vizsgálatát László Krisztina (BME VBK) motiválta, a biológiailag lebontható NYÁK-ok vizsgálatát Géczy Attilával (BME VIK) közösen végeztük. A nagy porozitású szénhabok vizsgálata Barnaföldi Gergellyel (HUN-REN Wigner FK RMI) közösen történt, aki a magyarországi CERN ALICE csoport



5.6. ábra. A bal oldali ábra a fázisváltó anyaggal (például paraffinnal) töltött mikrokapszulákat mutatja [172]. A jobb oldali ábra egy kókuszolajjal töltött kapszula keresztmetszetét szemlélteti [173]. Egy érdekes energetikai alkalmazását mutatja be a [174] irodalom, ahol a mikrokapszulákat épületburkolatokba keverve jelentősen befolyásolható időben és hőmérsékletben is az épület hőháztartása.

vezetője, és ez amiatt is különleges, mivel a megvalósult mérések hozzájárultak a CERN ALICE ITS3 következő generációs detektorának tervezéséhez is.

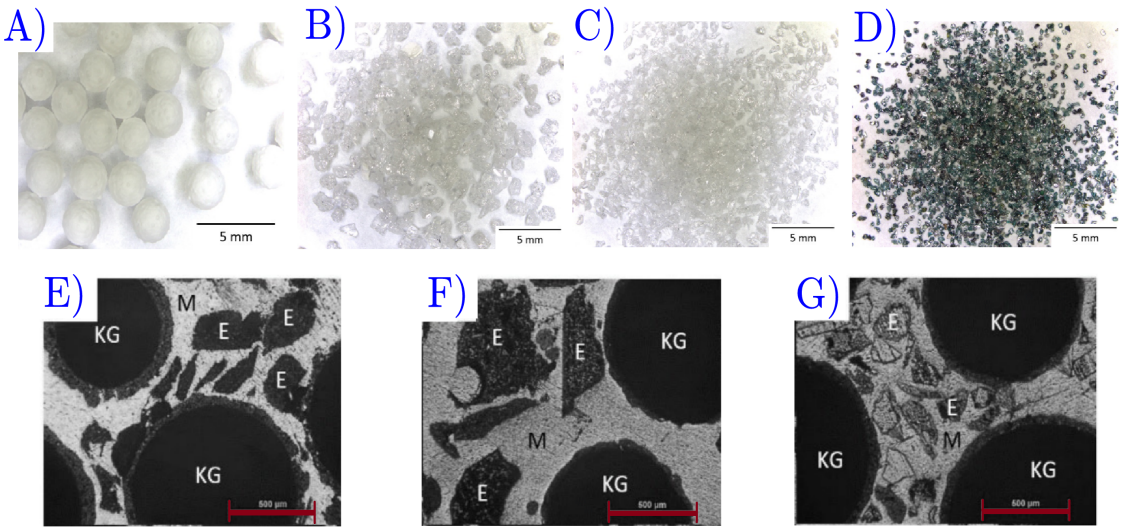
Az itt részletezetteken kívül kaptunk még 3D nyomtatott beton próbatesteket Sólyom Sándortól (BME ÉMK), zárt cellás fémhabokat az Admatis Kft.-től, acélból 3D nyomtatott üreges mintákat Fodor Tamástól (Siemens), az 5.6. ábrán is szemléltetett fázisváltó anyaggal töltött mikrokapszulás gyantákat Feczkó Tivadartól (HUN-REN TTK), valamint összetett szerkezetű szigetelőanyagokat Pirityi Lászlótól (Thermofoam Kft.). Azonban az ezeken végzett vizsgálatok vagy nem adnak mélyebb betekintést az előzőekhez képest, vagy az adatok nem nyilvánosak. Ez a felsorolás igen jól szemlélteti azokat a sokszínű alkalmazási lehetőségeket, ahol valamilyen összetett szerkezetű heterogén anyag előfordul, és amelynek termikus jellemzése a felhasználások szempontjából elengedhetetlen. Ezekben az alkalmazásokban több olyan eset is előfordul, amikor a próbatestet annak reprezentatív mérete alatt kellett vizsgálni, mivel a végfelhasználás szempontjából az volt a mérvadó.

5.3.1. Kompozit fémhabok

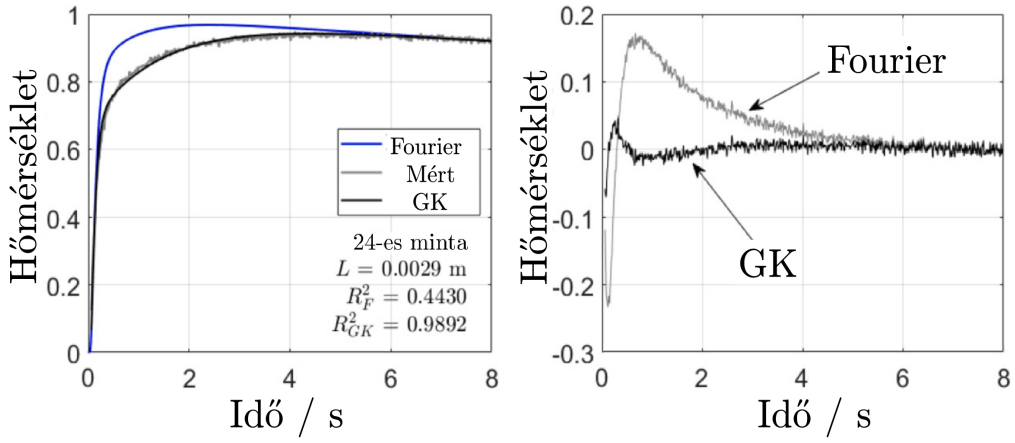
Ezekben a kísérletekben részecskeerősítésű, alumíniumötvözet mátrixú szintaktikus fémhabokat használtunk, [82, 175] alapján. Az 5.7. ábra átfogóan mutatja be a vizsgált fémhab szerkezetét. A kompozit fémhaboknak az a különlegessége, hogy a cellákban kerámiagömbhéjak, az alumíniummátrixban pedig különféle erősítőanyag szemcsék találhatóak, és ezek termikus vizsgálatát végeztük el [82]. További anyagszerkezeti részletekért a [175–177] irodalmakat ajánlom.

Érdemes megemlíteni a [170] szakirodalmi forrást, ahol igen hasonló szerkezetű anyag hővezetési tényezőjét becsülték meg elvi úton. A különbség az, hogy [170] forrásban nem habot, hanem csak az alumíniumötvözetet vizsgálták, kerámiagömbhéjak nélkül és csak SiC részecskékre vonatkozóan. Kiemelendő, hogy igen nagy, 10^7 W/(m^2 K) nagyságrendű kontakt hőátadási tényezőt vettek figyelembe az alumíniummátrix és a szemcsék között, tehát a kontakt hőellenállás körülbelül három nagyságrenddel volt kisebb, mint a hővezetési hőellenállás, ez már igen közel van a

tökéletes hőátadáshoz. Fontos megjegyezni, hogy ennek értéke erősen függ a gyártástechnológiától, valamint a testet terhelő erőktől is. Tömör anyagokra vonatkozóan ez a becslés igen jó pontossággal elvégezhető. Ebben az esetben a nehézséget az jelenti, hogy az üregekben egyszerre történik hővezetés, hőátadás és hőmérsékleti sugárzás is, még akkor is, ha kicsi a hőmérséklet-különbség az üreg két szemben lévő pontja között.



5.7. ábra. A vizsgált kompozit fémhabokban üreges 2 mm átmérőjű kerámiagömbök (A) találhatóak, az alumíniummátrixban különféle erősítőanyag szemcséket vizsgáltunk. A B) és C) esetekben $1,2$ és $0,6$ mm befoglaló méretű Al_2O_3 szemcséket, a D) esetben $0,4$ mm befoglaló méretű SiC szemcsék találhatóak [82]. Az E), F) és G) ábrák a vizsgált mikroszerkezetet mutatják a B-D) sorrendnek megfelelő erősítőanyagokkal (ezeket E jelöli, a KG a kerámiagömbhéjakat [175]. A pirossal jelölt méretskála a 0,5 mm-hez tartozó hosszúságot jelzi.



5.8. ábra. A bal oldali ábrán a 24-es jelű próbatest megfigyelt tranziens viselkedése [82] összevetve a Fourier- és GK-egyenletekkel. A jobb oldali ábrán a mért és az illesztett hőmérsékletek különbségét látjuk.

Ebben az esetben az tűnik a leginkább járható útnak, ha adott próbatestre meg-

határozzuk a hőfokvezetési tényezőt, majd az ismert komponensek függvényében kiszámítjuk a kompozit effektív sűrűségét és fajhőjét, ebből pedig a test effektív hővezetési tényezője is számítható [82]. Egységnyi térfogatú kompozit fémhab összetételét vizsgálva azok 64 térfogatszázalékát a kerámiagömbök teszik ki, amelyeknek 71,7 térfogatszázaléka a levegő aránya. Minden próbatest esetén azonos térfogatarányú erősítőanyaggal rendelkező mintákat vizsgáltunk, azok aránya 7,2 térfogatszázalék.

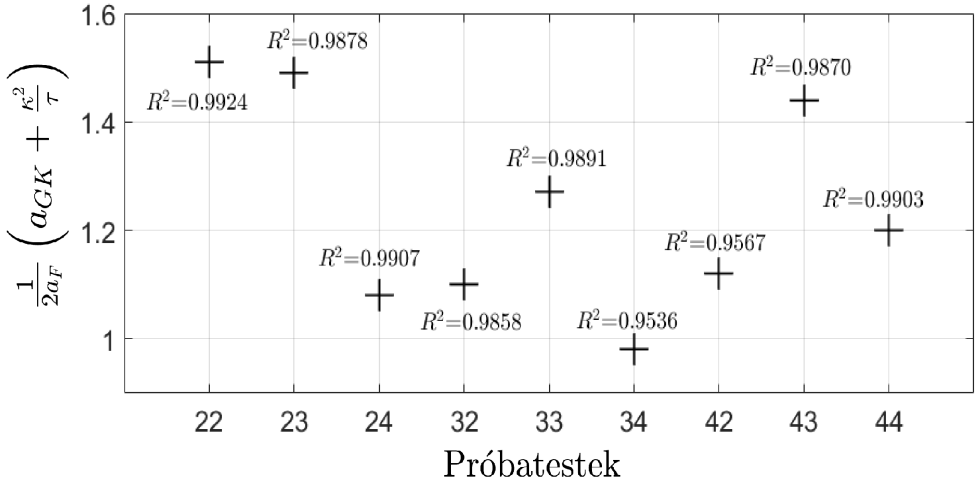
Az 5.8. ábra egy jellemző tranziens viselkedést szemléltet, ehhez igen hasonlóan viselkedik a többi próbatest is. A Fourier-egyenlet illesztése itt is a gyors, felfutó időskálára konvergált, és jelentősen túllövi a lassabb, kiegyenlítődési részt. Ehhez képest a GK-egyenlet egy jóval pontosabb képet tud adni. Érdekes megfigyelni, hogy az eltérés a GK-egyenlet esetében sem monoton, vagyis akár egy harmadik időskála is szerepet játszhat. Ez nem is olyan meglepő, hiszen a többkomponensű közegben, egy időben, több különböző hőközlési mechanizmus is jelen van. Ilyen szempontból figyelemre méltó, hogy csupán ennyi az eltérés, és a GK-egyenlet (és ezzel együtt a Jeffreys-egyenlet) képes ezeket a folyamatokat két effektív időskálára lebontani.

		Fourier	Guyer–Krumhansl		
	Minta vastagsága (mm)	Hőfokvezetési tényező (10^{-6} m^2/s)	Hőfokvezetési tényező (10^{-6} m^2/s)	Relaxációs idő τ (s)	Hosszskála négyzete κ^2 (10^{-6} m^2)
22	2,9	2,59	1,92	0,21	1.28
23	2	1,19	0,88	0,23	0,62
24	2,9	5,5	2,87	0,29	2,64
32	2,1	2,85	1,56	0,28	1,31
33	2,1	1,73	1.07	0.3	1,01
34	2	3,47	2,04	0,26	1,52
42	2,8	5,41	4,25	0,22	1,62
43	2	2,23	1,26	0,18	0,91
44	3,5	4,57	2,65	0,37	3,07

5.2. táblázat. A vizsgált próbatestek jellemző Fourier- és GK-féle transzportegyütthatóinak összegzése, ahol a 2x, 3x és 4x számok a próbatestek azonosítóit jelentik [82]. A legtöbb próbatest esetén (a 42 és 43 jelűt kivéve) a statikus és dinamikus hőfokvezetési tényezők aránya 3-3,2 között mozog, a 42 és 44 jelűek esetén azok értéke 1,73 és 4,01. A 22-24 jelű próbatestek SiC szemcsékkel, a 32-44 jelűek Al_2O_3 szemcsékkel erősítettek, a 32-34 jelűekben vannak a 0,6 mm átmérőjű, a 42-44 jelűekben az 1,2 mm átmérőjű szemcsék.

A statikus és dinamikus tényezőket az 5.2 táblázat foglalja össze. A kőzetekhez képest itt a statikus és dinamikus tényezők aránya jóval nagyobb, ami abból a szempontból reális és az elvárásoknak megfelelő, hogy az alumíniumötvözet-mátrix egy igen jó hővezető képességű anyag, de az üreges kerámiagömbhéjak már lényegesen

rosszabb hővezető anyagok. A kőzetek esetén az egyes komponensek termikus szempontból sokkal inkább hasonlítanak egymásra, mint ebben az esetben. Továbbá, a fémhabokban egyszerre játszódik le hővezetési, hőátadási és hősugárzási hőtranszport is, ráadásul a hővezetés esetén a mátrixanyagban lévő hővezetési úthosszak a próbatesthez vagy a kerámiagömbökhöz képest akár jóval hosszabbak is lehet, és ezen a szemcseerősítő anyag alkalmazása szintén nem javít. Ez négyzetes arányosságon keresztül tovább növeli az alumíniummátrix hővezetési időskáláját. Az 5.2 táblázat adatain azt is érdemes megfigyelni, hogy a 32-34 jelű próbatestekben kisebb méretű szemcsék találhatóak, így azoknak jellemzően 30-40%-al kisebb az effektív hővezetési képessége, ugyanakkora térfogatarány mellett, és az általánosságban elmondható, hogy a Fourier- és a GK-egyenletek által jósolt hőfokvezetési tényezők jelentősen eltérnek egymástól.



5.9. ábra. Az R^2 értékek a GK-egyenlet illesztési jóságát mutatják az egyes próbatestekre vonatkozóan, az elnevezések az 5.2 táblázatot követik. Érdekes azt is megfigyelni, hogy amíg a kőzetek esetén a Fourier-egyenlet illesztése a statikus és a dinamikus időskálák átlagára konvergált, itt ez csak az esetek felében igaz és sokkal nagyobb szórással. Ez annyit jelent, hogy a Fourier-egyenlet illesztését nem lehet megbízhatónak tekinteni olyan értelemben sem, hogy a két időskála átlagát adja vissza. A kőzetekhez képest itt a két időskála aránya legalább kétszer akkora.

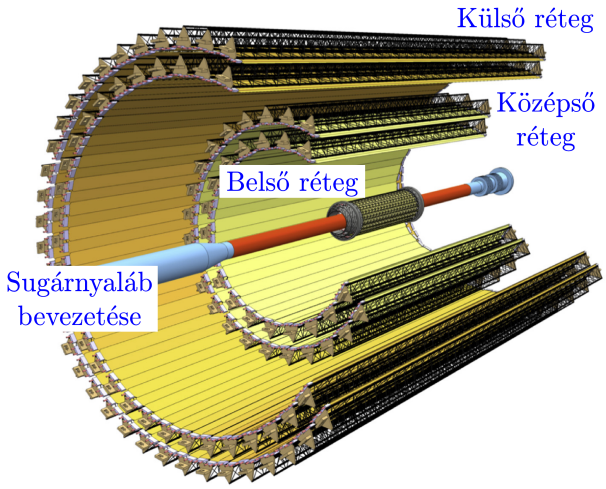
A próbatestek effektív sűrűsége és fajhője igen közel esik egymáshoz, mivel az egyes komponensek térfogatarányban kevéssé térnek el egymástól. A

$$\rho_{\text{eff}} = \sum_i \hat{V}_i \rho_i, \quad c_{v,\text{eff}} = \sum_i \hat{V}_i c_{v,i}, \quad \sum_i \hat{V}_i = 1, \tag{5.6}$$

$\hat{V}_i$ térfogatarányokkal történő összegzéseket kihasználva a 22-24 jelű próbatestekre $\rho_{\text{eff}} = 1650$ kg/m^3 és $c_{v,\text{eff}}$ =767,5 J/(kg K) effektív sűrűséget és fajhőt kapunk. A 32-34 és 42-44 jelű próbatestekre ezek az értékek azonosak, értékük $\rho_{\text{eff}} = 1738$ kg/m^3, $c_{v,\text{eff}} = 768{,}2$ J/(kg K). Ebből következően az effektív hővezetési tényező értékei 3,21 és 7,82 W/(m K) közé esnek [82], összhangban a [178] irodalommal is. Ezzel szemben az (5.1)-(5.3) képletek egy nagyságrenddel nagyobb értékeket becsülnek, de azok a hővezetési tényező becslések nem is veszik figyelembe a mikroszerkezet többszörösen összetett tulajdonságait.

5.3.2. Nagyporozitású szénhabok

A habos anyagoknál maradva ez a példa azért is érdekes, mivel a végfelhasználás szempontjából a tervezett szénhabok vastagságát minimalizálni próbálják. A CERN ALICE kísérletén belül a harmadik generációs részecskefizikai detektor vázát az itt bemutatott szénhabokból tervezik megépíteni [168]. Egy ilyen detektorban igen kritikus a felhasznált anyagmennyiség, mivel minden, a detektorok és a részecskék közötti anyag torzítja a mérést, megváltoztatja a részecskék irányát, energiáját, és a mérés kiértékelhetőségét. A detektor vázlatát az 5.10. ábra mutatja, amelyen három réteg látható, minden egyes rétegen olyan ALPIDE chipek találhatóak, amelyek a részecskék becsapódását vagy áthaladását regisztrálják [179].



5.10. ábra. A CERN ALICE kísérlet ITS detektorának vázlatos felépítése [179] alapján.

Minden réteget egy nagy porozitású szénhabból építenek fel. Az ALPIDE chipek termikusan igen érzékenyek, a legnagyobb megengedhető hőmérséklet 40 °C, valamint a pontos mérések és kalibrációs szempontok alapján a chipek között maximum 5 °C hőmérséklet-különbség megengedett, emiatt egy aktív hűtési rendszer alkalmazása elkerülhetetlen. Ugyanezt tapasztaltuk egy hadron kaloriméter koncepcionalizálása közben is: Sudár Ákos hallgatóval közösen részt vettünk a Bergen pCT Együttműködésben[4], aminek keretében több hűtési koncepciót is meg kellett vizsgálnunk [180,181]. A nagy porozitású szénhabok ilyen szempontból azért ideális választás, mert mindamellett, hogy kis anyagfelhasználású szerkezet, de a grafitmátrixú habok jó hővezető képességgel is rendelkeznek, ami nagy mértékben elősegítik a chipek termikus stabilitását. Mindezen felül egy aktív hűtéssel ellátott rendszerben a levegő át is tudja áramolni a habszerkezetet, emiatt "térfogati" hűtést megvalósítva, azaz lényegesen kisebb hűtendő tömeg mellett hozunk létre nagy hőátadási felületet. A kérdés az, hogy milyen effektív jellemzőkkel rendelkeznek a vizsgált habszerkezetek és a tranziens folyamatok során megfigyelhetőek-e a Fourier-egyenlettől eltérő jelenségek vagy sem.

[4] A pCT kifejezés a proton komputertomográfiára utal, ami a hagyományos, röntgenalapú besugárzási eljárásokhoz képest lényegesen jobb karakterisztikával rendelkezik és az egészséges sejteket sokkal kevésbé roncsolja.

