

A HŐVEZETÉS KÍSÉRLETI ÉS ELMÉLETI VIZSGÁLATA

OTKA K8116 SZ. PÁLYÁZAT ZÁRÓJELENTÉSE

KIVONAT. A Fourier-egyenlet érvényességi körének behatárolására és az egyenlet általánosítására irányuló kutatásokat végeztünk. Vizsgáltuk az egyenlet ismert kiterjesztéseinek megjelenését szobahőmérsékletű heterogén anyagokban. A kutatás eredményeképpen módszert vezetünk be a lokális egyensúlytól való minimális eltérés jellemzésére és ennek segítségével a hővezetés esetén levezettük az Fourier-egyenlet univerzális általánosítását. Beláttuk, hogy az egyenlet alkalmas a második hang és a ballisztikus hővezetés modellezésére is. A kísérlet és elmélet közötti szoros visszacsatolásnak köszönhetően a pályázati kutatás végén Fourier-től eltérő viselkedést mutattunk ki szobahőmérsékletű heterogén mintában.

1. TERVEK

A Fourier-törvénytől eltérő viselkedést eddig csak nagyon alacsony hőmérsékleten, speciális anyagoknál tapasztaltak. A második hang és a ballisztikus hővezetés esetén is a pontosan megértett mechanizmus és ennek megfelelően előkészített anyagok (ablakfeltétel) jelentették a kísérleti megfigyelés alapját. Szobahőmérsékletű és heterogén szerkezetű anyagoknál a 90-es években számos publikáció jelezte, hogy észlelte a második hangot, azonban ezeknek a méréseknek reprodukálására irányuló kutatások eredményei ellentmondásosak (van akinek sikerült, van akinek nem és van aki más relaxációs időket mért). A hővezetés elméletében a Fourier-egyenletet több különféle független hipotézisrendszerrel többféle elmélet általánosította. Ezek közül a legkövetkezetesebb a kinetikus elméletet alapul vevő Kiterjesztett Termodinamika. Azonban a méréseknél tapasztalt ballisztikus hővezetést, azaz a hang terjedési sebességével terjedő hőt, ezek az elméletek nem reprodukálják megfelelően: a második hang leírásához elegendő egyetlen vektoriális mező a hőmérsékleten túl, a ballisztikus hővezetés kvantitatívan csak aszimptotikusan modellezhető, gyakorlatilag kb. 30 db egyre növekvő tenzori rendű változó bevezetésével kapjuk meg a kísérletekben megfigyelt terjedési sebességet!

A kutatásunk kiindulópontja az volt, hogy a nemegyensúlyi termodinamika általunk kidolgozott új módszerei a lokális egyensúly meghaladására [Ván, 2001, Ván, 2005] és az anyagi objektivitás Noll-féle hipotézisének megjavítására [Matolcsi and Ván, 2006] a hővezetés példáján jól kipróbálhatóak. Elméletileg lehetséges lehet használhatóbb, kevesebb változót tartalmazó kontinuum modell felállítása. Kísérleti oldalról pedig elképzelhetőnek tartottuk, hogy a mérésekben a második hangot magasabb rendű disszipatív hatások elnyomhatják, azaz nem a Cattaneo-Vernotte egyenletet, hanem annak valamilyen általánosítását kell figyelembe vennünk a mérések kiértékelésekor. Ilyen természetű kutatásokhoz természetesen elengedhetetlenek a saját kísérletek, és kísérletezésben a megfelelő jártasság,

hogy minden paramétert és feltételt világosan kézben tartsunk, illetve fordítva, a kísérleti eredmények elméleti útmutatást is adhatnak.

A kutatások kezdetétől sejthető volt, és az első év után pedig világosan látszott, hogy a legnagyobb kihívást és a kutatás sikerességének mértékét elméleti oldalról a ballisztikus hővezetés egyszerű magyarázata jelentheti, kísérleti oldalról pedig a Fourier-törvénytől eltérő hővezetés mérése szobahőmérsékletű, heterogén anyagokban [43].

2. ELVÉGZETT VIZSGÁLATOK

A hővezetés és a mechanikai hatások kapcsolatának megértése a Fourier-egyenleten túlmutatató hővezetési jelenségek kulcsa. Ráadásul három független szempontból is fontos:

- Egyrészt kérdéses a hőtágulás szerepe hangsebességgel terjedő hőimpulzusokban.
- Másrészt a kinetikus elmélet szerint az impulzuseloszlás második centrális momentuma a mechanikai feszültség (pl. [Müller and Ruggeri, 1998]), és az erre vonatkozó evolúciós egyenlet módosítja a hővezetést is.
- Harmadrészt pedig relativisztikusan nincs objektív (vonatkoztatási rendszertől független) energia, csak energia-impulzus. Tehát a termikus és mechanikai hatások objektívan szétválaszthatatlanok.