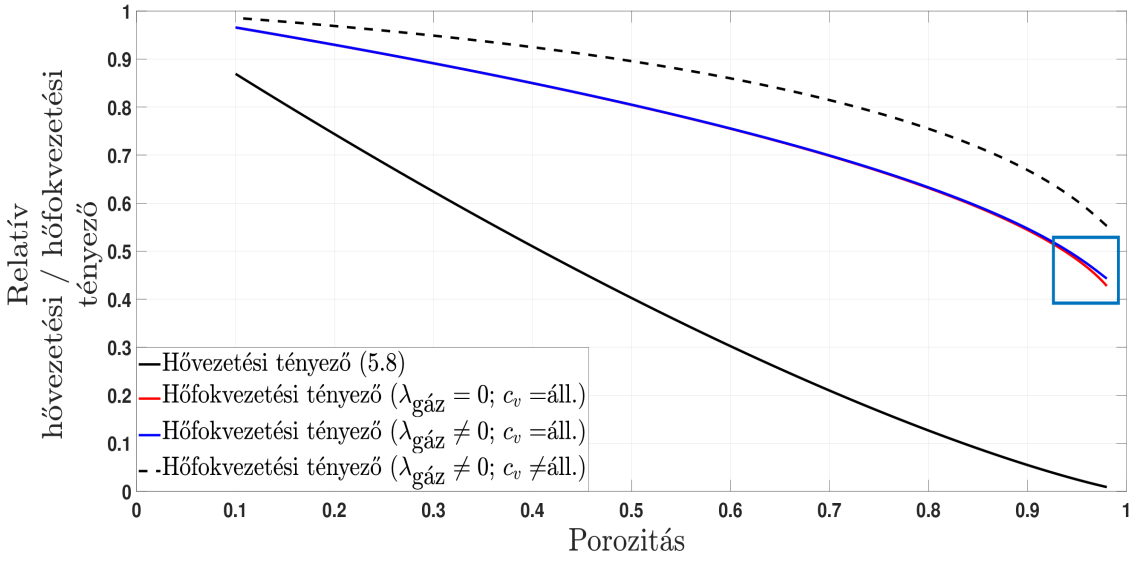
A kompozit fémhabokhoz képest a nyílt cellás habok esetén könnyebb a dolgunk, ugyanis a típustól függően 85 és 95% közötti porozitású habok anyageloszlása még kis méretben is jó közelítéssel egyenletes. Emiatt a fejezet elején bemutatott (5.1)-(5.3) becslések mellett szintén jól használható a

$$\lambda_{\text{eff}} = \frac{1}{3}\left[\frac{\rho_{\text{hab}}}{\rho_{\text{tömör}}} + 2\left(\frac{\rho_{\text{hab}}}{\rho_{\text{tömör}}}\right)^{3/2}\right]\lambda_{\text{tömör}} + \left(1 - \frac{\rho_{\text{hab}}}{\rho_{\text{tömör}}}\right)\lambda_{\text{gáz}}, \tag{5.7}$$

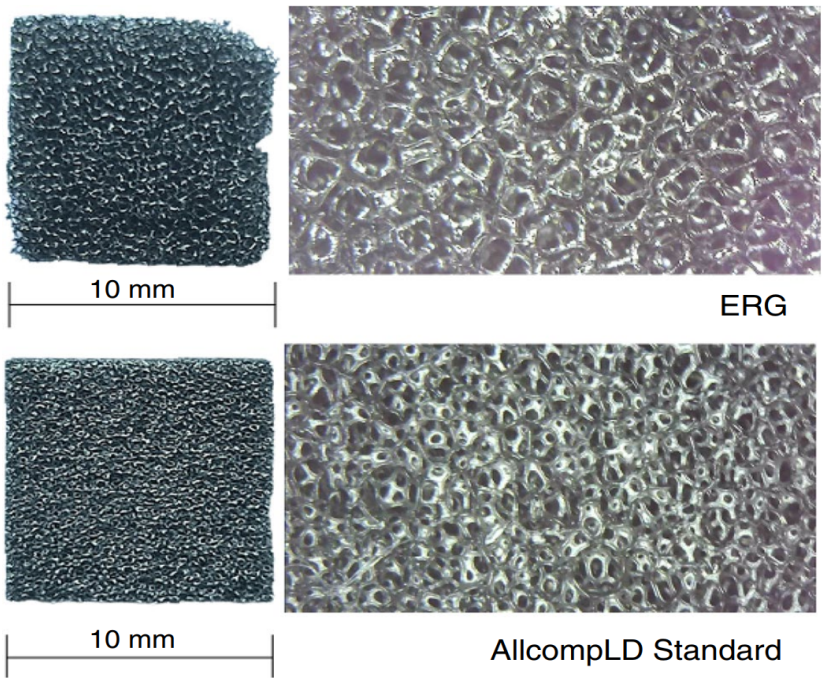
összefüggés, ahol a "tömör" indexelés a 0% porozitású tömör mátrixanyagot jellemzi, a "hab" az adott porozitású hab tulajdonságaira utal [182]. Hasonló módon lehet a hab hőfokvezetési tényezőjét is becsülni,

$$a_{\text{eff}} \approx \frac{1}{3}\left[1 + 2\left(\frac{\rho_{\text{hab}}}{\rho_{\text{tömör}}}\right)^{1/2}\right]a_{\text{tömör}}, \tag{5.8}$$

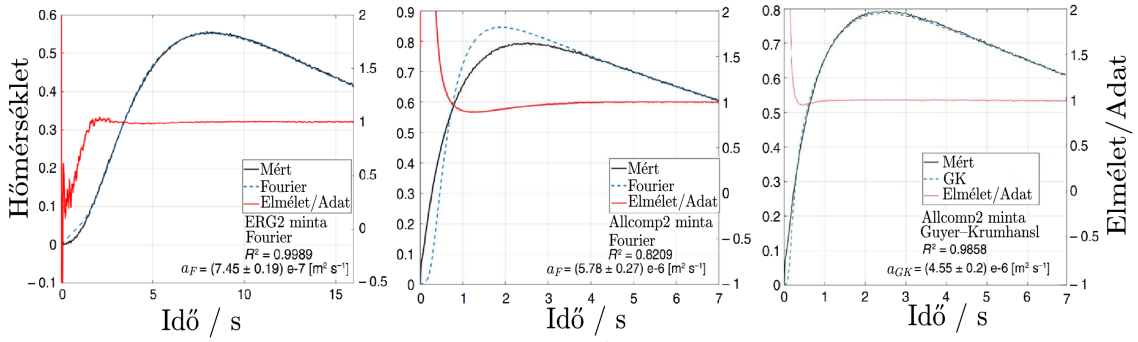
de ebben az esetben a habot kitöltő gázban lévő hővezetést elhanyagoljuk ($\lambda_{\text{gáz}} = 0$) és az (5.8) egyenletet úgy kapjuk, hogy a $\rho_{\text{hab}}/\rho_{\text{tömör}}$ sűrűségaránnyal elosztjuk az (5.7) összefüggést, valamint a porozitás változtatásával a fajhő nem változik [182]. Az 5.11. ábra azt mutatja, hogy a porozitással hogyan változik az effektív hővezetési és a hőfokvezetési tényező. Mivel ebben az esetben a mátrixanyag sűrűsége három nagyságrenddel nagyobb, mint a levegőé, ezért a porozitás megegyezik a $\rho_{\text{hab}}/\rho_{\text{tömör}}$ sűrűségaránnyal. Érdemes megfigyelni, hogy a habot kitöltő gáz hővezetését nyugodtan elhanyagolhatjuk, mivel csak nagyon nagy porozitások mellett van észrevehető járuléka. Az effektív fajhő azonban fontosabb, ugyanis a tömör anyaghoz képest több, mint 20%-os eltérést okoz az, ha azt konstansnak tekintjük, tehát az (5.8) közelítésnek a szénhabok esetén ilyen hibája lehet.



5.11. ábra. Az effektív hővezetési és hőfokvezetési tényező változása a porozitás függvényében. A relatív értékeket a tömör anyaghoz képest vonatkoztatjuk, feltételezve, hogy normál állapotú levegő található a pórusokban. A gáz hővezetése tényleg elhanyagolható, de a fajhő változását nem lehet elhanyagolni.



5.12. ábra. Ezekben a vizsgálatokban kétféle típusú szénhabot használtunk fel [168], ezeket az ERG Aerospace Corporation és az Allcomp Inc. gyártotta, mindkét típusból közel azonos keresztmetszetű és vastagságú (5 mm) próbatesteket vizsgáltunk.



5.13. ábra. Az ERG és az Allcomp típusú szénhab próbatesteken végzett mérések jellemző eredményei [168]. Amíg az ERG próbatesteket a Fourier-egyenlettel megfelelően le lehet írni, addig az Allcomp típusúak esetében ez nem mondható el, amely a két komponens lényegesen eltérő hővezetési tulajdonságainak köszönhető.

Az ERG jelű próbatestek mátrixanyaga amorf szén, ennek hővezetési tényezője 1 W/(m K). Az Allcomp jelű próbatestek azonban polikristályos grafitból készültek, amely lényegesen nagyobb, 80 W/(m K) hővezetési tényezővel bír. Az ERG próbatestek 90%-os, az Allcomp típusúak 85-90% közötti porozitással rendelkeztek. A mátrixanyagban való eltérés a fajhőméréseken is látszódott [168]. Ilyen nagy porozitású habok hőimpulzuselvű mérései csak úgy voltak lehetségesek, hogy ha a minta elejére és hátlapjára is grafittal átitatott vékony lapokat helyeztünk, amely el tudja nyelni a hőimpulzust, így a minta átlátszósága nem lesz probléma. Ehhez megbecsültük a grafittal átitatott papírlap hőellenállását is, és megállapítottuk, hogy az 5

mm vastagságú próbatesthez képest elhanyagolható.

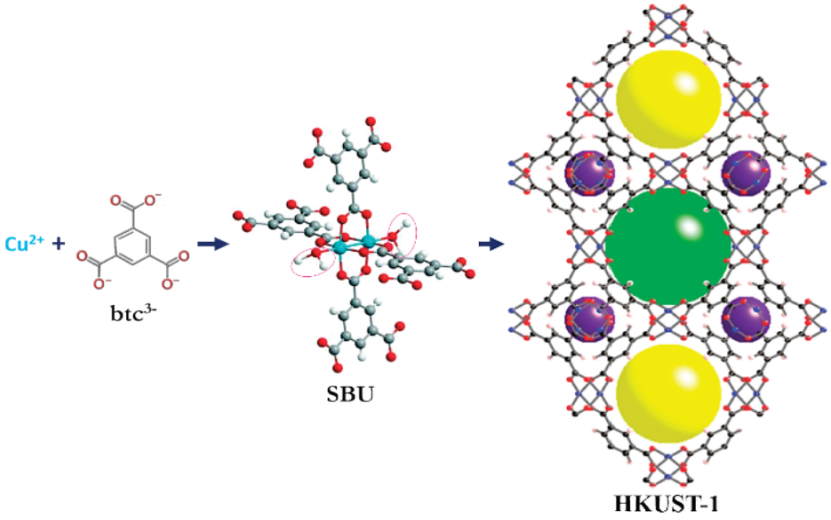
Az ERG próbatestek esetében végig azt találtuk, hogy a Fourier-törvény megfelelő leírást ad, és a mérések során visszakaptuk az adatlapi hővezetési tényező értéket is [168]. Az, hogy a Fourier-törvény alkalmas erre a célra, az leginkább annak köszönhető, hogy a 97%-os porozitás miatt a hab sokkal inkább a levegő tulajdonságaihoz állt közelebb, és így egykomponensű közegként viselkedik, ha vannak is a Fourier-törvénytől eltérő effektusok, azok ilyen méretben kiátlagolódnak. Az (5.1), valamint az (5.7) becslések az ERG szénhabra 0,055-0,08 W/(m K)-es becslést adnak, a mért értékek 0,043-0.052 W/(m K) közé esnek, és ez a gyártói adatlappal egyezik.

Az Allcomp típusú próbatestek esetén nem csupán a porozitásuk kisebb (97% helyett 85%), hanem háromszor nagyobb a sűrűségük is (70 kg/m^3 helyett 220 kg/m^3), és a mátrixanyag hővezetési képessége is egy nagyságrenddel nagyobb. Tehát ebben az esetben a próbatest termikusan is úgy viselkedik, mintha kétkomponensű közeg lenne, és megfigyelhetőek a Fourier-egyenlettől eltérő hatások is. Az Allcomp szénhab gyártói adatlapján 20-40 W/(m K) hővezetési tényező intervallum van megadva, ami a 85%-os porozitáshoz és a mátrixanyag tömör tulajdonságaihoz képest igen magasnak mondható. Az (5.1), valamint az (5.7) becslések 7-12 W/(m K) közé esnek, de a mérések szerint a statikus 0,9-1,38 W/(m K), a dinamikus hővezetési tényező 2,39-3,04 W/(m K) közé esik. Az eltéréseknek igen sokféle oka lehet. Egyrészt, a rendelkezésre álló próbatestek számától várhatóan lényegesen több mintára lenne szükség, ha csupán egy néhány milliméteres szeletet tekintünk. Fontos szempont lehet a próbatestek méretfüggése is, a gyártói adatlapon nem szerepelnek próbatestméretek. Ráadásul a [183] alapján a próbatestekben anizotrop viselkedés is megfigyelhető. Mivel a gyártói adatlap hőfokvezetési tényezőt nem tartalmaz, így más referencia nem elérhető. Ennek ellenére egy újabb példát láthattunk arra vonatkozólag, hogy a heterogén anyagok tranziens viselkedése nem feltétlenül jellemezhető egy időskálával.

5.3.3. Fémorganikus térhálók

Az eddigi makropórusos anyagokról a mikropórusos anyagokra térek át, azokon belül is külön figyelemreméltó tulajdonságokkal bírnak a fémorganikus térhálós szerkezetek. Ezeknek igen sokféle típusa létezik, így ennek a részleteiben mélyebben nem is kívánok elmélyedni, így a [184–188] szakirodalmi forrásokat ajánlom ilyen tekintetben. Általában véve a fémorganikus térhálós anyagok rendkívül nagy látszólagos felülettel, $600 - 7000$ m^2/g rendelkeznek [184, 188], ami ideális jelöltté teszi ezeket az anyagokat adszorpciós gáztárolásra. Ezt a kimagasló gázmegkötési tulajdonságot az is segíti, hogy a rácsszerkezetük rendezett, egy nyitott, mikropórusos térhálóról van szó [189].

A vizsgálatokat László Krisztina motiválta, a próbatesteket ő bocsátotta a rendelkezésünkre. A fémorganikus térhálós szerkezetek hővezetési képessége igen korlátozott, és ez behatárolja a gyakorlati felhasználási lehetőségeket is, de ez megfelelő adalékokkal és a gyártástechnológia megválasztásával javítható. A vizsgálatok fókuszában az úgynevezett réz benzol-1,3,5-trikarboxilát (Cu_3btc_2) áll, ezt a szakirodalom HKUST-1-nek rövidíti és a szerkezeti felépítését az 5.14. ábra mutatja.



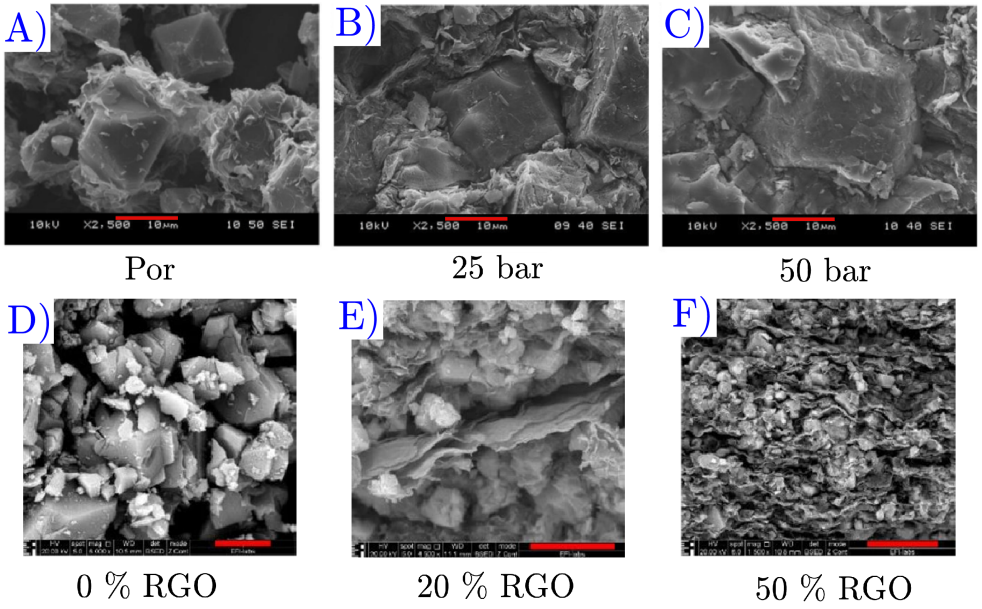
5.14. ábra. A HKUST-1 szerkezeti felépítését látjuk, ahol a szürke a szénatomokat, a piros az oxigént, a fehér a hidrogént, a kékek a rézatomokat szemléltetik. A pórusok méreteit a lila, sárga és zöld gömbök mutatják, amelyek méretei 0,5; 1,1 és 1,35 nm. Az ábra forrása a [189] irodalom.

Három jellegzetes pórusméret figyelhető meg 0,5-1,35 nm-es tartományban, melyek aránya és a makroszkopikus méretű minták pórusméret eloszlása függ a gyártástechnológiától és a kristályok utókezelésétől is. A vizsgálat tárgyát az képezte, hogy redukált grafén-oxiddal kevert térhálós szerkezetnek hogyan változnak a hővezetési képességei, természetesen a cél annak javítása [190]. Ez határozottan az adszorpciós képesség rovására megy, az eredeti, redukált grafén-oxid mentes esethez képest akár annak negyedére is lecsökkenhet a gázt megkötő felület [190]. Ez a gyakorlatban azt jelenti, hogy a kívánt felhasználáshoz mérten kell megválasztani a gyártástechnológiát és a redukált grafén-oxid (RGO) mértékét, amely egy optimalizációs feladathoz vezet. A következőkben bemutatott kísérleti eredmények ezt a feladatot hivatottak megkönnyíteni.

Az előállítási folyamat végén por formában kapjuk meg a térhálós szerkezetet, amely sem a felhasználások, sem a kísérletek szempontjából nem előnyös, emiatt pelletálásra van szükség, amely tovább csökkenti a porozitást és így az adszorpciós képességet. Ez az 5.15. ábra felső soráról is leolvasható (az A), B) és C) ábrák), ahol a térhálós anyag szerkezetét por formában, majd 25 és 50 bar-os tömörítés után vizsgálták pásztázó elektron mikroszkóp alatt [191]. Az 5.15. ábra alsó sora egyformán 25 bar-os pelletálás mellett került előállításra [190], de a redukált grafén-oxid tartalom változtatásával egyre kevésbé látható a poliéderes kristályos térhálós szerkezet, ezzel együtt a pórus mérete, eloszlása, és így a próbatest adszorpciós képessége is jelentősen változik [190]. A pelletálás lehetővé teszi a hőimpulzuselvű mérések elvégzését is. A próbatestekkel kapcsolatos további részleteket a [190] tartalmazza.

Az 5.3 táblázat foglalja össze a vizsgált próbatestek RGO tartalmát, azok vastagságát, és a mérések során kapott átlagos termikus paramétereket. Ezeken az adatokon elsősorban azt fontos észrevenni, hogy a tiszta, RGO nélküli esetekben elegendő a Fourier-egyenlet. Minden más esetben, függetlenül attól, hogy a HL vagy a GM jelzésű gyártástechnológiával készültek a próbatestek, az RGO hozzá-

keverés jelentette második hővezetési időskála hatása egyértelműen kimutatható, és a próbatestek termikus jellemzéséhez elengedhetetlen volt a két időskálás modellek alkalmazása. A másik megfigyelés az, hogy a HL-0 és a GM-0 jelzésű próbatestek vastagsága jelentősen nagyobb, mint az RGO tartalmú mintáké, és a megfigyelt effektív hőfokvezetési tényezőjük is jelentősen nagyobb, ami egyértelmű méretfüggésre utal. Az RGO tartalmú próbatestek vastagságai csak kis mértékben térnek el egymástól, és azokon belül jól megfigyelhető az RGO hővezetésre gyakorolt hatása is, egyaránt a statikus és a dinamikus skálákon. Jelenleg még nyitott az a kérdés, hogy az RGO tartalmú próbatestek milyen méretfüggéssel rendelkeznek, tehát egyrészt mennyire és milyen irányban változnak a termikus jellemzők, illetve mikor válik szükségtelenné a két időskálás modellek alkalmazása.



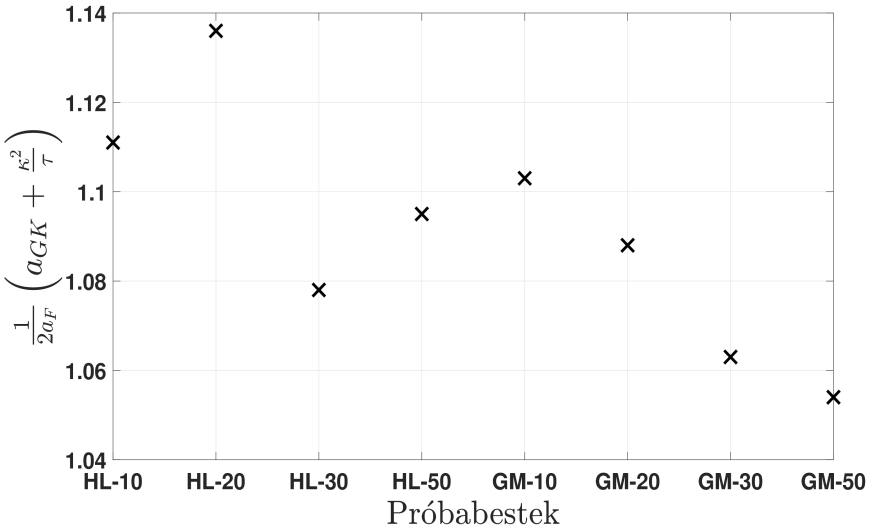
5.15. ábra. A HKUST-1 térhálós anyag redukált grafén-oxiddal (RGO) kevert szerkezete pelletálás nélkül (bal szélső ábra), majd 25 és 50 bar-os pelletálás után [191]. A térhálós anyagot a relatíve nagyméretű poliéderes kristályok mutatják (az A) és D) ábrák), az RGO jelenlétét az apróbb, lemezes-tüskés szerkezet szemlélteti, ami az alsó D)-E)-F) ábrákon is egyre jobban megfigyelhető az RGO tartalom növelésével [190]. Az ábrákon lévő pirossal jelzett skála a 10 μm-es hosszt mutatja.

Ezenfelül még azt is érdemes kiemelni, hogy a Fourier-egyenlet illesztése igen jól konvergált a statikus és dinamikus skálák átlagához, hasonlóan az 5.5. ábrához, amit a kőzetek kapcsán figyeltünk meg. Ebben az esetben ezt az összehasonlítást az 5.16. ábra szemlélteti, ahol azt látjuk, hogy a két skála igen közel esik egymáshoz, de ezt csak akkor vehetjük észre, hogy ha az illesztést egy megbízható két időskálás modellel is elvégezzük. A Fourier-egyenlet illesztése ilyen formában megbízhatatlan. A jövőben még igazolásra vár az a hipotézis is, hogy az 5.16. ábrán is közölt arányszám megjósolja-e azt, hogy mikortól használható a Fourier-egyenlet, ugyanis főleg a GM jelű esetekben jól látszik egy tendencia, és az RGO dominanciája éppen az egy időskálás Fourier-egyenlet felé való elmozdulást jelenti. Újfent megjegyzem, hogy a GK-egyenlet paraméterei egymásnak egyértelműen megfeleltethetőek az (5.5) összefüggésen keresztül, így azokat nem látom célszerűnek külön közölni.

kovacsr_325_25

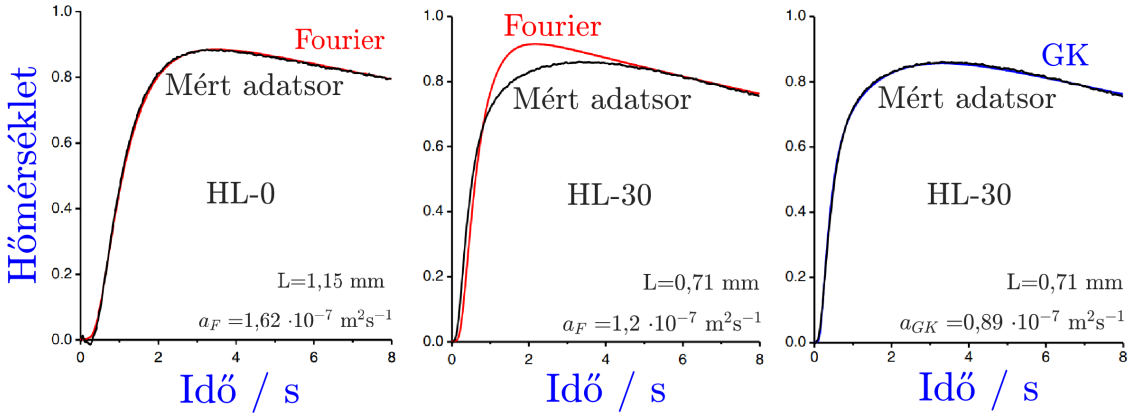
	Minta vastagsága (mm)	Fourier	Guyer–Krumhansl		
		Hőfokvezetési tényező (10^{-7} m^2/s)	Hőfokvezetési tényező (10^{-7} m^2/s)	Relaxációs idő τ (s)	Hosszskála négyzete κ^2 (10^{-7} m^2)
HL-0	1,15	1,62	-	-	-
HL-10	0,68	1,03	0,78	0,41	0,62
HL-20	0,72	1,29	1,03	0,34	0,66
HL-30	0,71	1,2	0,89	0,49	0,83
HL-50	0,77	1,61	1,29	0,44	0,99
GM-0	1,09	1,86	-	-	-
GM-10	0,71	1,15	0,86	0,44	0,74
GM-20	0,68	1,23	0,93	0,42	0,73
GM-30	0,71	1,33	0,94	0,48	0,89
GM-50	0,74	1,67	1,22	0,45	1,05

5.3. táblázat. A HKUST-1 fémorganikus térhálós anyagból, 25 bar-os pelletálás után készített próbatestek termikus adatai, ahol a hiányzó számadatok azt jelentik, hogy nem volt szükség a GK-egyenlet használatára, [190] alapján. A HL és GM jelzések két különböző gyártási technológiára utalnak, amelyek részletei végett szintén a [190] szakirodalmi forrást ajánlom. A HL és GM jelzések után lévő szám az RGO m/m%-os tartalmát jelzi, tehát 0%-tól 50%-os RGO tartalomig vizsgáltuk annak hatását.



5.16. ábra. A GK-egyenlet által adott statikus és dinamikus hőfokvezetési tényezők átlagának viszonyítása a Fourier-egyenlet illesztéséből kapott értékhez. A kettő igen közel esik egymáshoz, de a Fourier-egyenlet illesztése ilyen szempontból megbízhatatlan.

Végül egy-egy példát mutatok a Fourier, valamint a Fourier-tól eltérő esetekből, a HL-0 és a HL-30 jelű mintákra vonatkozóan. Kísérletileg ugyanaz történik, mint a kőzetek és a különféle habok esetén is, a Fourier-egyenlettől való eltérést ugyanolyan formában figyeltük meg. A GK- és Jeffreys-egyenletek által adott statikus és dinamikus skálák ugyanolyan tulajdonságokkal bírnak, anyagminőségtől függetlenül, ami a termodinamikai modellek univerzalitását jól szemlélteti.



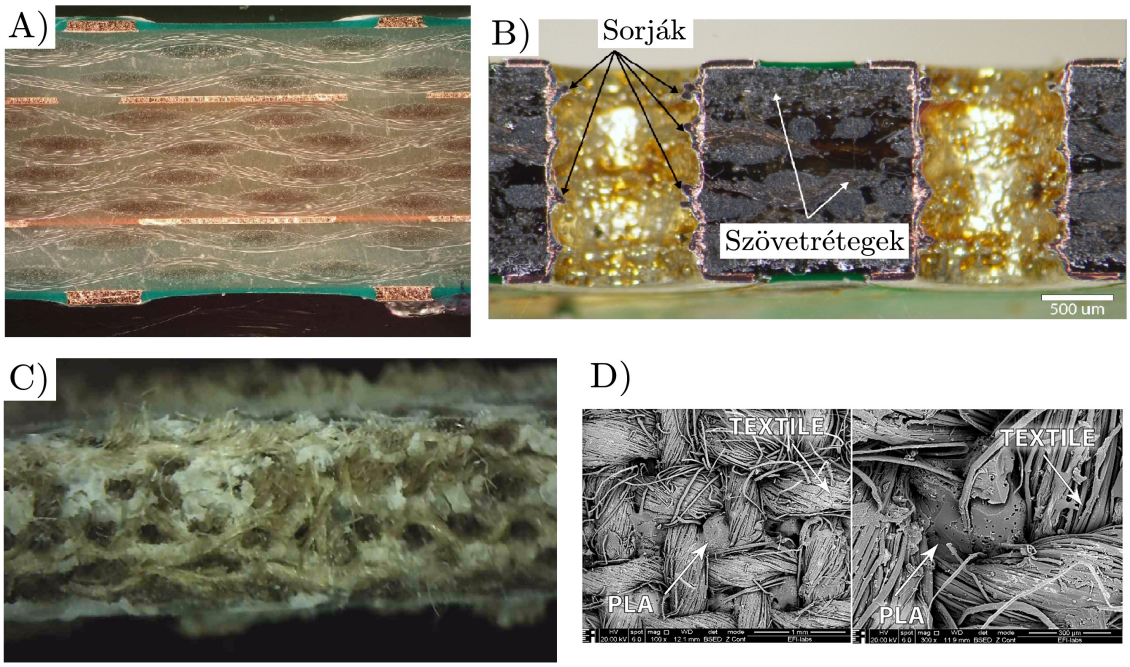
5.17. ábra. A HL-0 és a HL-30 jelű próbatestek tranziens viselkedése, ahol jól látszik, hogy a HL-0 egykomponensű, a HL-30 viszont kétkomponensű rendszerként viselkedik [190].

5.3.4. Biológiailag lebontható NYÁK-ok

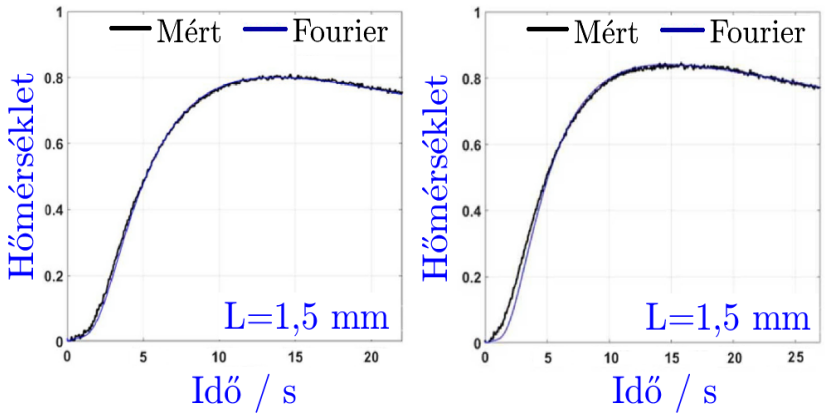
Környezetvédelmi szempontból az elektronikai moduláramkörök (hordozók és alkatrészek) igen jelentős részét teszik ki a nehezen feldolgozható hulladékoknak, amelyek főleg kisebb méretű eszközökből, például laptopokból, telefonokból és más háztartási termékekből kerülnek ki. Éppen emiatt igen aktuális kérdés az, hogy ha az áramköri szerelvény térfogat- és tömegarányában is jelentős részét, magát a nyomtatott áramköri hordozót olyan anyagból gyártják, amely lebontható, és nem beláthatatlan ideig, évtizedekig, vagy akár évszázadokig szennyezi tovább a környezetet. Egy ilyen motiváció mentén indult el a [192] irodalomban közölt kutatás is, amely igen alaposan körbejárja a vizsgált NYÁK-lemezek tulajdonságait gyártástechnológiai és életciklus szempontok szerint is.

Az 5.18. ábra a hagyományos, FR4-alapú NYÁK-ok szerkezetét veti össze a politejsav (PLA) alapú, biológiailag lebontható szerkezettel. A kutatásunk tárgya az, hogy milyen feltételek, összetétel és technológiai paraméterek mellett tudja kiváltani a hagyományos NYÁK-lemezeket. Például az egyes elektronikai alkatrészek forrasztása során igen lényeges, hogy milyen termikus tulajdonságokkal lehet a folyamatot megtervezni. A kutatásaimat PLA-alapú lemezeknek a tranziens vizsgálatára koncentráltam [192, 193]. További részletekért a [194–196] szakirodalmi forrásokat ajánlom, ahol a szerzők ismertetik az elektronikai technológiai részleteket is. Az 5.19. ábra azt szemlélteti, hogy a Fourier-egyenlet teljes egészében jól jellemzi a vizsgált próbatesteket, tehát az alkalmazás szempontjából is fontos 1-1,5 mm-es vastagságon a heterogenitások jelentette hatások kiátlagolódnak. Ez annak tükrében nem meglepő, hogy az összetevők hővezetési képességben nem különböznek

egymástól jelentősen. De még az FR4-alapú lapok esetén sincs effektus, mivel ott a rézlemezek az üvegszálas gyantás szerkezetet hőellenállások szempontjából sorosan fogják közre, nem pedig párhuzamosan, így azok sem mutatnak Fourier-tól eltérő hatásokat.



5.18. ábra. A NYÁK-lemezek szerkezetének összehasonlítása. A) FR4 - (Flame Retardant, class 4) - teljesen üvegszálakból és epoxigyantából áll, rézlemez-rétegekkel préselve. [197]. B) Lenszövettel erősített politejsavalapú szerkezet, amely újrahasznosított anyagokból előállítható. Az ábrát Géczy Attila szolgáltatta [194]. C) A NYÁK-lemez mezoszkopikus képe, 500-szoros nagyításban, digitális mikroszkóppal készítve, így jól láthatóak a szerkezet heterogenitásai. D) Pásztázó elektronmikroszkóppal készített felvétel, amelyen jól látszik a lenszálakkal történő erősítés, közöttük a PLA műanyag kitöltés.



5.19. ábra. Az első és második generációs PLA-alapú NYÁK-lemezek termikus viselkedése, a heterogenitások ellenére a Fourier-egyenlet jól használható és a vizsgált próbatestek termikusan egy időskálával leírhatóak [192].

5.4. Összefoglalás

A bemutatott példák, a különféle haboktól kezdve egészen az elektronikai alkatrészekig, azt mutatják, hogy a termikus viselkedés modellezése számtalan területen elengedhetetlen és szükséges. Az anyagjellemzők meghatározása alapvető mérnöki feladat. A bemutatott heterogén anyagok elég jól összefoglalják azokat a tapasztalatokat, amelyek a két időskálás modellek használatához kellenek. Habár nem minden esetben szükséges a GK-, vagy a Jeffreys-egyenlet használata, mégis vannak olyan esetek, amikor ezek nélkül nem lehetett volna a megfelelő termikus jellemzőket megbízható módon azonosítani. A heterogenitások jelenléte nem jelenti feltétel nélkül azt, hogy mindenképp igen bonyolult modellek használatába kell kezdeni. A GK- és Jeffreys-egyenletek univerzalitása, anyagszerkezettől való függetlensége nagy könnyebbség a részletes modellezéssel szemben. A környezettudatosságnak nemcsak az a része fontos, hogy milyen anyagokat használunk fel, hanem az is, hogy az erőforrásainkkal hogyan bánunk. A termikus tervezésnek egy lényegesen hatékonyabb és részletesebb módját szolgáltathatják a bemutatott két időskálás modellek.

Itt fontosnak tartom, hogy Fehér Anna, mint a Ph.D. hallgatóm munkásságát külön tételesen is kiemeljem, és a dolgozatomban bemutatott tézisektől elkülönítsem. Fehér Anna érdemei a következőek:

- a kísérletileg releváns két időskálás modellek kiválasztása és a kéthőmérsékletű modell kizárása;
- a Guyer–Krumhansl- és a Jeffreys-egyenletek egyenértékűségére tett javaslatai;
- a kísérletek tervezése, mintaelőkészítés, és az adatok kiértékeléséhez egy konzisztens módszertan kidolgozása mindkét releváns két időskálás modellre vonatkozóan, és ide tartozik az analitikus megoldások kísérletekre való átültetése is;
- valamint a statikus és dinamikus skálák átlagolása a Fourier-féle hőfokvezetési tényező meghatározásához.

A saját tudományos hozzájárulásom pedig a 7. tézis foglalja össze.

7. Tézis – Heterogén anyagok termikus jellemzése

Rámutattam, hogy a kísérletileg megfigyelt dinamikus hőfokvezetési tényező mindig nagyobb, mint a statikus hőfokvezetési tényező. Ez az állítás igaz a statikus és dinamikus hővezetési tényezők viszonyára is. Heterogén anyagok hőimpulzuselvű termikus jellemzésére javaslatot tettem a próbatestek méretének, valamint a hőimpulzus idejének változtatására.

A 7. tézishez kapcsolódó publikációk: [53, 82, 104, 148, 168, 192, 193, 198].

6. fejezet

Összefoglalás és tézisek

A dolgozatomban áttekintettem azokat a jelenségeket, amelyek túlmutatnak a Fourier-egyenlet modellezési keretein, rámutattam a diffúziós és hullámterjedési jelenségek közötti különbségekre és hasonlóságokra. A Fourier-egyenleten túli modellek rendre több időskálával rendelkeznek. Erre alapozva tárgyaltam a két időskálás hővezetési egyenletek termodinamikai jelentését. A Guyer–Krumhansl- és a Jeffreys-egyenletek úgy is értelmezhetőek, mint két párhuzamos diffúziós jelenséget leíró modellek. Mindkét egyenlet a Fourier-törvény egy reális, heterogén anyagok leírására alkalmas alternatívájaként tekinthető. Ezek levezetéséhez nem használtam fel konkrét anyagszerkezeti tulajdonságokat, így a modellek nem anyagspecifikusak. Elméleti, matematikai és kísérleti irányból egyaránt megvizsgáltam a modellek tulajdonságait. Ennek ellenére azt sem szabad elfelejteni, hogy a Fourier-egyenlethez képest ez az eszköztár még közel sem teljes, és több olyan terület is van, ahol még további kutatásokra van szükség. A nyitott kérdések egyaránt érintik a hővezetési elméletek termodinamikai hátterét, a modellek Liu-eljárással való levezethetőségét, az egyes nemlinearitások figyelembevételének módját és gyakorlati relevanciáját, valamint a megoldási módszerek komplex geometriákra való átültetését. A dolgozatomban minden olyan területet érintettem, ami ahhoz szükséges, hogy az ipar számára fontos heterogén anyagok termikus tulajdonságait meg lehessen határozni, értelmezni és azt a szimulációkhoz felhasználni.

A termodinamikai háttér kapcsán be kell látni, hogy a második főtétel önmagában véve nem ad elég megkötést a modellekre vonatkozóan. Ez úgy értelmezhető, hogy ugyanaz a modell akár több módon is levezethető (eltérő állapottérrel, konstitutív összefüggésekkel, eltérő termodinamikai módszertannal). Az elmélet finomítását várhatóan majd a további gyakorlati alkalmazások és a problémamegoldások hozzák el. A Fourier-egyenlet esetén a termodinamikai hátteret lényegesen kevesebb kérdés és bizonytalanság övezte. A gyakorlati felhasználást az sem hátráltatta, hogy a róla elnevezett összefüggést először egy véges térfogatú testre vetítve írta fel először [199]. Ez a több, mint 200 éves összefüggés azóta is a mérnöki gyakorlat szerves részét képezi. Ez a Guyer–Krumhansl-, vagy a Jeffreys-egyenletről teljes egészében még nem mondható el. Az első tézisem a Fourier-egyenleten túlmutató modellek megadására vonatkozik, függetlenül attól, hogy a gyakorlat majd milyen konkrét termodinamikai erő-áram rendszert fog alkalmazni.

1. Tézis – A Fourier-egyenleten túli modellek definiálása

Kimutattam, hogy a Fourier-egyenleten túli modelleket azok onsageri alakjával kell definiálni, ami egyértelműsíti a termodinamikai erők és áramok közötti összefüggéseket, a makroszkopikus transzportegyüttthatók közötti kapcsolatokat, valamint a kezdeti és peremfeltételek fizikai tartalmát. Az onsageri alak mellé meg kell adni a modellhez tartozó állapotteret. A transzportegyüttthatók állapotfüggését onsageri szinten kell definiálni.

Az 1. tézishez kapcsolódó publikációk: [6, 14, 63, 74, 99–103].