De nemrelativisztikusan is a kontinuummechanika és a kinetikus elmélet összehangolását megnehezítő legfontosabb kérdés az anyagi objektivitás elve: kontinuumoknál alapelv, a kinetikus elmélet elveti. A nemegyensúlyi termodinamika viszont mindkét elmélettel összhangban kell legyen. A hővezetés általánosítása elméleti szempontból tehát egy sokrétű vizsgálatokat megkövetelő feladat.

Ezért kutatások során az alábbi négy szempont összehangolásán dolgoztunk:

- (1) *Nemegyensúlyi termodinamika.* Itt Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenletet a lokális egyensúly kiterjesztéseként vezetjük le [Gyarmati, 1977]. Ez termodinamikai oldalról egy belső változós elmélet, kinetikus elméletből eredő további korrekciója, a Guyer-Krumhansl-egyenlet pedig gyengén nemlokális. Ezért kutatásainkban belső változós gyengén nemlokális elméletet vizsgáltunk és az energiamérleg és impulzusmérleg módosításai, azaz a mechanika és termodinamika kapcsolata állt a kutatásunk középpontjában [4,5,10,15,18,24,25,28,29,31,33,34,36,37,39,40,41,42].
- (2) *Galilei-relativisztikus objektivitás.* Itt egyrészt a nemrelativisztikus kontinuummechanikában vizsgáltuk a vonatkoztatási rendszertől való függetlenség követelményét, elsősorban a deformáció és a képlékenység kinematikai alapmennyiségeire vonatkozóan és azután ennek következményeit elemeztük képlékenység, hőtágulás, reológiai hatások és hővezetés esetén [3,5,9,16,24,25,37,39,43].
- (3) *Speciális relativisztikus hővezetés.* Objektív, vonatkoztatási rendszertől független elméletet relativisztikusan érdemes vizsgálni. Ráadásul ebből a szempontból a hővezetés kitüntetett szerepet játszik, mert speciális relativisztikusan stabilitási okok miatt úgy gondolják, hogy csak Maxwell-Cattaneo-Vernotte típusú hővezetés van (ez az Israel-Stewart elmélet). Itt stabilitási

kérdéseket és kinetikus elmélettel történő összhangot vizsgáltuk termodinamikai szempontból [11,17,35,43].

- (4) *A kinetikus elmélet és statisztikus fizika.* Itt elsősorban a nemadditív fizikai mennyiségeket és ezzel kapcsolatban a nulladik főtétel szerepét néztük a hőmérséklet értelmezésével kapcsolatban [7,11,12,20,30,35,38,43].

A kísérleti oldalról dolgoztunk a mérési és kiértékelési módszerek fejlesztésén. A neurális hálózat alapú kiértékelési módszerünket adaptáltuk a hővezetés inverz problémájára. Például a lézerimpulzus módszer pontosítását végeztük a kontakt hőellenállás, többrétegű minták, stb. szerepének vizsgálatával, szem előtt tartva a lehetséges eltéréseket a Fourier-elmélettől [1,2,6,8,13,14,21,22,23,32]. Ezen kívül rendszeresen beszámoltunk az Fourier-egyenleten túli hővezetés keresésének irányában elvégzett kísérletekről is [10,27].

Áttekintő (review) munkákat is publikálunk [19,26,31,41,42].

3. LEGFONTOSABB EREDMÉNYEK

3.1. A hővezetés univerzális egyenletei [10,18,40,41]. A lokális egyensúlytól való eltérést az entrópiasűrűségben és az entrópia áramsűrűségben belső változókkal, illetve áramsorzókkal jellemezve módszertadtunk meg a hővezetés Fourier-törvényének általánosítására és levezettük az általános egyenletet másodrendig. A levezetés csak a második főtételre alapul, tehát a kapott egyenletek univerzálisak. Az elsőrendű egyenlet tartalmazza a Maxwell-Cattaneo-Vernotte, Jeffreys-típusú, Green-Naghdi és Guyer-Krumhansl egyenleteket speciális esetként [10]. A q hőáramsűrűségre vonatkozóan egy térdimenzióra a következőképpen néz ki:

$$m_2 l_1 \partial_t q + k_1 l_1 q - K \partial_{xx} q - m_2 k_2 \partial_{xt} q = k_1 \partial_x \frac{1}{T} + m_2 \partial_{xt} \frac{1}{T}.$$

Itt m_1, m_2, k_1, k_2, K a második főtétel miatt nemnegatív anyagi paramétereket jelölnek, $K = k_1 k_2 - k_{12} k_{21}$, továbbá

- zöld jelöli az eredeti Fourier-törvényt,
- piros szín jelöli a Jeffreys típusú egyenletet,
- kék jelöli a Guyer-Krumhansl tagot.