A második tézisem már csak a Guyer–Krumhansl- és Jeffreys-egyenletekre vonatkozik, mivel a szakirodalom jelenlegi állása szerint csak ez a két modell rendelkezik a szükséges termodinamikai kompatibilitással és a két diffúziós időskálával kontinuumértelmezésben. Ennek hőfizikai jelentőségét a második tézis foglalja össze.

2. Tézis – A két diffúziós időskálával rendelkező modellek értelmezése

Megállapítottam, hogy a Guyer–Krumhansl- és Jeffreys-egyenletek, mint két időskálás modellek megkülönböztetnek statikus és dinamikus hővezetési és hőfokvezetési tényezőket. Mivel meglátásom szerint a Guyer–Krumhansl- és Jeffreys-egyenletek esetében a Fourier-szám nem pontos és félreértésre ad okot, ezért a Fourier-szám elnevezést statikus és dinamikus időskálára javaslom módosítani.

A 2. tézishez kapcsolódó publikációk: [6, 103, 104].

A két időskálás modellek onsageri alakjának figyelembevétele az anyagi nemlinearitások esetén egyenesen kötelező és elengedhetetlen, de már a modellekhez kapcsolódó kezdeti és peremfeltételek esetén is kritikus lehet. Az együtthatók hőmérséklettől (esetleg a fajlagos belső energiától, vagy az állapottér gradienseitől [101]) való függése olyan nemlineáris járulékokat adnak, amelynek igen komoly következményeik vannak a modellek megoldhatóságára és értelmezésére nézve is, ezeket összegzik a harmadik és negyedik téziseim. Habár a dolgozatom a makroszkopikus alkalmazásokra fókuszált, nem szabad megfeledkezni a lehetséges modern nanotechnológiai felhasználási lehetőségekről sem, amikor a transzportegyüttthatók még a hőáramsűrűségtől és annak irányától is függhetnek. Ez elméleti és kísérleti oldalról egyaránt sokrétű nehézségbe ütközik. Éppen emiatt a vizsgálataim csak a hőmérséklettől való függésre fókuszáltam, ugyanis az kísérletileg könnyebben ellenőrizhető, és a modellek részletes ismeretével a kísérletek is célzottan tervezhetőek. A hővezetési szakirodalomban szilárd közegek termikus transzportegyüttthatóit nem szokás (és nem is ismert) a fajlagos alakváltozás függvényében megadni, de ez már a Fourier-egyenlet szintjén is igen érdekes járulékokat adna, és például a korábbi [93, 94] szakirodalmakban bemutatott kísérleti elemzéseket is módosíthatja. Ez analóg lenne a gázok esetén ismert nyomásfüggéssel, szilárd közegek esetén azonban a teljes feszültségállapotot meg kellene adni ehhez. Ezt nehezíti, hogy még a hővezetési tényezőre sem ismert ilyen összefüggés, így azt kísérleti adatokból kellene illeszteni. Emiatt újfajta, célzott kísérletek tervezését javaslom.

3. Tézis – A Guyer–Krumhansl-egyenlet nemlineáris tulajdonságai

A Guyer–Krumhansl-egyenlet esetén megállapítottam, hogy a hővezetési tényező hőmérséklettől való függése a transzportegyüttható mindegyikére öröklődik. Ennek következménye, hogy a tömegsűrűség hőmérsékletfüggését figyelembe kellhet venni, így a hőtáguláson keresztüli termomechanikai csatolás a modellezési feladat függvényében jelentkezhet. A relaxációs idő hőmérsékletfüggését további nemlineáris járulék jelentkezése nélkül nem lehet figyelembe venni. A térben nemlokális taghoz tartozó transzportegyüttható hőmérsékletfüggése nem várt módon módosítja a látszólagos hővezetési tényezőt, amely ilyen módon hőmérséklet- és hőáramsűrűség-függővé is válhat. Az egyes transzportegyütthatókban jelentkező anyagi nemlinearitások gyors folyamatok esetén nem küszöbölhetőek ki, mivel bármely együttható hőmérsékletfüggése mindkét időskála transzportegyütthatóit érinti.

A 3. tézishez kapcsolódó publikációk: [100, 102, 103, 133, 134].

4. Tézis – A Jeffreys-egyenlet nemlineáris tulajdonságai

A Jeffreys-egyenlet esetén megállapítottam, hogy a statikus hővezetési tényező hőmérséklettől való függése anélkül is figyelembe vehető, hogy az állapotfüggés a többi transzportegyütthatóban jelentkezne. Mivel a Jeffreys-egyenletben a statikus és dinamikus skálák már konstitúciós szinten is elkülöníthetőek, emiatt lehetséges a statikus hővezetési tényező hőmérsékletfüggésének dinamikus időskálán való kiküszöbölése. A relaxációs idő hőmérsékletfüggése vagy a tömegsűrűség hőmérsékletfüggését és így a hőtágulási hatások figyelembevételét, vagy pedig további nemlineáris járulékokon keresztül mindkét időskála módosítását vonja maga után.

A 4. tézishez kapcsolódó publikációk: részben a [6, 100] publikációim tartalmazzák ezeket a megállapításokat, a teljes eredmény publikálás alatt áll.

A megoldási módszerek tekintetében az egyszerű geometriák kezelése (síkfal, henger, gömb) sem mindig könnyű feladat, főképp a peremfeltételek helyes leírása miatt. Először a kapcsolódó megoldási módszertant kellett kidolgoznom, amivel már nem csak lineáris egydimenziós feladatok kezelhetőek, valamint az analitikus megoldásokkal a numerikus megoldások validálhatóvá váltak. Ez elengedhetetlen lépés volt ahhoz, hogy a hagyományos, főleg T-reprezentációra épülő megközelítések ne vigyék a kutatást tévútra, és megbízható megoldásokon tudtam a modellek tulajdonságait vizsgálni. Ezenfelül természetesen a hővezetési kísérletek kiértékeléséhez is elengedhetetlen volt a modellek megbízható kezelése. A megoldási módszerek kidolgozása során tett megállapításaimat az ötödik és hatodik téziseim foglalják össze.

A kísérletek és a konkrét összetett szerkezetű anyagok leírása tekintetében szerencsésnek mondhattuk magunkat. A hőimpulzuselvű mérőberendezés, amelyet még Gróf Gyula és munkatársai fejlesztettek az Energetikai Gépek és Rendszerek tanszéken, olyan fix, nem állítható villanásidővel dolgozik, amely megfelelő volt ahhoz, hogy a statikus és dinamikus hőfokvezetési tényezők közötti különbség észlelhető

legyen. Ez kétségkívül hatalmas segítség volt a jelenség vizsgálatához, még azelőtt, hogy a dolgozatomban összefoglalt elméleti és gyakorlati szempontok ilyen mélységig összekapcsolódtak volna. A saját tudományos hozzájárulásom a hetedik tézis foglalja össze.

5. Tézis – Az analitikus megoldások sajátosságai

A Guyer–Krumhansl- és a Jeffreys-egyenlet hőmérséklet-reprezentációja alapján megállapítottam, hogy első- és másodfajú peremfeltételek esetén ugyanaz a sajátfüggvény-sajátérték rendszer használható. Erre építve kidolgoztam egy speciális, Galjorkin-módszerre épülő analitikus megoldási technikát. Megadtam az inhomogén kezdeti feltételek következményeit, és termodinamikailag konzisztens módszert ajánlottam a kezdeti időderiváltak figyelembevételére.

Az 5. tézishez kapcsolódó publikációk: [6, 73, 103, 125, 133, 139, 140].

6. Tézis – A nemlineáris hővezetési egyenletek numerikus stabilitása

A nemlineáris, hőmérsékletfüggő transzportegyütthatókkal rendelkező Fourier-, Guyer–Krumhansl- és a Jeffreys-féle hővezetési egyenletek numerikus stabilitásának vizsgálatához kiterjesztettem a Neumann-módszer érvényességét és egy módszert adtam a stabilitási határok becslésére. Megállapítottam, hogy a transzportegyütthatókat az anyag olyan állapotán kell figyelembe venni, ahol a leggyorsabb a karakterisztikus terjedési sebesség, és ennek becslésére a lineáris megoldásból kapott hőmérsékletbeli szélsőérték használható.

A 6. tézishez kapcsolódó publikációk: [58, 100, 102, 133, 134].

7. Tézis – Heterogén anyagok termikus jellemzése

Rámutattam, hogy a kísérletileg megfigyelt dinamikus hőfokvezetési tényező mindig nagyobb, mint a statikus hőfokvezetési tényező. Ez az állítás igaz a statikus és dinamikus hővezetési tényezők viszonyára is. Heterogén anyagok hőimpulzuselvű termikus jellemzésére javaslatot tettem a próbatestek méretének, valamint a hőimpulzus idejének változtatására.

A 7. tézishez kapcsolódó publikációk: [53, 82, 104, 148, 168, 192, 193, 198].

A vizsgált próbatestek változatossága – több, mint tízféle kőzettípus, ugyanennyi fémhab, szénhab, hagyományos és biológiailag lebontható NYÁK-ok, kondenzátor alkatrészek, különféle fémorganikus térhálós anyagok, 3D nyomtatott beton, polimer és acél – jól mutatja, hogy az effektusok felfedezése, megfelelő kiértékelése és megértése nem magától értetődő folyamat. Természetesen az összes lehetséges heterogén anyag vizsgálata nem lehetséges, és reményeim szerint a jövőben nem is feltétlenül lesz rá szükség. Ugyanis a kutatás hosszútávú célja az, hogy a konkrét anyagi szerkezet ismeretében a statikus és dinamikus skálákra pontosabb becslést adjak annál,

mint amit a legrosszabb és legjobb hővezető komponensek kijelölnek. Ez egyrészt vagy azt fogja jelenteni, hogy a mérés során illesztett paraméterek számát tovább redukálhatjuk, vagy még kedvezőbb esetben a transzportegyütthatókat előre megjósolhatjuk, akár szimulációkon keresztül, akár empirikus formulák felhasználásával. Ilyen módszertan a makroszkopikus transzportparaméterek esetére egyáltalán nem létezik, csupán speciális, molekuladinamikai szimulációkkal lehet bizonyos nanoszerkezetek hővezetési tulajdonságaira mérés nélkül becslést adni. Mindez tervezhetővé tenné a heterogén anyagok szerkezetét, ami kikövezné az utat a termikus metaanyagok új generációja felé.

A dolgozatom által érintett összes területen több olyan kérdés is van, amelyek megválaszolása még jó eséllyel akár évtizedekig is eltarthat, de ezek szükségességéhez nem férhet kétség, a szakma még csak most kezdi igazán felismerni a Fourier-egyenleten túli modellekben rejtőző potenciált. Sajnos a szakirodalomban több félreértés és félreértelmezés is megtalálható, a dolgozatom ezek egyértelműsítésében is segítséget nyújt, főként a hazai kutatói közösség számára.

Függelék

A. Az entrópia részletes definíciója

A [62, 63] munkák alapján.

1. Léteznek olyan egymástól független termodinamikai testek, amelyeket extenzív állapotjelzők és intenzív állapotfüggvények jellemeznek. Egy ilyen testet N darab extenzív állapotjelző ír le $(X_a,\ a \in 1, 2, \ldots, N)$, a termodinamikai állapotteret ezen állapotjelzők Descartes-szorzata feszíti ki. Az intenzív állapotfüggvényeket $Y_a,\ a \in 1, 2, \ldots, N$ módon jelöljük, és az X_a extenzív állapotjelzők függvényei. Egykomponensű folyadékok és gázok esetén az extenzív állapotjelzők a tömeg (m), a térfogat (V) és a belső energia (E).

2. Az entrópia az intenzív állapotjelzők vektorteréhez tartozó potenciál. Ezt fejezi ki a Gibbs-reláció:

$$\mathrm{d}S\left(X_1, X_2, \ldots, X_N\right) = \sum_{a=1}^{N} Y_a \mathrm{d}X_a. \tag{7.1}$$

   Ez azt jelenti, hogy az intenzív állapotfüggvények az entrópia parciális deriváltjaiból képezhetőek:

$$Y_a\left(X_1, X_2, \ldots, X_N\right) = \left.\frac{\partial S}{\partial X_a}\right|_{X_b,\ a\neq b}, \qquad a, b = 1, 2, \ldots, N. \tag{7.2}$$

   Folyadékokra és gázokra a Gibbs-reláció a

$$\mathrm{d}S(E, V, m) = \frac{1}{T}\mathrm{d}E + \frac{p}{T}\mathrm{d}V - \frac{\mu}{T}\mathrm{d}m \tag{7.3}$$

   alakot ölti, ahol az intenzív állapotfüggvényeket a

$$\frac{1}{T}(E, V, m) = \left.\frac{\partial S}{\partial E}\right|_{V,m}, \quad \frac{p}{T}(E, V, m) = \left.\frac{\partial S}{\partial V}\right|_{E,m}, \quad -\frac{\mu}{T}(E, V, m) = \left.\frac{\partial S}{\partial m}\right|_{E,V}, \tag{7.4}$$

   parciális deriváltak definiálják. Itt T jelöli a hőmérsékletet, p a statikus nyomást és μ a kémiai potenciált.

3. Az entrópia extenzív, ezt lokalizálhatósági feltételnek nevezik.

   (a) Az entrópia elsőrendű Euler-homogén függvénye a változóinak:

$$S\left(\lambda X_1, X_2, \ldots, X_N\right) = \lambda S\left(X_1, X_2, \ldots, X_N\right), \qquad \lambda \in \mathbb{R}^+. \tag{7.5}$$

   (b) Bármely skalár X_a esetén bevezethetjük az X_a-ra vett fajlagos entrópiát (s), amely a megfelelő fajlagos extenzív állapotjelzők függvénye, például az X_1-re nézve

$$S\left(X_1, X_2, \ldots, X_N\right) = X_1 s\left(\frac{X_2}{X_1}, \ldots, \frac{X_N}{X_1}\right). \tag{7.6}$$

Általában véve az $s(e,v)$ fajlagos entrópia és a $\rho_S\,(\rho_E,\rho)$ entrópiasűrűség használatos, ahol e a tömegre fajlagosított belső energia, v a fajtérfogat, valamint $\rho_E=\frac{E}{V}$ a belső energiasűrűség.

(c) Érvényes az extenzivitási reláció:

$$S\left(X_1,X_2,\ldots,X_N\right)=\sum_{a=1}^{N}Y_a\left(X_1,X_2,\ldots,X_N\right)X_a, \tag{7.7}$$

amely folyadékokra és gázokra vonatkozóan a

$$S(E,V,m)=\frac{1}{T}E+\frac{p}{T}V-\frac{\mu}{T}m \tag{7.8}$$

alakot ölti. A (7.7) következménye, hogy az entrópia

$$S(E,V,M)=ms(e,v)=m\left(\frac{1}{T}e+\frac{p}{T}v-\frac{\mu}{T}\right), \tag{7.9}$$

alakban felírható.

Ezen állítások fontos következménye a Gibbs-reláció, $s(e,v)$ esetén:

$$\mathrm{d}s=\frac{1}{T}\mathrm{d}e+\frac{p}{T}\mathrm{d}v. \tag{7.10}$$

4. A fajlagos entrópia konkáv. Az X_1-re vett fajlagos entrópia példáján a

$$\det\partial_{x_a,x_b}s(x_2,\ldots,x_N)\leq 0, \qquad\qquad a,b=2,\ldots,N \tag{7.11}$$

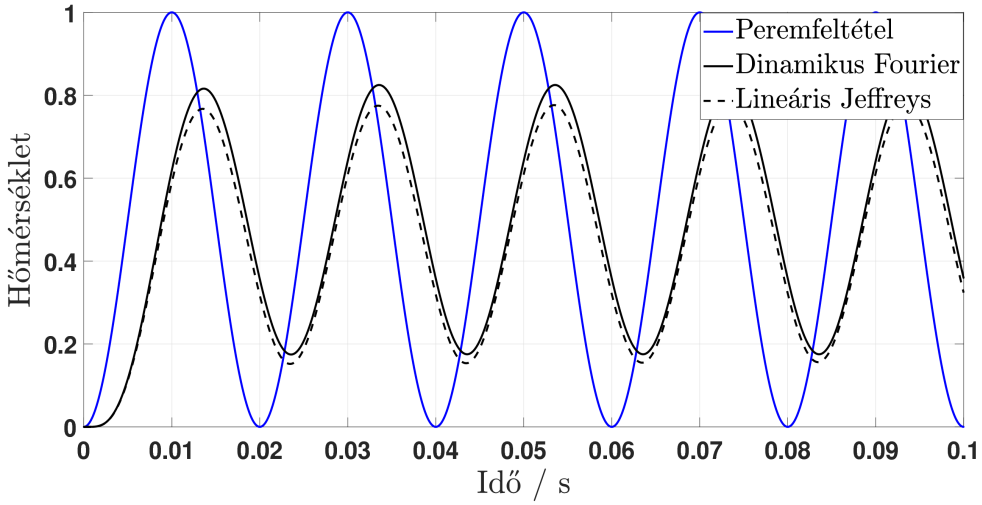
reláció teljesül. Ebből az állításból következnek a belső és az anyagi stabilitási feltételek, azaz a termodinamikai stabilitási feltételek. Ugyancsak a folyadékok és gázok példájára visszatérve, ezek a feltételek a

$$c_v:=\left.\frac{\partial e(T,v)}{\partial T}\right|_v>0, \qquad\qquad \chi_T:=-\frac{1}{v}\left.\frac{\partial p(T,v)}{\partial v}\right|_T>0, \tag{7.12}$$

relációkhoz vezetnek, ahol c_v az izochor fajhő és χ_T az izoterm kompresszibilitás.

B. A Jeffreys-egyenlet nemlineáris viselkedésének numerikus demonstrációja

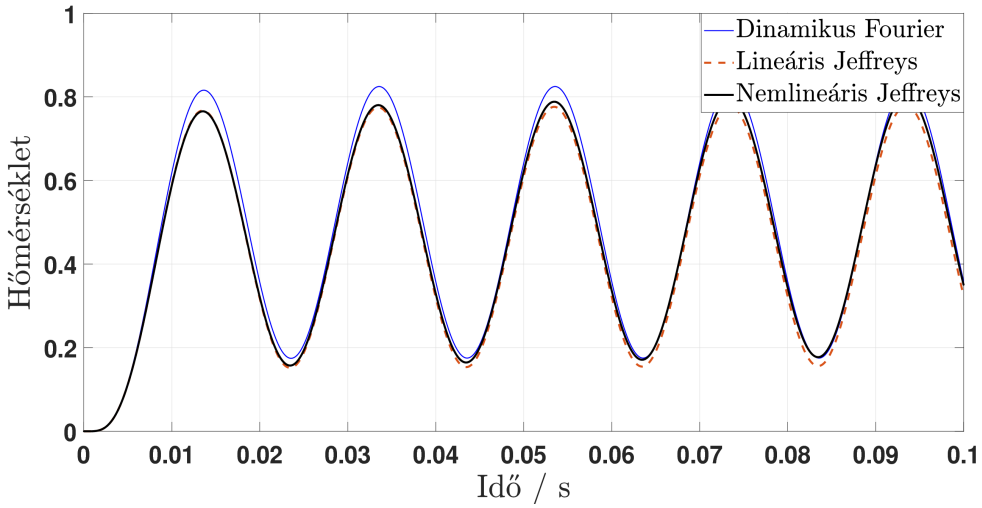
Az időskálák viselkedésének demonstrálására most olyan numerikus szimulációkat végzek, amelyekben a statikus és dinamikus hővezetési tényezők egymástól lényegesen eltérnek. A megoldás módszertanát a negyedik fejezet tárgyalja részleteiben. Ahhoz, hogy gyors folyamatokat lehessen szimulálni, időben periodikus hőmérséklet-peremfeltételt célszerű definiálni, például $T(x = 0, t) = T_0(1 - \cos(\pi t/t_p))/2$ alakban[1], amelyben a t_p paraméterrel lehet beállítani, hogy mennyire gyors legyen az ismétlésszám, azaz milyen gyorsaságú folyamatokat tekintünk. A hátlap ($x = L$) legyen adiabatikus, a rendszer induljon homogén egyensúlyi helyzetből. Demonstrációs jelleggel legyen a statikus időskála egységnyi, a dinamikus legyen tíz egység, azaz $\lambda_2/\tau = 10\lambda_1$.



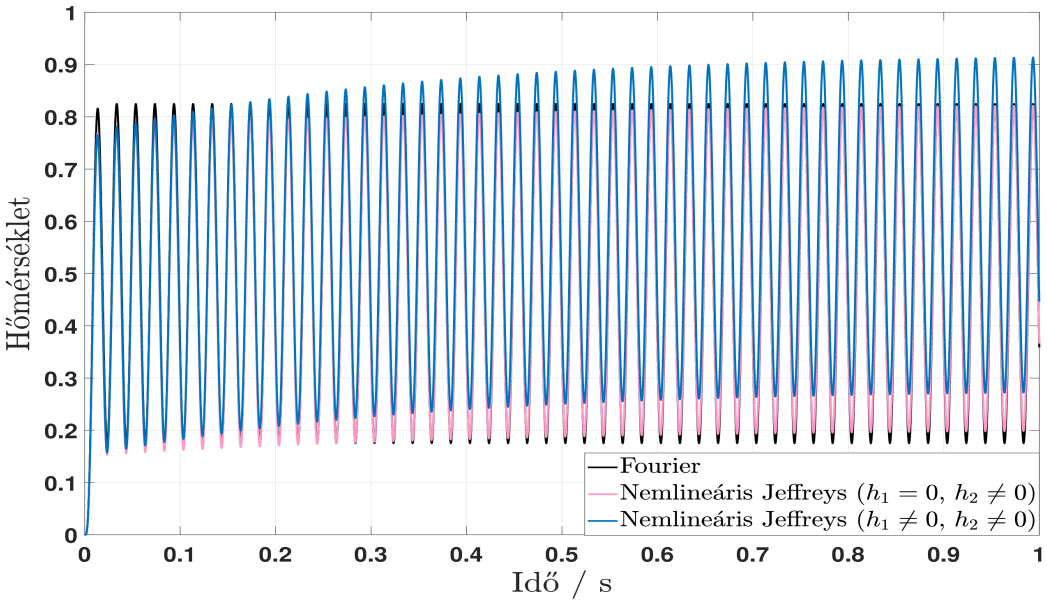
7.1. ábra. A Fourier- és a Jeffreys-egyenletek numerikus összevetése $t_p = 0.1$ s esetén az $x = L$ helyen. A Fourier-egyenletben a dinamikus λ_2/τ hővezetési tényezőt használva annak tranziens viselkedése jól közelíti a lineáris Jeffreys-egyenlet megoldását, mivel a dinamikus skála dominál.

A 7.1. ábra az időskálák szétválasztását szemlélteti, és a peremfeltételektől függően a Fourier-törvény elég jó közelítést adhat a Jeffreys-egyenlet megoldására. A 7.2. ábra már a nemlineáris Jeffreys-egyenlet megoldását mutatja be, ahol szintén látni a dinamikus skála dominanciáját, de mivel a statikus skála ettől még jelen van, a nemlineáris járulék időderiváltak nélkül közelíti a dinamikus tagokat, emiatt csak a folyamat elejére lehet érvényes ez a lineáris közelítés. Ráadásul az $l_{12}(T)$ és $l_{21}(T)$ függések csak a statikus skálát módosítják és teszik hőmérsékletfüggővé. Ebből az következik, hogy a stacioner állapot is eltolódik, attól függően, hogy mennyire erős függés van jelen a modellben (lásd a 7.3. ábrát).

[1] Azért választottam az $1 - \cos()$ alakot, mert numerikus szempontból előnyös, ha nulla deriválttal indítjuk a folyamatot, és a függvény végig sima is marad, így elkerülhetőek a mesterséges, numerikus eredetű oszcillációk.



7.2. ábra. A Fourier-, a lineáris Jeffreys-, valamint a nemlineáris Jeffreys-egyenletek összevetése. A 7.1. ábrához hasonló dinamikus skálán a megoldás változása szinte elhanyagolható, mivel a nemlinearitásokat a statikus skála okozza. Emiatt ez a közelítés csak a folyamat elejére lehet érvényes. A nemlinearitást az $l_{12} = l_{12,0} + h_1 T$ és $l_{21} = l_{21,0} + h_2 T$ módon vettem figyelembe, ahol legyen $h_1 = 0{,}5\ \langle\!\langle l_{12} \rangle\!\rangle / \mathrm{K}$ és $h_2 = 0{,}5\ \langle\!\langle l_{21} \rangle\!\rangle / \mathrm{K}$, azaz a statikus skálával összemérhető hőmérsékletfüggő skálát vezettem be.



7.3. ábra. A Fourier, és két nemlineáris Jeffreys-egyenlet megoldása, szemléltetve, hogy a h_1 és h_2 paraméterek (lásd a 7.2. ábrát) hogyan hangolják el a nagyobb időskálájú megoldást. Ennek ellenére a Fourier-egyenlet a dinamikus hővezetési tényezővel elég jó közelítést tud adni és őrzi a megoldás fázisát is, ugyanis a nemlinearitások a statikus skálát, és így a hosszabb távú viselkedést hangolják el.

C. A Navier–Stokes–Fourier-egyenletek Liu-eljárással való levezetése

A (3.22)-(3.24) mérlegegyenleteket kényszerként felhasználva kapjuk a

$$
\begin{aligned}
0 \leq{}& \rho\dot{s} + \nabla\cdot\mathbf{J}_s - b_1\left(\dot{\rho} + \rho\nabla\cdot\mathbf{v}\right) - \mathbf{b}_2\cdot\left(\rho\dot{\mathbf{v}} + \mathbf{P}\cdot\nabla\right) - b_3\left(\rho\dot{e_{\mathrm{tot}}} + \nabla\cdot\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}\right)\\
={}& \left(\rho\frac{\partial s}{\partial\rho} - b_1\right)\dot{\rho} + \rho\left(\frac{\partial s}{\partial\mathbf{v}} - \mathbf{b}_2\right)\cdot\dot{\mathbf{v}} + \rho\left(\frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}} - b_3\right)\dot{e_{\mathrm{tot}}} + \rho\frac{\partial s}{\partial\left(\nabla\rho\right)}\cdot\dot{\left(\nabla\rho\right)}\\
&+ \rho\frac{\partial s}{\partial\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)} : \dot{\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)} + \rho\frac{\partial s}{\partial\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)}\cdot\dot{\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)} + \left(\frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial\rho} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\rho} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial\rho}\right)\cdot\nabla\rho\\
&+ \left(\frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial\mathbf{v}} - b_1\rho\mathbf{1} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\mathbf{v}} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial\mathbf{v}}\right) : \left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)\\
&+ \left(\frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial e_{\mathrm{tot}}} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial e_{\mathrm{tot}}} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial e_{\mathrm{tot}}}\right)\cdot\nabla e_{\mathrm{tot}} \qquad (7.13)\\
&+ \left(\frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial\left(\nabla\rho\right)} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\left(\nabla\rho\right)} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial\left(\nabla\rho\right)}\right) : \left[\left(\nabla\rho\right)\otimes\nabla\right]\\
&+ \left(\frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)}\right) \vdots \left[\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)\otimes\nabla\right]\\
&+ \left(\frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)}\right) : \left[\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)\otimes\nabla\right].
\end{aligned}
$$

egyenlőtlenséget, ahol a b_1, $\mathbf{b}_2$ és b_3 a Lagrange–Farkas szorzók. Az úgynevezett Liu-egyenletek a következő alakot öltik:

$$\dot{\rho}: \qquad \rho\frac{\partial s}{\partial\rho} - b_1 = 0, \qquad (7.14)$$

$$\dot{\mathbf{v}}: \qquad \frac{\partial s}{\partial\mathbf{v}} - \mathbf{b}_2 = \mathbf{0}, \qquad (7.15)$$

$$\dot{e_{\mathrm{tot}}}: \qquad \frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}} - b_3 = 0, \qquad (7.16)$$

$$\dot{\left(\nabla\rho\right)}: \qquad \rho\frac{\partial s}{\partial\left(\nabla\rho\right)} = \mathbf{0}, \qquad (7.17)$$

$$\dot{\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)}: \qquad \rho\frac{\partial s}{\partial\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)} = \mathbf{0}, \qquad (7.18)$$

$$\dot{\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)}: \qquad \rho\frac{\partial s}{\partial\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)} = \mathbf{0}, \qquad (7.19)$$

$$\left(\nabla\rho\right)\otimes\nabla: \qquad \frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial\left(\nabla\rho\right)} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\left(\nabla\rho\right)} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial\left(\nabla\rho\right)} = \mathbf{0}, \qquad (7.20)$$

$$\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)\otimes\nabla: \qquad \frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial\left(\mathbf{v}\otimes\nabla\right)} = \mathbf{0}, \qquad (7.21)$$

$$\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)\otimes\nabla: \qquad \frac{\partial\mathbf{J}_s}{\partial\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)} - \mathbf{b}_2\cdot\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)} - b_3\frac{\partial\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}}{\partial\left(\nabla e_{\mathrm{tot}}\right)} = \mathbf{0}. \qquad (7.22)$$

Ezek következménye, hogy a fajlagos entrópia csak a termodinamikai állapottér $\mathbf{x}$ elemeitől függ, annak gradienseitől nem, összhangban a 2. fejezetben bemutatott termodinamikai levezetéssel, tehát a Gibbs-reláció a

$$\mathrm{d}s = \frac{\partial s}{\partial \rho}\mathrm{d}\rho + \frac{\partial s}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathrm{d}\mathbf{v} + \frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}}\mathrm{d}e_{\mathrm{tot}} = \frac{b_1}{\rho}\mathrm{d}\rho + \mathbf{b}_2 \cdot \mathrm{d}\mathbf{v} + b_3 \mathrm{d}e_{\mathrm{tot}} \tag{7.23}$$

alakot ölti. Az utolsó három (7.20)-(7.22) Liu-egyenletből a gradiensek szerinti integrálás után megkapjuk az entrópia áramsűrűségére vonatkozó kifejezést, azaz

$$\mathbf{J}_s\left(\tilde{\mathbf{x}}\right) = \frac{\partial s}{\partial \mathbf{v}}\left(\mathbf{x}\right) \cdot \mathbf{P}\left(\tilde{\mathbf{x}}\right) + \frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}}\left(\mathbf{x}\right)\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}\left(\tilde{\mathbf{x}}\right) + \mathbf{J}_{s,0}\left(\mathbf{x}\right), \tag{7.24}$$

ahol az utolsó tagban kifejezett $\mathbf{J}_{s,0}$ az integrálás miatti eltolási szabadságfoknak felel meg, emiatt függ csak $\mathbf{x}$-től és nem $\tilde{\mathbf{x}}$-tól, következésképpen nullának is választható. Mindezek figyelembevétele után sokkal átláthatóbb alakra hozhatjuk a disszipációs egyenlőtlenséget,

$$\begin{aligned}
0 \leq & \left(\frac{\partial}{\partial \rho}\frac{\partial s}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{P} + \frac{\partial}{\partial \rho}\frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}}\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}\right) \cdot \nabla\rho \\
& + \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \otimes \frac{\partial s}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{P} - \rho^2\frac{\partial s}{\partial \rho}\mathbf{1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}} \otimes \mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}\right) : (\mathbf{v} \otimes \nabla) \\
& + \left(\frac{\partial}{\partial e_{\mathrm{tot}}}\frac{\partial s}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{P} + \frac{\partial}{\partial e_{\mathrm{tot}}}\frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}}\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}\right) \cdot \nabla e_{\mathrm{tot}} \\
= & \left(\frac{\partial s}{\partial \mathbf{v}}\right) \otimes \nabla : \mathbf{P} + \nabla\left(\frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}}\right) \cdot \mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}} - \rho^2\frac{\partial s}{\partial \rho}\mathbf{1} : (\mathbf{v} \otimes \nabla).
\end{aligned} \tag{7.25}$$

Az $e_{\mathrm{tot}} = e + \mathbf{v}\cdot\mathbf{v}/2$ összefüggést a Gibbs-relációban kihasználva az e_{tot} összenergiát az e fajlagos belső energiára írhatjuk át,

$$\mathrm{d}s = \frac{1}{T}\mathrm{d}e_{\mathrm{tot}} - \frac{\mathbf{v}}{T} \cdot \mathrm{d}\mathbf{v} - \frac{p}{\rho^2 T}\mathrm{d}\rho = \frac{1}{T}\mathrm{d}e - \frac{p}{\rho^2 T}\mathrm{d}\rho, \tag{7.26}$$

így az entrópia deriváltjaira

$$\frac{\partial s}{\partial e_{\mathrm{tot}}} = \frac{\partial s}{\partial e} = \frac{1}{T}, \qquad \frac{\partial s}{\partial \mathbf{v}} = -\frac{\mathbf{v}}{T}, \qquad \frac{\partial s}{\partial \rho} = -\frac{p}{\rho^2 T}. \tag{7.27}$$

kifejezések adódnak, amiből kiolvasható, hogy a reciprok hőmérséklet független attól, hogy belső vagy összenergiával dolgozunk. A lényeges különbség abban rejlik, hogy a $\mathbf{v}$ sebességet az állapottér részének tekintjük-e vagy sem, az összenergiával történő reprezentációban annak kell tekinteni. Így a (7.25) disszipációs egyenlőtlenséget tovább egyszerűsíthetjük,

$$0 \leq -\left(\frac{\mathbf{v}}{T}\right) \otimes \nabla : \mathbf{P} + \nabla\left(\frac{1}{T}\right) \cdot \mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}} + \frac{p}{T}\mathbf{1} : (\mathbf{v} \otimes \nabla) \tag{7.28}$$

$$= -\frac{1}{T}\left(\mathbf{P} - p\mathbf{1}\right) : (\mathbf{v} \otimes \nabla) + \left(\mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}} - \mathbf{v} \cdot \mathbf{P}\right) \cdot \nabla\left(\frac{1}{T}\right), \tag{7.29}$$

amiben felismerhető a viszkózus nyomástenzor ($\mathbf{\Pi}$) és a hőáramsűrűség:

$$\mathbf{\Pi}\left(\tilde{\mathbf{x}}\right) := \mathbf{P}\left(\tilde{\mathbf{x}}\right) - p\left(\mathbf{x}\right)\mathbf{1}, \tag{7.30}$$

$$\mathbf{q}\left(\tilde{\mathbf{x}}\right) := \mathbf{J}_{\mathrm{e,tot}}\left(\tilde{\mathbf{x}}\right) - \mathbf{v} \cdot \mathbf{P}\left(\tilde{\mathbf{x}}\right). \tag{7.31}$$

D. Az egy térdimenziós GK-egyenlet megoldása a hőimpulzuselvű kísérleti elrendezésre változók szétválasztásának segítségével

Ez a levezetés a [73] publikációmon alapul.
Az időfüggő peremfeltétel miatt szükség van a peremfeltételek leválasztására, azaz a hőáramsűrűséget $q(x,t) = q_{\mathrm{h}}(x,t) + \hat{q}_{\mathrm{p}}(x,t)$ részekre bonthatjuk, ahol a "h" index a homogén peremfeltételű mezőt jelöli, a "p" index a peremfeltételt reprezentálja a

$$\hat{q}_{\mathrm{p}}(x,t) = q_0(t) + \frac{x}{L}\Big(q_L(t) - q_0(t)\Big) = \left(1 - \frac{x}{L}\right) q_0(t) \quad \Rightarrow \quad \partial_{xx}\hat{q}_{\mathrm{p}}(x,t) = 0, \tag{7.32}$$

alakban, ahol kihasználtam a $q(x = L, t) = q_L(t) = 0$ feltételt. Ebből fakadóan a q-reprezentáció ki fog egészülni a $\hat{q}_{\mathrm{p}}$ időderiváltjaiból álló inhomogenitásokkal,

$$\tau\partial_{tt}(q_{\mathrm{h}} + \hat{q}_{\mathrm{p}}) + \partial_t(q_{\mathrm{h}} + \hat{q}_{\mathrm{p}}) = a\partial_{xx}q_{\mathrm{h}} + \kappa^2\partial_{txx}q_{\mathrm{h}}, \tag{7.33}$$

ami azt is feltételezi, hogy a $q_{\mathrm{h}}(x,t)$-ra kapott sajátfüggvények és sajátértékek által kifeszített térben $\hat{q}_{\mathrm{p}}$ reprezentálható.

A szorzatszeparációt a $q_{\mathrm{h}}(x,t) = \varphi(t)X(x)$ módon végzem el, és a

$$\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}x^2} + \beta^2 X = 0, \quad X(x=0) = 0, \quad X(x=L) = 0 \tag{7.34}$$

sajátfüggvény-sajátérték feladatra jutok. A differenciálegyenlet megoldása és a peremfeltételek figyelembevétele után a

$$X(x) = \sin(\beta_n x), \quad \beta_n = \frac{n\pi}{L}, \quad n \in \mathbb{N} \tag{7.35}$$

megoldást kapom, β_n sajátértékekkel. Itt meg kell jegyeznem, hogy a peremfeltételek végtelen sok n-re teljesülnek, így minden n-re vonatkozó tag megoldás. Lineáris egyenletek lévén a megoldások összege is megoldás, így végül a $q_{\mathrm{h}}(x,t)$ megoldását

$$q_{\mathrm{h}}(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(t)\sin(\beta_n x) \tag{7.36}$$

alakban írhatom. Ebből következik, hogy a $\hat{q}_{\mathrm{p}}(x,t)$ térbeli részét az így kijelölt sajátfüggvények terében Fourier-sorfejtés után írhatjuk fel, amit a $q_{\mathrm{h}}(x,t)$ időbeli részére vonatkozó differenciálegyenlet jobb oldalán minden n módusra fel is használok:

$$\tau\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\varphi_n + (1 + \beta^2\kappa^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\varphi_n + a\beta^2\varphi_n = -f_n(t), \quad f_n = \frac{2}{n\pi}\left(\tau\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right) q_0(t), \tag{7.37}$$

ami tetszőleges, de időben folytonos $q_0(t)$ peremfeltételre megadja a $q_{\mathrm{h}}(x,t)$ időbeli változását. Ezzel a $q(x,t) = q_{\mathrm{h}}(x,t) + \hat{q}_{\mathrm{p}}(x,t)$ minden része ismert, és ebből a $T(x,t)$ hőmérsékletmező a fajlagos belső energia mérlegegyenletéből előállítható, azaz

$$T(x,t) = -\frac{1}{\rho c_v}\int_0^t \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(\tilde{t})\beta_n \cos(\beta_n x)\mathrm{d}\tilde{t} + T_0(x), \tag{7.38}$$

amelyben a $\partial_x q(x,t)$ deriválás a már ismert $q(x,t)$ miatt elvégezhető. Az integrálás nem köti meg teljesen a hőmérsékletmezőt, egy eltolási szabadságfok még rendelkezésre áll, ezt mutatja a jobb oldalon álló $T_0(x)$ hőmérséklet.

A Fourier-sor konvergencia-tulajdonságaitól és az összegzendő függvények folytonosságától függően az integrálás és a deriválás a végtelen összegzéssel felcserélhető [200]. Mivel ebben az esetben a hővezetési kísérlet elrendezése és a mérnöki szempontból releváns megoldásai nem igénylik szakadásos hőáramsűrűség és hőmérsékletmezők kezelését, valamint az időbeli és térbeli részekben sem lépnek fel nagy gradiensek, ezért a végtelen összeg helyett – paraméter beállításoktól függően – elegendő lehet 10, vagy annál kevesebb tag is. Emiatt az integrálás és a deriválás tagonként könnyen elvégezhető.

Amennyiben a $q_0(t)$ peremfeltételt időben szakaszokra bontom a (4.1)-nek megfelelően, akkor a szakaszok között illesztési feltételeket kell megadni, vagyis a második, $t > t_p$ szakasz kezdeti feltételeit a $t = t_p$ állapot egyértelműen meghatározza. Ez azt jelenti, hogy

$$q_I(x, t = t_p) = q_{II}(x, \hat{t} = 0), \quad \left.\frac{\mathrm{d}q_I}{\mathrm{d}t}\right|_{t=t_p} = \left.\frac{\mathrm{d}q_{II}}{\mathrm{d}t}\right|_{\hat{t}=0}, \quad \hat{t} = t - t_p, \tag{7.39}$$

kezdeti feltételeknek teljesülniük kell, valamint a hőmérsékletek folytonosságát a $T_I(x, t = t_p) = T_{II}(x, \hat{t} = 0)$ feltétel fogja meghatározni, vagyis a fenti $T_0(x)$ eltolási szabadságfok ezzel a $t > t_p$ időpontokra vonatkozóan megköthető. A teljes megoldás az előző gondolatmenet ismétlésével előállítható, de ott elegendő az időbeli változást meghatározni, mivel a homogén rész peremfeltételei változatlanok, tehát a térbeli részt leíró sajátfüggvények is változatlanok. Mivel az első szakaszból ($t \leq t_p$) a Fourier-együttható minden n tagra ismert, ezért a második szakasz kezdeti feltételeihez nem kell a $t = t_p$ állapotot Fourier-sorba fejteni.