A másodrendű kiterjesztéssel a ballisztikus hővezetés is leírható [18]. Az egyenletek megoldására numerikus módszert dolgoztunk ki.

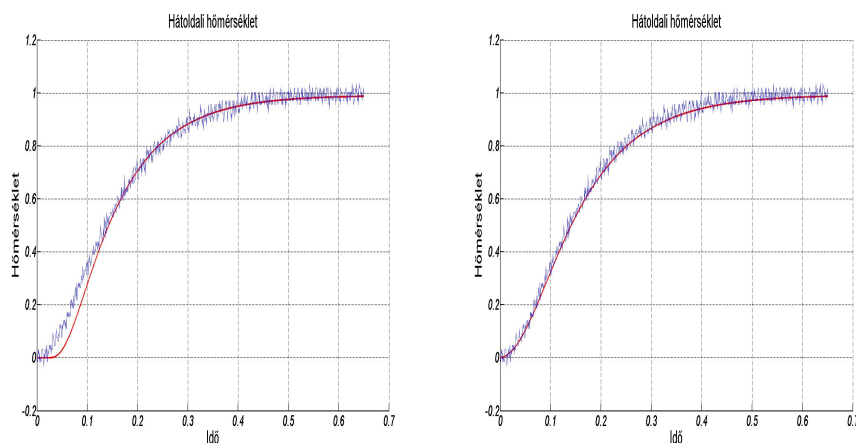
3.2. A szilárd anyagok reológiai alapmodellje és az általánosított kontinuumok termodinamikai elmélete [4,15,24,28,29,34,37,39]. A belső változók segítségével a szilárd anyagok képlékeny és reológiai tulajdonságait vizsgáltuk. Egyetlen belső változó esetén megkaptuk a termodinamikailag konzisztens minimális anyagmodellt [28], illetve duális belső változók segítségével megadtuk az általánosított kontinuumok termodinamikai elméletét szimmetrikus másodrendű tenzor belső változókra, a mikrodeformációs esetben [34]. Ez különbözik az ismert Mindlin illetve az Eringen-Suhubi elmélettől (a disszipációs részében).

3.3. Objektív deformálódás [3,9,16,24,25,37]. Pontos téridő modell felhasználásával megadtuk az alakváltozás és deformáció vonatkoztatási rendszertől független fogalmát [16]. Ez a fogalom egyértelmű, erősebb követelményeknek tesz eleget, mint a Noll-féle szokásos objektivitás és általában evolúciós egyenlettel határozza

meg a képlékenyedést és deformálódást. A következmények feldolgozásaként hőtágulási, képlékenyedési és reológiai változásokat mutató kísérleteket modelleztünk.

3.4. A Fourier törvénytől eltérő hővezetési jelenségek kísérleti kimutatása szobahőmérsékleten. A Fourier törvénytől eltérő szobahőmérsékletű hővezetési jelenségeket kezdetben a hagyományos módon, kis relaxációs idejű folyamatok mérésével véltük megtalálni, a Maxwell-Cattanao-Vernotte egyenletre jellemző kvalitatív hatások keresésével. Ezért egy érzékeny lézeres berendezést terveztünk fejleszteni. Azonban az univerzális hővezetési egyenlet, illetve a nemegyensúlyi termodinamikai módszertan arra utalt, hogy ezek az effektusok könnyen elnyomhatóak, illetve, hogy várhatóan nem a nagy érzékenység, hanem az egyenlet együtthatóinak kísérleti meghatározása és változtatása lehet az észlelés kulcsa. Ezért, (illetve a kísérletekre szánt támogatás késedelmes kifizetése miatt: lásd pénzügyi jelentés) többféle egyszerűbb kísérletet terveztünk. Kezdetben részben megismételtük, illetve variáltuk az irodalomból ismert szemcsés anyagokra illetve heterogén biológiai mintákra vonatkozó egyszerű kísérleteket [10], majd megcsináltuk a pontosabb "könyv kísérletet" transzverzálisan izotróp módon heterogén anyagokra [27]. Ennek a mérésnek a kiértékelése során kidolgozott numerikus eljárás megmutatta, hogy az általánosított egyenlet hierarchikus szerkezete már a Guyer-Krumhansl egyenlet esetén is új kvalitatív effektusokat eredményezhet [21,27]. Ezek után a saját fejlesztésű hőimpulzus készülékkel vizsgáltunk számos preparátumot illetve többféle mechanizmust. A pályázat eredeti futamidejét egy évvel meghosszabítottuk, hogy a tervezett méréseket elvégezhessük.