E. Az egy térdimenziós GK-egyenlet megoldása a hőimpulzuselvű kísérleti elrendezésre a Galjorkin-módszer segítségével

Az [53] publikációra építve.
A hőimpulzus-kísérlet modellezésében módosítok a (4.1) peremfeltételen,

$$q_0(t) = -q_{\max}\Big(e^{-C_1 t} - e^{-C_2 t}\Big), \quad q_L(t) = \alpha(T(x=L,t) - T_\infty), \tag{7.40}$$

amiben most a hőimpulzust nem egy szakaszosan definiált függvénnyel modellezem, hanem egy folytonos függvénnyel váltom ki, amelynek a karakterisztikáját a C_1 és C_2 konstansokkal állíthatjuk be. A hátfalon konvektív hőátadással hűlést írok elő, T_∞ környezeti hőmérséklettel és α hőátadási tényezővel. A kezdeti feltételek homogén nyugalmi helyzetet írnak elő ($T_0(x) = T_\infty$, $q(x, t=0) = 0$).

A D. függelékben részletezett, a Fourier-egyenlet esetére meghatározott bázisfüggvényeket használom, $\varphi_n(x) = \sin(\beta_n x)$, $\phi_n(x) = \cos(\beta_n x)$, $\beta_n = n\pi/L$. Ugyancsak elvégzem a peremleválasztást, amihez a $q(x,t) = q_\mathrm{h}(x,t) + \hat{q}_\mathrm{p}(x,t)$ felbontást használom. A szorzatszeparációs módszerhez képest igen komoly előny az, hogy a Galjorkin-módszerrel, kis Biot-számokra (0,1-nél kisebb esetekben) a hátfali hűlési peremfeltétel egy időfüggő peremfeltétellé redukálható, azaz

$$q_L = \alpha \sum_{n=0}^{N} B_n(t)\cos(\beta_n L) = \alpha \sum_{n=0}^{N} B_n(t)\cos(n\pi) = \alpha \sum_{n=0}^{N} B_n(t)(-1)^n, \tag{7.41}$$

valamint az αT_∞ egy könnyen kitranszformálható eltolási szabadságfok, például a bordák termikus modellezése során is használt $T(x,t) - T_\infty$ túl-hőmérséklet bevezetésével, emiatt nem foglalkozok ezzel a taggal. A (7.32) összefüggést felidézve,

$$\hat{q}_\mathrm{p}(x,t) = q_0(t) + \frac{x}{L}\Big(q_L(t) - q_0(t)\Big) \quad \Rightarrow \quad \partial_{xx}\hat{q}_\mathrm{p}(x,t) = 0, \tag{7.42}$$

perembeli leválasztást alkalmazom. A $\hat{q}_\mathrm{p}$ függvényt a $\varphi_n(x)$ és $\phi_n(x)$ bázisokban szükséges reprezentálni, attól függően, hogy melyik mezőre vonatkozó egyenletben jelenik meg, mint inhomogenitás. Ennek megfelelően az $A_n(t)$ és $B_n(t)$ együtthatókat a következő differenciálegyenlet-rendszer határozza meg [53],

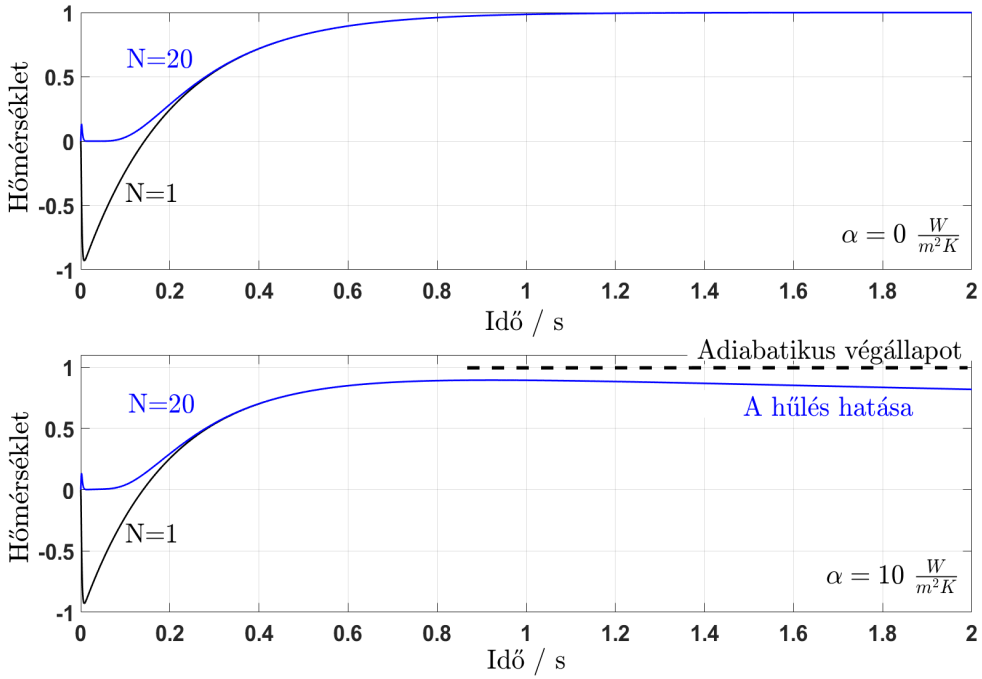
$$\rho c_v \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} B_0 = -\alpha B_0 + q_0, \quad A_0 = 0, \quad n = 0, \tag{7.43}$$

valamint az $n > 0$ esetekre:

$$\rho c_v \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} B_n + \beta_n A_n = 0, \tag{7.44}$$

$$\tau \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} A_n + \Big(1 + \kappa^2 \beta_n^2\Big) A_n - \lambda \beta_n B_n = \frac{2}{n\pi}\Big(1 + \tau \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big)(\alpha B_n - q_0). \tag{7.45}$$

A peremleválasztás miatti inhomogenitások ($q_0(t)$ és $q_L(t)$) egyaránt megjelennek az együtthatókat meghatározó egyenletekben. Ebből azt olvashatjuk ki, hogy a



7.4. ábra. A GK-egyenlet analitikus megoldásainak és azok konvergenciájának demonstrációja az [53] alapján. Jól megfigyelhető, hogy N növelésével a megoldásban eltűnik az $N = 1$ tagra jellemző nem-fizikai szakasz, ez a Fourier-egyenlet esetén is így működik.

hőmérséklet-eloszlást leíró sor nulladik tagja kizárólag a peremfeltételek függvénye, és a hátfali hűlés időskálája dominálja hosszabb időintervallumon (lásd a 7.4. ábrát). Ezáltal egy megoldáscsaládot adtam meg, mivel ez tetszőleges, de folytonos $q_0(t)$ esetére működik, de akár a $q_L(t)$ is lehet a meglevőtől eltérő függvény.

A Jeffreys-egyenlet esetén az eljárás ugyanez, így a megoldások és azok elemzése kapcsán a [104] irodalomra hivatkozok, jelen esetben a módszertan bemutatásához ez nem nyújt mélyebb betekintést. Végül meg kell említenem, hogy bonyolult peremfeltételi függvények esetén a közönséges differenciálegyenletek numerikusan is könnyen integrálhatóak, így egy félig analitikus-numerikus módszert kapunk eredményül, ha azok zárt formája nem állítható elő. A megoldások létezésének az a feltétele, hogy az $A_n(t)$, $B_n(t)$, valamint a peremfeltételi függvények időben folytonosak legyenek.

F. Kétdimenziós, hengerszimmetrikus hővezetési feladatok megoldása

A [125] munkámra építve.
Ebben az esetben a homogén részre a változók szétválasztása egy kétlépcsős eljárás, azaz először szét kell választani az idő- és térváltozókat a $T_\mathrm{h}(r,z,t) = \Gamma(t)\xi(r,z)$ alakban, majd a második lépésben a térváltozókat kell szeparálni, $\xi(r,z) = \chi(r)\zeta(z)$ módon. Jelen esetben az időbeli résszel nem foglalkozom, mivel most csak a bázisfüggvény-rendszert kívánom meghatározni. Ezt a

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\chi + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi + \mu^2\chi = 0, \quad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\zeta + \gamma^2\zeta = 0 \tag{7.46}$$

differenciálegyenletek kötik meg, amelyekben μ és γ az egyes bázisfüggvények saját-értékei. A peremfeltételeket felhasználva a

$$\chi(r) = J_0(\mu_n r), \quad \mu_n: \quad J_0(\mu_n) = 0, \quad \zeta(z) = \cos(\gamma_m z), \quad \gamma_m = \frac{\pi}{2} + m\pi, \tag{7.47}$$

sajátfüggvényeket és a hozzájuk tartozó sajátértékeket ($n, m \in \mathbb{N}$) kapom eredmé-nyül, ahol $J_0(r)$ az elsőfajú, nulladrendű Bessel-függvény. A μ_n meghatározását numerikus úton elvégezhetjük, de ezt nem kell több, mint 50 sajátértékre elvégezni, ugyanis a Bessel-függvény a

$$J_0(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi r}}\cos\left(r - \frac{\pi}{4}\right) \tag{7.48}$$

módon közelíthető, és így a μ_n sajátértékek zárt alakban előállíthatóak. A homogén részt a

$$T_\mathrm{h}(r,z,t) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} K_{nm} e^{-\beta_{nm}^2 t} J_0(\mu_n r)\cos(\gamma_m z), \quad \beta_{nm}^2 = \mu_n^2 + \gamma_m^2 \tag{7.49}$$

alakban kapom meg a szorzatszeparációs megoldás során, ahol a K_{nm} konstans a kezdeti feltételt veszi figyelembe, ez a homogén részre éppen az inhomogén rész -1-szerese lesz a $T(r,z,t) = T_\mathrm{st}(r,z) + T_\mathrm{h}(r,z,t)$ felbontás miatt[2]. Emiatt az inhomogén állandósult hőmérséklet-eloszlást a

$$T_\mathrm{st}(r,z) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} C_{nm} J_0(\mu_n r)\cos(\gamma_m z), \tag{7.50}$$

formában kapom meg, valamint a térfogati hőforrást is ugyanebben a bázisfüggvény-rendszerben kell felírni,

$$q_\mathrm{v,max}(r,z) = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} B_{nm} J_0(\mu_n r)\cos(\gamma_m z), \tag{7.51}$$

[2]Hasonlóan az egydimenziós esethez, a $T(r,z,t=0) = T_0$ homogén egyensúlyi kezdeti feltétel egy eltolással nullába transzformálható a könnyebbség kedvéért.

ahol a B_{nm} a (4.17) egyenlet által leírt függvények Bessel–Fourier-sorfejtéséből adódik ki,

$$B_{nm} = \frac{4}{L[J_1(\mu_n)]^2} \int_0^L \int_0^L r q_{vr}(r) q_{vz}(z) J_0(\mu_n r) \cos(\gamma_m z) \mathrm{d}r \mathrm{d}z, \tag{7.52}$$

amelyben $J_1(r)$ az elsőfajú, elsőrendű Bessel-függvény. Az integrálást nagyban megkönnyíti, ha a hőforrást szorzatalakban definiáljuk, azaz szét lehet választani az axiális és radiális irányú komponenseket, így az integrálás komponensenként elvégezhető. A C_{nm} a fenti összefüggések energiamérlegbe való visszahelyettesítéséből kiadódik, azaz összekapcsolom a térfogati hőforrásból származó B_{nm} együtthatókat és az állandósult hőmérséklet-eloszlást meghatározó C_{nm} együtthatókat a

$$C_{nm} = B_{nm} \frac{1}{\beta_{nm}^2} \tag{7.53}$$

összefüggésen keresztül. Kihasználtam, hogy a Bessel-függvények ortogonalitása az r-rel való szorzás után értelmezett, ezért is szerepel a B_{nm} kifejezésében is a sorfejtés esetén. Ezenfelül még azt is fontos megemlíteni, hogy a $T_\mathrm{h}(r,z,t)$ homogén időfüggő rész kezdeti feltételét a $T_\mathrm{st}(r,z)$ leválasztása módosítja a $T_\mathrm{h}(r,z,t=0) = T(r,z,t=0) - T_\mathrm{st}(r,z)$ összefüggés szerint. A bemutatott módszertan további előnye, hogy az egyes tagokat is eleve a megfelelő függvényrendszerben állítottam elő, így a kezdeti feltétel figyelembevétele szinte trivialitássá fajul, és a

$$K_{nm} = -C_{nm} \tag{7.54}$$

összefüggés elégíti ki. Ezzel formálisan bármilyen olyan térfogati hőforrásra megadtam a Fourier-egyenlet megoldását, amely Bessel–Fourier-sorba fejthető. A GK- és a Jeffreys-egyenletek esetére a lépéseket nem kívánom újra megismételni, a módszertan semmilyen szempontból nem változik, egy lényeges szempont figyelembevétele mellett. A GK-egyenletben a helyfüggő hőforrások helykoordináta szerinti deriváltja is megjelenik, így az állandósult állapot megváltozik. Azonban a helyfüggő hőforrást szándékosan egy igen kicsi tértartományra koncentráltam, azon kívül a hőforrás igen jó közelítéssel konstans, a deriváltja pedig közel nulla. A GK-egyenlet megoldását a

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{bmatrix} \tilde{C}_{nm}(t) \\ \tilde{D}_{nm}(t) \\ \tilde{E}_{nm}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\mu_n & -\gamma_m \\ \frac{\mu_n}{\tau} & -\frac{c_1}{\tau} & -\frac{c_2}{\tau} \\ \frac{\gamma_m}{\tau} & -\frac{c_4}{\tau} & -\frac{c_3}{\tau} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{C}_{nm}(t) \\ \tilde{D}_{nm}(t) \\ \tilde{E}_{nm}(t) \end{bmatrix}, \tag{7.55}$$

alakban adom meg, ahol a $c_{1,2,3,4}$ együtthatók:

$$c_1 = 1 + (\eta_1 + \eta_2)(2 + \mu_n^2) + \eta_1 \gamma_m^2, \quad c_2 = \eta_2 \mu_n \gamma_m, \quad c_3 = 1 + \gamma_m^2(\eta_1 + \eta_2) + \mu_n^2 \eta_1,$$

$$c_4 = 2\gamma_m \eta_2 \left(\frac{1}{\mu_n [J_1(\mu_n)]^2} + \mu_n \right). \tag{7.56}$$

A $\tilde{C}_{nm}$, $\tilde{D}_{nm}$, $\tilde{E}_{nm}$ együtthatók a hőmérséklet, valamint az r- és z-irányú hőáram-komponensek együtthatóit reprezentálják, felettük hullámmal jelölve, hogy ezek a

Fourier-tól eltérő együtthatókat jelentik [125]. A Jeffreys-egyenlet esetén a megoldás alakja azonos, az együtthatómátrix alakja egyszerűsödik,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix}\tilde{C}_{nm}(t)\\ \tilde{D}_{nm}(t)\\ \tilde{E}_{nm}(t)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & -\mu_n & -\gamma_m\\ \frac{\mu_n}{\tau} & -\frac{1+\lambda_2\mu_n^2}{\tau} & -\frac{\lambda_2\mu_n\gamma_m}{\tau}\\ \frac{\gamma_m}{\tau} & -\frac{\lambda_2\mu_n\gamma_m}{\tau} & -\frac{1+\lambda_2\gamma_m^2}{\tau}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\tilde{C}_{nm}(t)\\ \tilde{D}_{nm}(t)\\ \tilde{E}_{nm}(t)\end{bmatrix}, \tag{7.57}$$

de a $\tilde{C}_{nm}$, $\tilde{D}_{nm}$, $\tilde{E}_{nm}$ együtthatók jelentése nem változik. Mivel mindkét esetben egy lineáris közönséges differenciálegyenlet-rendszert kaptam eredményül, ezért ezek megoldása egy egyszerű $\exp(\mathbf{M}_{nm}t)$ alakban az N-M-tagú sor minden elemére előállítható, ahol $\mathbf{M}_{nm}$ a modellnek megfelelő együtthatómátrixot jelenti.

G. A két térdimenziós GK-egyenlet numerikus megoldása eltolt mezőkön alapuló véges differenciás módszerrel

A [159] alapján.
A 4.9. ábrának megfelelő differenciaegyenletek a

$$\hat{T}^{j+1}_{m+1/2,n+1/2} = T^{j}_{m+1/2,n+1/2} + \Delta\hat{t}\left(\frac{(\hat{q}_x)^j_{m,n+1/2} - (\hat{q}_x)^j_{m+1,n+1/2}}{\Delta\hat{x}} + \frac{(\hat{q}_y)^j_{m+1/2,n} - (\hat{q}_y)^j_{m+1/2,n+1}}{\Delta\hat{y}}\right), \tag{7.58}$$

$$\begin{aligned}(\hat{q}_x)^{j+1}_{m,n+1/2} = \left(1-\frac{\Delta\hat{t}}{\hat{\tau}}\right)(\hat{q}_x)^j_{m,n+1/2} + \frac{\Delta\hat{t}}{\hat{\tau}}\Bigg[&\frac{\hat{T}^j_{m-1/2,n+1/2} - \hat{T}^j_{m+1/2,n+1/2}}{\Delta\hat{x}} + \\ &+ (\hat{\eta}_1+\hat{\eta}_2)\frac{\left(\hat{Q}_{xx}\right)^j_{m+1/2,n+1/2} - \left(\hat{Q}_{xx}\right)^j_{m-1/2,n+1/2}}{\Delta\hat{x}} \\ &+ \hat{\eta}_1\frac{\left(\hat{Q}_{xy}\right)^j_{m,n+1} - \left(\hat{Q}_{xy}\right)^j_{m,n}}{\Delta\hat{y}} + \\ &+ \hat{\eta}_2\frac{\left(\hat{Q}_{yy}\right)^j_{m+1/2,n+1/2} - \left(\hat{Q}_{yy}\right)^j_{m-1/2,n+1/2}}{\Delta\hat{x}}\Bigg],\end{aligned} \tag{7.59}$$

$$\begin{aligned}(\hat{q}_y)^{j+1}_{m+1/2,n} = \left(1-\frac{\Delta\hat{t}}{\hat{\tau}}\right)(\hat{q}_y)^j_{m+1/2,n} + \frac{\Delta\hat{t}}{\hat{\tau}}\Bigg[&\frac{\hat{T}^j_{m+1/2,n-1/2} - \hat{T}^j_{m+1/2,n+1/2}}{\Delta\hat{x}} + \\ &+ (\hat{\eta}_1+\hat{\eta}_2)\frac{\left(\hat{Q}_{yy}\right)^j_{m+1/2,n+1/2} - \left(\hat{Q}_{yy}\right)^j_{m+1/2,n-1/2}}{\Delta\hat{y}} \\ &+ \hat{\eta}_1\frac{\left(\hat{Q}_{yx}\right)^j_{m+1,n} - \left(\hat{Q}_{xy}\right)^j_{m,n}}{\Delta\hat{x}} + \\ &+ \hat{\eta}_2\frac{\left(\hat{Q}_{xx}\right)^j_{m+1/2,n+1/2} - \left(\hat{Q}_{xx}\right)^j_{m+1/2,n-1/2}}{\Delta\hat{y}}\Bigg],\end{aligned} \tag{7.60}$$

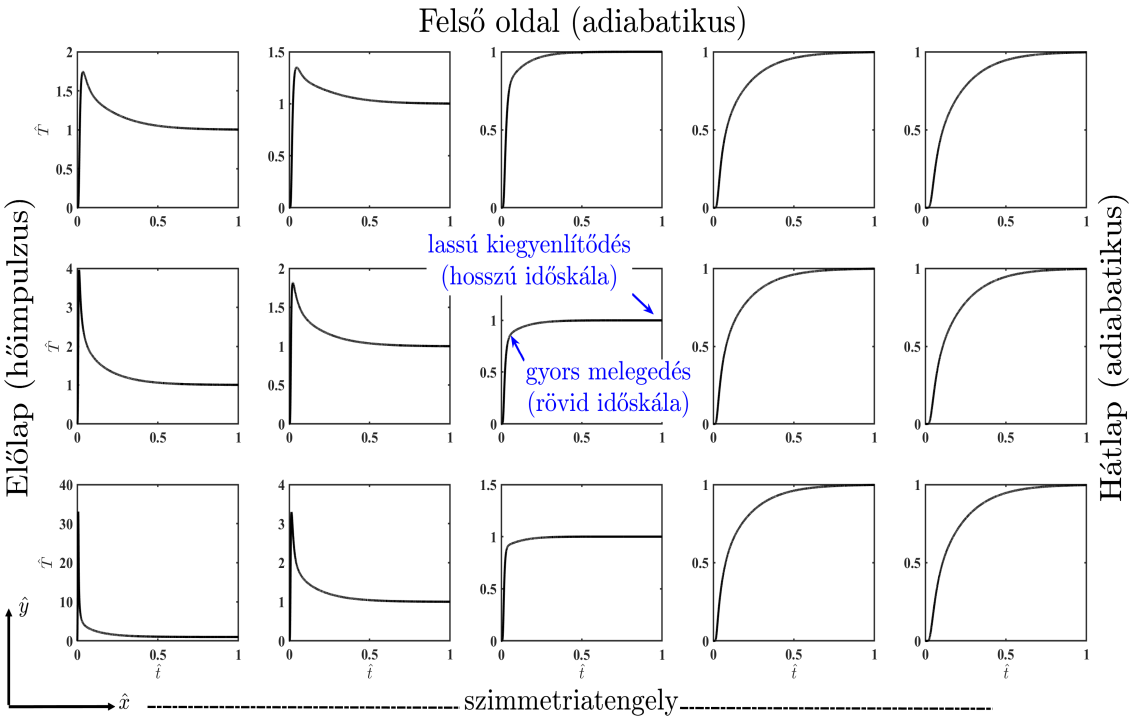
$$\left(\hat{Q}_{xx}\right)^j_{m+1/2,n+1/2} = \frac{(\hat{q}_x)^j_{m+1,n+1/2} - (\hat{q}_x)^j_{m,n+1/2}}{\Delta\hat{x}}, \tag{7.61}$$

$$\left(\hat{Q}_{xy}\right)^j_{m,n} = \frac{(\hat{q}_x)^j_{m,n+1/2} - (\hat{q}_x)^j_{m,n-1/2}}{\Delta\hat{y}}, \tag{7.62}$$

$$\left(\hat{Q}_{yx}\right)^j_{m,n} = \frac{(\hat{q}_y)^j_{m+1/2,n} - (\hat{q}_y)^j_{m-1/2,n}}{\Delta\hat{x}}, \tag{7.63}$$

$$\left(\hat{Q}_{yy}\right)^j_{m+1/2,n+1/2} = \frac{(\hat{q}_y)^j_{m+1/2,n+1} - (\hat{q}_y)^j_{m+1/2,n}}{\Delta\hat{y}}. \tag{7.64}$$

alakot öltik egy alkalmasan választott dimenziótlan skálázással, a felül lévő j index az időbeli, az alul lévő m és n indexek a térbeli léptetést reprezentálják [159], így ez



7.5. ábra. Egy olyan kétdimenziós megoldása a GK-egyenletnek, ahol megfigyelhető az időskálák elválásának méretfüggő jellege [159]. Az ábrán szövegesen jelöltük az egyes peremfeltételeket.

teljes egészében leírja mind az egydimenziós, mind a kétdimenziós feladatokat, és ehhez képest egy háromdimenziós eset tárgyalása már nem ad módszertani többletet. Demonstratív jelleggel, [159] alapján közlök egy olyan kétdimenziós megoldást a GK-egyenletről, amelyben az időskálák szétválásának méretfüggése is megfigyelhető. Ez azt jelenti, hogy ha a hőmérséklet időbeli változását csak fele akkora (x irányú) vastagságnál mérjük, akkor a heterogén anyagokon végzett kísérletekhez hasonlóan megfigyelhetőek a gyors melegedési és a lassú kiegyenlítődési szakaszok, ez az időskálák szétválása. A hátlapon nézve az időskálák már kiátlagolódnak, és ez a fajta szétválás így kísérletileg nem figyelhető meg.

Irodalomjegyzék

[1] I. Farkas, M. J. Lampinen, and K. Ojala. Water flow and binder migration during drying of coated paper. *Drying Technology*, 9(4):1019–1049, 1991.

[2] L. Imre and T. Környey. Computer simulation of salami drying. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 30(4):767–777, 1990.

[3] T. Matolcsi. Közönséges termodinamika. *Scholar Könyvkiadó*, 2012.

[4] L. Musa and W. Riegler. Letter of intent for ALICE 3: A next generation heavy-ion experiment at the LHC. *CERN-LHCC-2022-009; LHCC-I-038*, 2022.

[5] F. Amann, F. Bonsignorio, T. Bulik, H. J. Bulten, S. Cuccuru, A. Dassargues, R. DeSalvo, E. Fenyvesi, F. Fidecaro, I. Fiori, et al. Site-selection criteria for the Einstein Telescope. *Review of Scientific Instruments*, 91(9), 2020.

[6] R. Kovács. Heat equations beyond Fourier: From heat waves to thermal metamaterials. *Physics Reports*, 1048:1–75, 2024.

[7] M. Grmela. Weakly nonlocal hydrodynamics. *Physical Review E*, 47(1):351, 1993.

[8] P. Ván. Weakly nonlocal irreversible thermodynamics – the Guyer-Krumhansl and the Cahn-Hilliard equations. *Physic Letters A*, 290(1-2):88–92, 2001.

[9] G. A. Maugin. On the thermomechanics of continuous media with diffusion and/or weak nonlocality. *Archive of Applied Mechanics*, 75:723–738, 2006.

[10] V. A. Cimmelli. Weakly nonlocal thermodynamics of anisotropic rigid heat conductors revisited. (3):285–309, 2011.

[11] S. R. de Groot and P. Mazur. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications, 1963.

[12] I. Müller and T. Ruggeri. *Rational Extended Thermodynamics*. Springer, 1998.

[13] D. Jou, J. Casas-Vázquez, and G. Lebon. *Extended Irreversible Thermodynamics*. Springer Verlag, Berlin, 2010 (fourth Edition), 2010.

[14] R. Kovács and P. Ván. Generalized heat conduction in heat pulse experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 83:613 – 620, 2015.

[15] L. Tisza. Transport phenomena in Helium II. *Nature*, 141:913, 1938.

[16] L. Landau. Two-fluid model of liquid Helium II. *J. Phys. USSR*, 5:71, 1941.

[17] L. Tisza. The theory of liquid Helium. *Physical Review*, 72(9):838–877, 1947.

[18] T. F. McNelly. Second Sound and Anharmonic Processes in Isotopically Pure Alkali-Halides. 1974. Ph.D. Thesis, Cornell University.

[19] D. D. Joseph and L. Preziosi. Heat waves. *Reviews of Modern Physics*, 61(1):41–86, 1989.

[20] R. J. Donnelly. The two-fluid theory and second sound in liquid Helium. *Physics Today*, 62(10):34–39, 2009.

[21] Alfred Leitner. Liquid helium II, the superfluid. https://www.youtube.com/watch?v=7eZlF6IToQs&t=1952s&ab_channel=BrynnVanscoy. Utolsó megtekintés: 2024. 07. 09.

[22] H. E. Jackson, C. T. Walker, and T. F. McNelly. Second sound in NaF. *Physical Review Letters*, 25(1):26–28, 1970.

[23] A. Berezovski, J. Engelbrecht, and M. Berezovski. Waves in microstructured solids: a unified viewpoint of modelling. *Acta Mechanica*, 220:349–363, 2011.

[24] T. Fülöp, R. Kovács, and P. Ván. Thermodynamic hierarchies of evolution equations. *Proceedings of the Estonian Academy of Sciences*, 64(3):389–395, 2015.

[25] L. Landau. On the theory of superfluidity of Helium II. *Journal of Physics*, 11(1):91–92, 1947.

[26] V. Peshkov. Second sound in Helium II. *J. Phys. (Moscow)*, 381(8), 1944.

[27] W. Dreyer and H. Struchtrup. Heat pulse experiments revisited. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 5:3–50, 1993.

[28] C. T. Lane, H. Fairbank, H. Schultz, and W. Fairbank. " second sound" in liquid Helium II. *Physical Review*, 70(5-6):431, 1946.

[29] K. R. Atkins and D. V. Osborne. The velocity of second sound below 1 K. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 41(321):1078–1081, 1950.

[30] I. Gyarmati. On the wave approach of thermodynamics and some problems of non-linear theories. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 2:233–260, 1977.

[31] R. A. Guyer and J. A. Krumhansl. Dispersion relation for second sound in solids. *Physical Review*, 133(5A):A1411, 1964.

[32] G. Chen. Particularities of heat conduction in nanostructures. *Journal of Nanoparticle Research*, 2:199–204, 2000.

[33] G. Chen. Phonon heat conduction in nanostructures. *International Journal of Thermal Sciences*, 39(4):471–480, 2000.

[34] B. Saha, T. D. Sands, and U. V. Waghmare. First-principles analysis of ZrN/ScN metal/semiconductor superlattices for thermoelectric energy conversion. *Journal of Applied Physics*, 109(8):083717, 2011.

[35] F. X. Alvarez and D. Jou. Size and frequency dependence of effective thermal conductivity in nanosystems. *Journal of Applied Physics*, 103(9):094321, 2008.

[36] B. Saha, Y. R. Koh, J. Comparan, S. Sadasivam, J. L. Schroeder, M. Garbrecht, A. Mohammed, J. Birch, T. Fisher, A. Shakouri, and T. D. Sands. Cross-plane thermal conductivity of (Ti, W) N/(Al, Sc) N metal/semiconductor superlattices. *Physical Review B*, 93(4):045311, 2016.

[37] F. Vázquez, A. Figueroa, and I. Rodriguez-Vargas. Nonlocal and memory effects in nanoscaled thermoelectric layers. *Journal of Applied Physics*, 121(1):014311, 2017.

[38] F. Vázquez, P. Ván, and R. Kovács. Ballistic-diffusive model for heat transport in superlattices and the minimum effective heat conductivity. *Entropy*, 22:167, 2020.

[39] P. K. Schelling, Li Shi, and K. E. Goodson. Managing heat for electronics. *Materials Today*, 8(6):30–35, 2005.

[40] G. Mazza, M. Gandolfi, M. Capone, F. Banfi, and C. Giannetti. Thermal dynamics and electronic temperature waves in layered correlated materials. *Nature Communications*, 12(1):6904, 2021.

[41] A. Greiner, T. Reggiani, L.and Kuhn, and L. Varani. Thermal conductivity and Lorenz number for one-dimensional ballistic transport. *Physical Review Letters*, 78(6):1114, 1997.

[42] B. Gotsmann, A. Gemma, and D. Segal. Quantum phonon transport through channels and molecules—A perspective. *Applied Physics Letters*, 120(16):160503, 2022.

[43] M. Michel, G. Mahler, and J. Gemmer. Fourier's law from Schrödinger dynamics. *Physical Review Letters*, 95(18):180602, 2005.

[44] D. G. Cahill, W. K. Ford, K. E. Goodson, G. D. Mahan, A. Majumdar, H. J. Maris, R. Merlin, and S. R. Phillpot. Nanoscale thermal transport. *Journal of Applied Physics*, 93(2):793–818, 2003.

[45] D. G. Cahill, K. Goodson, and A. Majumdar. Thermometry and thermal transport in micro/nanoscale solid-state devices and structures. *Journal of Heat Transfer*, 124(2):223–241, 2002.

[46] D. Madjarević, T. Ruggeri, and S. Simić. Shock structure and temperature overshoot in macroscopic multi-temperature model of mixtures. *Physics of Fluids*, 26(10):106102, 2014.

[47] T. Ruggeri and M. Sugiyama. *Classical and Relativistic Rational Extended Thermodynamics of Gases*. Springer, 2021.

[48] K. Mitra, S. Kumar, A. Vedevarz, and M. K. Moallemi. Experimental evidence of hyperbolic heat conduction in processed meat. *Journal of Heat Transfer*, 117(3):568–573, 1995.

[49] P. J. Antaki. New interpretation of non-Fourier heat conduction in processed meat. *Journal of Heat Transfer*, 127(2):189–193, 2005.

[50] H. Herwig and K. Beckert. Fourier versus non-Fourier heat conduction in materials with a nonhomogeneous inner structure. *Transactions-American Society of Mechanical Engineers Journal of Heat Transfer*, 122(2):363–364, 2000.

[51] M. Jaunich, S. Raje, K. Kim, K. Mitra, and Z. Guo. Bio-heat transfer analysis during short pulse laser irradiation of tissues. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(23-24):5511–5521, 2008.

[52] Á. Sudár, G. Futaki, and R. Kovács. Continuum modeling perspectives of non-Fourier heat conduction in biological systems. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 46(4):371–381, 2021.

[53] A. Fehér and R. Kovács. On the evaluation of non-Fourier effects in heat pulse experiments. *International Journal of Engineering Science*, 169:103577, 2021.

[54] A. Lunev, A. Lauerer, V. Zborovskii, and F. Léonard. Digital twin of a laser flash experiment helps to assess the thermal performance of metal foams. *International Journal of Thermal Sciences*, 181:107743, 2022.

[55] M. Grmela and H. C. Öttinger. Dynamics and thermodynamics of complex fluids. I. Development of a general formalism. *Physical Review E*, 56(6):6620, 1997.

[56] T. Ruggeri and M. Sugiyama. *Rational extended thermodynamics beyond the monatomic gas*. Springer, 2015.

[57] A. Berezovski and P. Ván. Microinertia and internal variables. *arXiv preprint arXiv:1504.03485*, 2015.

[58] V. Józsa and R. Kovács. *Solving Problems in Thermal Engineering: A Toolbox for Engineers*. Springer, 2020.

[59] G. Lebon. Heat conduction at micro and nanoscales: a review through the prism of extended irreversible thermodynamics. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 39(1):35–59, 2014.

[60] A. Sellitto, I. Carlomagno, and M. Di Domenico. Nonlocal and nonlinear effects in hyperbolic heat transfer in a two-temperature model. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, 72(1):1–15, 2021.

[61] S. L. Sobolev. Nonlocal two-temperature model: Application to heat transport in metals irradiated by ultrashort laser pulses. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 94:138–144, 2016.

[62] Ván Péter. *Nemegyensúlyi termomechanika*. MTA doktori dolgozat, 2018.

[63] M. Szücs, R. Kovács, and S. Simić. Open Mathematical Aspects of Continuum Thermodynamics: Hyperbolicity, Boundaries and Nonlinearities. *Symmetry*, 12:1469, 2020.

[64] T. Matolcsi. *Ordinary Thermodynamics*. Akadémiai Kiadó, 2004.

[65] J. Casas-Vázquez and D. Jou. Nonequilibrium temperature versus local-equilibrium temperature. *Physical Review E*, 49(2):1040, 1994.

[66] V. A. Cimmelli, A. Sellitto, and D. Jou. Nonequilibrium temperatures, heat waves, and nonlinear heat transport equations. *Physical Review B*, 81(5):054301, 2010.

[67] I. Gyarmati. *Non-equilibrium thermodynamics*. Springer, 1970.

[68] P. Ván and R. Kovács. Variational principles and nonequilibrium thermodynamics. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 378:20190178, 2020. arXiv:1908.02679.

[69] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. I. *Physical Review*, 37(4):405, 1931.

[70] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. II. *Physical Review*, 38(12):2265, 1931.

[71] C. Eckart. The thermodynamics of irreversible processes. I. The simple fluid. *Physical Review*, 58(3):267, 1940.

[72] C. Eckart. The thermodynamics of irreversible processes. II. Fluid mixtures. *Physical Review*, 58(3):269, 1940.

[73] R. Kovács. Analytic solution of Guyer-Krumhansl equation for laser flash experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 127:631–636, 2018.

[74] M. Szücs, M. Pavelka, R. Kovács, T. Fülöp, P. Ván, and M. Grmela. A case study of non-Fourier heat conduction using Internal Variables and GENERIC. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 2021.

[75] B. Nyíri. On the entropy current. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 16(2):179–186, 1991.

[76] P. Ván and T. Fülöp. Universality in heat conduction theory – weakly nonlocal thermodynamics. *Annalen der Physik (Berlin)*, 524(8):470–478, 2012.

[77] Gy. Gróf. Notes on using temperature-dependent thermal diffusivity – forgotten rules. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 132:1389–1397, 2018.

[78] J.-L. Auriault. Cattaneo–Vernotte equation versus Fourier thermoelastic hyperbolic heat equation. *International Journal of Engineering Science*, 101:45–49, 2016.

[79] S. M. Davarpanah, P. Ván, and B. Vásárhelyi. Investigation of the relationship between dynamic and static deformation moduli of rocks. *Geomechanics and Geophysics for Geo-Energy and Geo-Resources*, 6:29, 2020.

[80] R. A. Guyer and J. A. Krumhansl. Thermal Conductivity, Second Sound, and Phonon Hydrodynamic Phenomena in Nonmetallic Crystals. *Physical Review*, 148:778–788, 1966.

[81] H. E. Jackson and C. T. Walker. Thermal conductivity, second sound and phonon-phonon interactions in NaF. *Physical Review B*, 3(4):1428–1439, 1971.

[82] A. Fehér, J. Maróti, D. Takács, I. Orbulov, and R. Kovács. Thermal and mechanical properties of alsi7mg matrix syntactic foams reinforced by Al2O3 or SiC particles in matrix. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 226:125446, 2024.

[83] R. Kovács, A. Fehér, and S. Sobolev. On the two-temperature description of heterogeneous materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 194:123021, 2022.

[84] A. Sellitto. Phonon-and electron-temperature waves in a Maxwell-Cattaneo heat-conduction theory. *Journal of Thermal Stresses*, 44(1):1–19, 2020.

[85] D. Y. Tzou. A unified field approach for heat conduction from macro- to micro-scales. *Journal of Heat Transfer*, 117(1):8–16, 1995.

[86] D. Y. Tzou. *Macro- to Micro-scale Heat Transfer: The Lagging Behavior*. CRC Press, 1996.

[87] S. Chiriţă, M. Ciarletta, and V. Tibullo. On the thermomechanical consistency of the time differential dual-phase-lag models of heat conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 114:277–285, 2017.

[88] R. Kovács and P. Ván. Thermodynamical consistency of the Dual Phase Lag heat conduction equation. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, pages 1–8, 2017.

[89] Z. Shomali, R. Kovács, P. Ván, I. V. Kudinov, and J. Ghazanfarian. Lagging heat models in thermodynamics and bioheat transfer: a critical review. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 34(3):637–679, 2022.

[90] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Physics Reports*, 377(1):1–80, 2003.

[91] A. Puglisi, A. Sarracino, and A. Vulpiani. Temperature in and out of equilibrium: A review of concepts, tools and attempts. *Physics Reports*, 2017.

[92] R. Somogyfoki, A. Famá, L. Restuccia, and P. Ván. Thermodynamics and dynamic stability: extended theories of heat conduction. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 50(1):59–76.

[93] 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.

[94] G. Balassa, P. Rogolino, Á. Rieth, and R. Kovács. New perspectives for modelling ballistic-diffusive heat conduction. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 33:2007–2026, 2021.

[95] V. A. Cimmelli and W. Kosiński. Nonequilibrium semi-empirical temperature in materials with thermal relaxation. *Archives of Mechanics*, 43(6):753–767, 1991.

[96] V. A. Cimmelli and W. Kosiński. Evolution hyperbolic equations for heat conduction. *Thermodynamics and Kinetic Theory*, 12:11–22, 1992.

[97] V. Lubarda. On thermodynamic potentials in linear thermoelasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 41(26):7377–7398, 2004.

[98] T. Fülöp. Chapters in thermodynamics. https://energia.bme.hu/~fulop/Fulop_Chapters_in_Thermodynamics_2023-02-28.pdf, 2023. [Utolsó elérés ekkor: 2024. 07. 11.].

[99] R. Kovács, D. Madjarević, S. Simić, and P. Ván. Non-equilibrium theories of rarefied gases: internal variables and extended thermodynamics. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 33:307–325, 2021.

[100] R. Kovács and P. Rogolino. Numerical treatment of nonlinear Fourier and Maxwell-Cattaneo-Vernotte heat transport equations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 150:119281, 2020.

[101] M. Szücs and R. Kovács. Gradient-dependent transport coefficients in the Navier–Stokes–Fourier system. *Theoretical and Applied Mechanics*, 49:123–135, 2022.