A pályázat lezárását közvetlenül megelőzően 2015. január 29-én, laterálisan izotróp polisztirol-aluminium mintán mért hőmérséklet adatok részleges kiértékelését mutatja az 1. ábra. Azóta ellenőrzött és többször megismételt mérések szerint szignifikáns az eltérés a Fourier-egyenlettel. A mérések ellenőrzését és a kutatást folytatjuk.



1. ábra. Hőimpulzus mérés hőmérséklet adatai az idő függvényében balra a Fourier-egyenlettel, jobbra a Guyer-Krumhansl-egyenlettel illesztve.

Összességében az eredetileg kitűzött céljainkat teljesítettük. A ballisztikus hővezetést megfelelően modellező elméletünk van és Fourier-féle hővezetéstől eltérést

mértünk szobahőmérsékleten. Ezeknek az eredményeknek a további ellenőrzése, publikálása, további következményeinek kimunkálása és alkalmazási területeinek felderítése terveink között szerepel.

4. SZEMÉLYI FELTÉTELEK

A konzorciális kutatásban BME Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszékének részéről Gróf Gyula és Czél Balázs (utóbbi 2010-ben doktorált hővezetésből, Gróf Gyula témavezetésével [1]) optimális tapasztalati háttérrel rendelkeztek. A kutatás elméleti oldalán az MTA Részecske és Magfizikai Kutató Intézetében, illetve később a Wigner Fizikai Kutatóközpontban Verhás József és Ván Péter nemegyensúlyi termodinamikai ismeretei jelentették a kiindulópontot. A pályázat alkalmazásában Fülöp Tamás itt kapcsolódott be az elméleti munkába, téridő és statisztikus fizikai ismeretekkel. Czél Balázs 2013-ban távozott a BME-ről, új munkahelyén csökkent a kutatásokra fordítható ideje, illetve Fülöp Tamás kilépett a Wigner FK és pályázatunk alkalmazásából, és új munkahelyén csökkent az ilyen irányú kutatásokra fordítható munkaideje (Új munkahelye a konzorciumi partner BME EGR Tanszék!). A kieső kutatási időt hallgatók bevonásával pótoltuk (Ács Gergely, Antali Máté, Both Soma, Kovács Róbert). Különösen Kovács Róbert kapcsolódott be eredményesen a kutatómunkába.

Összességében a humán erőforrásokat tekintve a kutatásra fordított FTE értékek a tervezettnek megfelelően alakultak.

5. TÁMOGATÁS FELHASZNÁLÁSA

A támogatási összeget a Wigner FK részéről a terveknek megfelelően maradéktalanul felhasználtuk. Fülöp Tamás kilépése után felszabaduló bérösszeget hallgatói alkalmazásokra fordítottuk.

A BME, Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszéken a beruházási főösszeget nem lézerberendezésre fordítottuk, részben a fentebb említett kutatási stratégia megváltozása miatt (nem a kis relaxációs idő megmérése a kulcs) illetve azért sem, mert a tanszék más forrásból beszerzett megfelelő lézereket, amelyekkel végül nem végeztünk értékelhető kísérleteket.

A maradványösszeget visszautaltuk.

6. PUBLIKÁCIÓS ADATOK

Az Otká K81161-es pályázat által támogatott kutatómunkát 25 folyóiratcikkkben, 18 konferenciakikkkben, 11 könyvfejezetben, 1 PhD disszertációban, 1 diplomamunkában és 2 egyéb (publikálatlan) közleményben tettük közzé. (ebből kevesebbet tartalmaz a záró publikációk listája, az folyóiratban utóbb leközölt konferenciakikkek kiküszöbölése miatt).

HIVATKOZÁSOK

- [Gyarmati, 1977] Gyarmati, I. (1977). The wave approach of thermodynamics and some problems of non-linear theories. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 2:233–260.
- [Matolcsi and Ván, 2006] Matolcsi, T. and Ván, P. (2006). Can material time derivative be objective? *Physics Letters A*, 353:109–112. math-ph/0510037.
- [Müller and Ruggeri, 1998] Müller, I. and Ruggeri, T. (1998). *Rational Extended Thermodynamics*, volume 37 of *Springer Tracts in Natural Philosophy*. Springer Verlag, New York-etc., 2nd edition.

- [Ván, 2001] Ván, P. (2001). Weakly nonlocal irreversible thermodynamics – the Guyer-Krumhansl and the Cahn-Hilliard equations. *Physics Letters A*, 290(1-2):88–92. (cond-mat/0106568).
- [Ván, 2005] Ván, P. (2005). Exploiting the Second Law in weakly nonlocal continuum physics. *Periodica Polytechnica, Ser. Mechanical Engineering*, 49(1):79–94. (cond-mat/0210402/ver3).