[102] R. Kovács. Mathematical aspects of non-Fourier heat equations. *Journal of Computational and Applied Mechanics*, 17(1):1–12, 2022.

[103] A. J. A. Ramos, R. Kovács, M. M. Freitas, and D. S. Almeida Júnior. Mathematical analysis and numerical simulation of the Guyer–Krumhansl heat equation. *Applied Mathematical Modelling*, 115:191–202, 2023.

[104] A. Fehér and R. Kovács. On the dynamic thermal conductivity and diffusivity observed in heat pulse experiments. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 49:161–170, 2024.

[105] A. V. Luikov, A. G. Shashkov, L. L. Vasiliev, and Y. E. Fraiman. Thermal conductivity of porous systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 11(2):117–140, 1968.

[106] D. S. Smith, A. Alzina, J. Bourret, B. Nait-Ali, F. Pennec, N. Tessier-Doyen, K. Otsu, H. Matsubara, P. Elser, and U. T. Gonzenbach. Thermal conductivity of porous materials. *Journal of Materials Research*, 28(17):2260–2272, 2013.

[107] F. Angeles. Hyperbolic systems of quasilinear equations in compressible fluid dynamics with an objective Cattaneo-type extension for the heat flux. *Mechanics Research Communications*, 130:104103, 2023.

[108] T. Matolcsi and P. Ván. Can material time derivative be objective? *Physics Letters A*, 353(2):109–112, 2006.

[109] W. Muschik. Objectivity and frame indifference, revisited. *Archives of Mechanics*, 50(3):541–547, 1998.

[110] E. Pereira. Thermal rectification in classical and quantum systems: Searching for efficient thermal diodes. *Europhysics Letters*, 126(1):14001, 2019.

[111] S. Chen, E. Pereira, and G. Casati. Ingredients for an efficient thermal diode. *Europhysics Letters*, 111(3):30004, 2015.

[112] K. Joulain, J. Drevillon, Y. Ezzahri, and J. Ordonez-Miranda. Quantum thermal transistor. *Physical Review Letters*, 116(20):200601, 2016.

[113] J. Senior, A. Gubaydullin, B. Karimi, J. T. Peltonen, J. Ankerhold, and J. P. Pekola. Heat rectification via a superconducting artificial atom. *Communications Physics*, 3(1):40, 2020.

[114] H.-D. Wang, B.-Y. Cao, and Z.-Y. Guo. Heat flow choking in carbon nanotubes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(9-10):1796–1800, 2010.

[115] A. Sellitto and V. A. Cimmelli. Flux limiters in radial heat transport in silicon nanolayers. *Journal of Heat Transfer*, 136(7):071301, 2014.

[116] C. Dames. Solid-state thermal rectification with existing bulk materials. *Journal of Heat Transfer*, 131(6):061301, 2009.

[117] S. Both, B. Czél, T. Fülöp, Gy. Gróf, Á. Gyenis, R. Kovács, P. Ván, and J. Verhás. Deviation from the Fourier law in room-temperature heat pulse experiments. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 41(1):41–48, 2016.

[118] R. Kovács. *Heat conduction beyond Fourier's law: theoretical predictions and experimental validation [Hővezetés a Fourier-egyenleten túl: elméletek és kísérletek]*. Ph.D. thesis, Budapest University of Technology and Economics [Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem], 2017.

[119] P. Ván, A. Berezovski, T. Fülöp, Gy. Gróf, R. Kovács, Á. Lovas, and J. Verhás. Guyer-Krumhansl-type heat conduction at room temperature. *EPL*, 118(5):50005, 2017. arXiv:1704.00341v1.

[120] I-Shih Liu. Method of Lagrange multipliers for exploitation of the entropy principle. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 46(2):131–148, 1972.

[121] V. A. Cimmelli and P. Ván. The effects of nonlocality on the evolution of higher order fluxes in non-equilibrium thermodynamics. *Journal of Mathematical Physics*, 46(11):112901–15, 2005. cond-mat/0409254.

[122] V. Ciancio, V. A. Cimmelli, and P. Ván. On the evolution of higher order fluxes in non-equilibrium thermodynamics. *Mathematical and Computer Modelling*, 45:126–136, 2007. cond-mat/0407530.

[123] T. Matolcsi. *Spacetime without reference frames*. Akadémiai Kiadó Budapest, 1993.

[124] T. Matolcsi and P. Van. On the objectivity of time derivaties. *Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti-Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali*, 86(S1), 2008.

[125] R. Kovács. Transient non-Fourier behavior of large surface bodies. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 148:107028, 2023.

[126] J. E. Rhodes Jr. The velocity of sound in hydrogen when rotational degrees of freedom fail to be excited. *Physical Review*, 70(11-12):932, 1946.

[127] M. Greenspan. Propagation of sound in five monatomic gases. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 28(4):644–648, 1956.

[128] C. G. Sluijter, H. F. P. Knaap, and J. J. M. Beenakker. Determination of rotational relaxation times of hydrogen isotopes by sound absorption measurements at low temperatures I. *Physica*, 30(4):745–762, 1964.

[129] C. G. Sluijter, H. F. P. Knaap, and J. J. M. Beenakker. Determination of rotational relaxation times of hydrogen isotopes by sound absorption measurements at low temperatures II. *Physica*, 31(6):915–940, 1965.

[130] P. Rogolino, R. Kovács, P. Ván, and V. A. Cimmelli. Generalized heat-transport equations: Parabolic and hyperbolic models. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 30:AiP–14, 2018.

[131] H. Struchtrup. *Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows*. Springer, 2005.

[132] R. Kovács. On the rarefied gas experiments. *Entropy*, 21(7):718, 2019.

[133] A. J. A. Ramos, A. Campelo, M. Freitas, and R. Kovács. Numerical analysis of the Maxwell-Cattaneo-Vernotte nonlinear model. *Journal of Thermal Stresses*, 2024. Közlésre elfogadva.

[134] C. F. Munafò, P. Rogolino, and R. Kovács. Nonlinear thermal analysis of two-dimensional materials with memory. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 219:124847, 2024.

[135] Á. Rieth, R. Kovács, and T. Fülöp. Implicit numerical schemes for generalized heat conduction equations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 126:1177 – 1182, 2018.

[136] B. Tóth, Zs. Molnár, and R. Kovács. Two-field mixed hp-finite elements for time-dependent problems in the refined theories of thermodynamics. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 36:825–838, 2024.

[137] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford: Clarendon Press, 1959, 2nd ed., 1959.

[138] K. Zhukovsky. Violation of the maximum principle and negative solutions for pulse propagation in Guyer–Krumhansl model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 98:523–529, 2016.

[139] A. J. A. Ramos, L. G. R. Miranda, M. M. Freitas, and R. Kovács. Non-negativity and maximum principle: Revisiting the Guyer–Krumhansl heat equation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 211:124288, 2023.

[140] R. Kovács. Analytical treatment of nonhomogeneous initial states for non-Fourier heat equations. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 134:106021, 2022.

[141] A. Moosaie. Non-Fourier heat conduction in a finite medium with arbitrary source term and initial conditions. *Forschung im Ingenieurwesen*, 71(3-4):163–169, 2007.

[142] A. Moosaie. Non-Fourier heat conduction in a finite medium with insulated boundaries and arbitrary initial conditions. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 35(1):103–111, 2008.

[143] NETZSCH GmbH. Laser Flash Apparatus LFA 427. https://analyzing-testing.netzsch.com/_Resources/Persistent/5/c/4/b/5c4b28dfd08afd3a50b6ed6059c3a240b073c69f/LFA_427_en_web_01.pdf. Utolsó megtekintés: 2024. 07. 15.

[144] Gy. I. Gróf. *Homogén és kétrétegű minták hőmérsékletvezetési tényezőjének mérése Flash módszerrel*. Ph.D. dolgozat, 2002.

[145] W. J. Parker, R. J. Jenkins, C. P. Butler, and G. L. Abbott. Flash method of determining thermal diffusivity, heat capacity, and thermal conductivity. *Journal of Applied Physics*, 32(9):1679–1684, 1961.

[146] H. M. James. Some extensions of the flash method of measuring thermal diffusivity. *Journal of Applied Physics*, 51(9):4666–4672, 1980.

[147] A. Philipp, J. F. Eichinger, R. C. Aydin, A. Georgiadis, C. J. Cyron, and M. Retsch. The accuracy of laser flash analysis explored by finite element method and numerical fitting. *Heat and Mass Transfer*, 56:811–823, 2020.

[148] A. Fehér, N. Lukács, L. Somlai, T. Fodor, M. Szücs, T. Fülöp, P. Ván, and R. Kovács. Size effects and beyond-Fourier heat conduction in room-temperature experiments. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 46:403–411, 2021.

[149] Gregory T. von Nessi. *Analytic Methods in Partial Differential Equations*. 2011.

[150] S. Kakaç, Y. Yener, and C. P. Naveira-Cotta. *Heat Conduction*. CRC press, 2018.

[151] T. Fülöp, R. Kovács, M. Szücs, and M. Fawaier. Thermodynamical extension of a symplectic numerical scheme with half space and time shifts demonstrated on rheological waves in solids. *Entropy*, 22:155, 2020.

[152] Á. Pozsár, M. Szücs, R. Kovács, and T. Fülöp. Four spacetime dimensional simulation of rheological waves in solids and the merits of thermodynamics. *Entropy*, 22(12):1376, 2020.

[153] D. Takács, Á. Pozsár, and T. Fülöp. Thermodynamically extended symplectic numerical simulation of viscoelastic, thermal expansion and heat conduction phenomena in solids. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 36:525–538, 2024.

[154] G. Szépszó, G. Bölöni, A. Horányi, and M. Szűcs. A numerikus időjárási modellek felépítése: tér- és időskála, adatasszimiláció, diszkretizáció, parametrizációk, valószínűségi előrejelzések, éghajlati modellezés. https://nimbus.elte.hu/~numelo/Doc/jegyzetek/NumerikusModellezes.pdf, 2013. Utolsó megtekintés: 2024. 07. 15.

[155] P. Rogolino and V. A. Cimmelli. Differential consequences of balance laws in extended irreversible thermodynamics of rigid heat conductors. *Proceedings of the Royal Society A*, 475(2221):20180482, 2019.

[156] W. H. Press. *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge University Press, 2007.

[157] A. Sellitto, F. X. Alvarez, and D. Jou. Second law of thermodynamics and phonon-boundary conditions in nanowires. *Journal of Applied Physics*, 107(6), 2010.

[158] Inc. COMSOL. https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method, 2017. Utolsó megtekintés: 2024. 07. 20.

[159] M. Szücs, C. F. Munafo, and R. Kovács. Investigating the whirling heat current density in the Guyer–Krumhansl equation. 2024. Bírálat alatt, arXiv:2405.09199.

[160] J. Tur-Prats, M. Gutiérrez-Pérez, J. Bafaluy, J. Camacho, F. X. Alvarez, and A. Beardo. Microscopic origin of heat vorticity in quasi-ballistic phonon transport. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 226:125464, 2024.

[161] J. Weickert, B. M. T. H. Romeny, and M. A. Viergever. Efficient and reliable schemes for nonlinear diffusion filtering. *IEEE Transactions on Image Processing*, 7(3):398–410, 1998.

[162] E. I. Jury. Inners and Stability of Dynamic systems. 1974.

[163] V. Boggarapu, R. Gujjala, S. Ojha, S. Acharya, P. Venkateswara Babu, S. Chowdary, and D. Kumar Gara. State of the art in functionally graded materials. *Composite Structures*, 262:113596, 2021.

[164] J. K. Wang, J.and Carson, M. F. North, and D. J. Cleland. A new approach to modelling the effective thermal conductivity of heterogeneous materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(17-18):3075–3083, 2006.

[165] A. Giraud, C. Gruescu, D. P. Do, F. Homand, and D. Kondo. Effective thermal conductivity of transversely isotropic media with arbitrary oriented ellipsoidal inhomogeneities. *International Journal of Solids and Structures*, 44(9):2627–2647, 2007.

[166] Y. Benveniste and T. Miloh. On the effective thermal conductivity of coated short-fiber composites. *Journal of Applied Physics*, 69(3):1337–1344, 1991.

[167] R. Shirzadkhani, S. Eskandari, and S. Akbarzadeh. Non-Fourier thermal wave in 2D cellular metamaterials: From transient heat propagation to harmonic band gaps. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 205:123917, 2023.

[168] A. Fehér, R. Kovács, Á. Sudár, and G. G. Barnaföld. Challenges in the thermal modeling of highly porous carbon foams. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 149:3605–3616, 2024.

[169] Kovács L., Mészáros E., Deák F., Somodi G., Máté K., Jakab A. (Kőmérő Kft.), Vásárhelyi B. (Vásárhelyi és Társa Kft.), Geiger J. (SZTE), Dankó Gy., Korpai F., Mező Gy., Darvas K. (Golder Zrt.), Ván P., Fülöp T., and Asszonyi Cs. (Montavid Termodinamikai Kutatócsoport). A Geotechnikai Értelmező Jelentés (GÉJ) felülvizsgálata és kiterjesztése. Technical report, 2012. Kézirat – Kőmérő Kft. Pécs, RHK Kft. Irattár, RHK-K-032/12.

[170] J. Stránskỳ, J. Vorel, J. Zeman, and M. Šejnoha. Mori-Tanaka based estimates of effective thermal conductivity of various engineering materials. *Micromachines*, 2(2):129–149, 2011.

[171] S. Yang, J. Wang, G. Dai, F. Yang, and J. Huang. Controlling macroscopic heat transfer with thermal metamaterials: theory, experiment and application. *Physics Reports*, 908:1–65, 2021.

[172] T. Feczkó, L. Trif, and D. Horák. Latent heat storage by silica-coated polymer beads containing organic phase change materials. *Solar Energy*, 132:405–414, 2016.

[173] B. Németh, Á. S. Németh, A. Ujhidy, J. Tóth, L. Trif, J. Gyenis, and T. Feczkó. Fully bio-originated latent heat storing calcium alginate microcapsules with high coconut oil loading. *Solar Energy*, 170:314–322, 2018.

[174] B. Németh, A. Ujhidy, J. Toth, J. Gyenis, and T. Feczko. Testing of microencapsulated phase-change heat storage in experimental model houses under winter weather conditions. *Building and Environment*, 204:108119, 2021.

[175] J. E. Maróti and I. N. Orbulov. Részecskeerősítésű, alumíniumötvözet mátrixú szintaktikus fémhabok mechanikai tulajdonságai. *Bányászati és Kohászati Lapok*, 156(4):2–8, 2023.

[176] J. E. Maróti and I. N. Orbulov. Characteristic compressive properties of AlSi7Mg matrix syntactic foams reinforced by Al2O3 or SiC particles in the matrix. *Materials Science and Engineering: A*, 869:144817, 2023.

[177] D. Károly, J. E. Maróti, J. Lolbert-Szabó, A. Kemény, and I. N. Orbulov. Production of syntactic metal foams reinforced in the matrix material. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, volume 1246, page 012014. IOP Publishing, 2022.

[178] E. Sadeghi, S. Hsieh, and M. Bahrami. Thermal conductivity and contact resistance of metal foams. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 44(12):125406, 2011.

[179] M. Mager and On behalf of the ALICE Collaboration. ALPIDE, the Monolithic Active Pixel Sensor for the ALICE ITS upgrade. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 824:434–438, 2016.

[180] Á. Sudár. *Investigating the temperature distribution of a hadron-tracking calorimeter*. Student research project, Budapest University of Technology and Economics, 2019. Supervisor: Róbert Kovács; consultant: Mónika Varga-Kőfaragó.

[181] Á. Sudár. *Measurement of the temperature distribution inside a calorimeter*. Final project, Budapest University of Technology and Economics, 2019. Supervisor: Róbert Kovács; consultant: Mónika Varga-Kőfaragó.

[182] M. F. Ashby. The properties of foams and lattices. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 364(1838):15–30, 2006.

[183] B. Isaac. *Thermo-mechanical characterisation of low density carbon foams and composite materials for the ATLAS upgrade*. Ph.D. thesis., University of Glasgow, 2011.

[184] X.-W. Liu, T.-J. Sun, J.-L. Hu, and S.-D. Wang. Composites of metal–organic frameworks and carbon-based materials: preparations, functionalities and applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 4(10):3584–3616, 2016.

[185] H.-C. Zhou and S. Kitagawa. Metal–organic frameworks (MOFs). *Chemical Society Reviews*, 43(16):5415–5418, 2014.

[186] Q.-L. Zhu and Q. Xu. Metal–organic framework composites. *Chemical Society Reviews*, 43(16):5468–5512, 2014.

[187] S. L. James. Metal-organic frameworks. *Chemical Society Reviews*, 32(5):276–288, 2003.

[188] O. K. Farha, I. Eryazici, N. C. Jeong, B. G. Hauser, C. E. Wilmer, A. A. Sarjeant, R. Q. Snurr, S. T. Nguyen, A. Ö. Yazaydın, and J. T. Hupp. Metal–Organic Framework Materials with Ultrahigh Surface Areas: Is the Sky the Limit? *Journal of the American Chemical Society*, 134(36):15016–15021, 2012.

[189] A. Domán and K. László. Fémorganikus térháló – nanostrukturált szén kompozitok. *Magyar Kémiai Folyóirat - Kémiai Közlemények*, 127(1):15–20, 2021.

[190] M. Gál, S. K. S. Andrade, A. Fehér, A. Farkas, J. Madarász, L. Horváth, P. Gordon, R. Kovács, and K. László. Thermal diffusity in copper benzene-1, 3, 5-tricarboxylate–reduced graphite oxide mechanical composites. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, pages 1–13, 2024.

[191] A. Domán, J. Madarász, Gy. Sáfrán, Y. Wang, and K. László. Copper benzene-1, 3, 5-tricarboxylate (HKUST-1)–graphene oxide pellets for methane adsorption. *Microporous and Mesoporous Materials*, 316:110948, 2021.

[192] Cs. Farkas, L. Gál, A. Csiszár, V. Grennerat, P.-O. Jeannin, P. Xavier, D. Rigler, O. Krammer, Z. Plachy, K. Dusek, R. Kovács, A. Fehér, and A. Géczy. Sustainable printed circuit board substrates based on flame-retarded PLA/flax composites to reduce environmental load of electronics: Quality, reliability, degradation and application tests. *Sustainable Materials and Technologies*, 40:e00902, 2024.

[193] A. Géczy, A. Csiszár, P. Xavier, N. Corrao, D. Rauly, R. Kovács, A. Fehér, E. Rozs, and L. Gál. Thermal and RF characterization of novel PLA/Flax based biodegradable printed circuit boards. In *2022 IEEE 24th Electronics Packaging Technology Conference (EPTC)*, pages 329–333. IEEE, 2022.

[194] A. Géczy, D. Piffkó, R. Berényi, K. Dusek, P. Xavier, and D. Cuartielles. Implementation of microcontroller board on a sustainable and degradable PLA/Flax composite substrate: a case study. *Nanotechnology*, 2024. Online First. DOI: 10.1088/1361-6528/ad66d3.

[195] V. Grennerat, G. Z. E. Nashef, A. Sabra, P. Xavier, T. Lacrevaz, N. Corrao, H. Liang, A. Géczy, and N. Chevalier. Exploring PLA/Flax Substrates for Antenna Applications: Assessing Moisture, Temperature and Dielectric

Constant Homogeneity. In *2024 18th European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP)*, pages 1–5, 2024.

[196] I. Hajdu, A. Hamadeh, P. T. Lajter, and A. Géczy. Biodegradable and Water-Soluble DEG1 Substrate for Printed Circuit Board Applications. In *2024 IMAPS Nordic Conference on Microelectronics Packaging (NordPac)*, pages 1–5, 2024.

[197] Saar Drimer. www.eurocircuits.com/blog/fr-4-used-by-many-known-by-few/, Október 2023. Utolsó megtekintés: 2025. 02. 11.

[198] T. Fülöp, R. Kovács, Á. Lovas, Á. Rieth, T. Fodor, M. Szücs, P. Ván, and Gy. Gróf. Emergence of non-Fourier hierarchies. *Entropy*, 20(11):832, 2018.

[199] J. Fourier. *Theorie analytique de la chaleur*. Libraires pour les Mathématiques, l'Artchitecture Hydraulique et la Marine, Rue Jacob, No. 24. Chez Firmin Didot, Père et Fils, 1822.

[200] M. A. Al-Gwaiz. *Sturm-Liouville Theory and its Applications*. Springer, 2008.