

Tudományos Diákköri Dolgozat

Hővezetés egyenleteinek elmélete, numerikus vizsgálata és kísérleti ellenőrzése

Szerző: Kovács Róbert
Konzulens: Dr. Ván Péter

2014. október 31.

Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Tartalomjegyzék

Ajánlás	ii
1. fejezet. Bevezetés	iii
2. fejezet. A hővezetési egyenletek általánosítása	1
2.1. Memória és nemlokális hatások	1
2.2. A hővezetési elmélet általánosítása, a hierarchikus rendszer	2
2.3. A hővezetés kinetikus elmélete	5
2.4. Az egyenletek skálafüggetlensége	8
3. fejezet. Parciális differenciálegyenletek	11
3.1. Hiperbolicitás	11
3.2. Diszperziós reláció	13
4. fejezet. A lézerimpulzus kísérlet	22
4.1. Kezdeti és peremfeltételek	22
5. fejezet. Numerikus módszer	24
5.1. Diszkretizálás	24
5.2. Konzisztencia	25
5.3. Stabilitásvizsgálat	27
6. fejezet. Megoldások és összehasonlítások	30
6.1. A Fourier-egyenlet megoldásai	30
6.2. A Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenlet megoldásai	31
6.3. A Guyer-Krumhansl-egyenlet megoldásai	32
6.4. A Green-Naghdi-egyenlet megoldásai	33
6.5. A ballisztikus-diffúzív egyenlet megoldásai	35
7. fejezet. Kísérletek	41
7.1. Ballisztikus modellek összehasonlítása a kísérletekkel	41
7.2. További alkalmazások	44
7.3. Az EGR-kísérlet kiértékelése	44
8. fejezet. Összefoglalás	49
9. fejezet. Köszönetnyilvánítás	50
Irodalomjegyzék	51

Ajánlás

Szilágyi-Nagy Zsuzsának

1. FEJEZET

Bevezetés

A technika fejlődésének köszönhetően elkezdődött a mikroszkopikus léptéknél is kisebb „világ” alakítása, ahol a folyamatok karakterisztikus ideje kicsi. Az attoszekundum karakterisztikus idejű lézerek [1] kifejlesztése és alkalmazása (ELI-ALPS nagyberendezés; például az atomi szintű kémiai reakciók követésére használható); a nanotechnológia fejlődése nanomérnököket követel. Ismert, hogy az a leíró elmélet, ami makroszkopikus léptékű jelenséget megfelelően ír le, nem feltétlen - sőt szinte biztosan - nem működik molekuláris léptékű jelenség esetén. Ennek oka, hogy ilyen kis anyagi léptékű vizsgálat esetén nagyon ritkán tételezhetünk fel izotróp tulajdonságokat, a karakterisztikus hosszak nagyon kicsik. A különböző transzport folyamatok leírása más megközelítést igényel.

Ebben a dolgozatban speciálisan a hőterjedésről, mint transzport mechanizmusról lesz szó. Nem tárgya viszont a különböző hőátadási módok (hősugárzás, hőátadás) részletezése és az ezekre való alkalmazása a különböző hővezetési modelleknek. Jóllehet, már több, mint 60 éve kimutatták a második hang létezését szuperfolyékony¹ héliumban [2, 3], ezt a hullámjelenséget ezidáig nem sikerült hétköznapi környezetben, hétköznapi anyagok esetén kimutatni. De ami még fontosabb, azóta sincs egy egységes, mindenki által elfogadott olyan kontinuumelmélet, ami megfelelően írja le a kívánt jelenségeket. A fononok kinetikus elméletéből származtatott momentum sorfejtés egyenletei – bár a legjobb kontinuum modellt adják a ballisztikus hőterjedés leírására – több szempontból sem megfelelőek. A legfontosabb hiányosságuk, hogy a kísérletileg megfigyelt terjedési sebességet csak 30 db növekvő tenzori rendű csatolt egyenlet megoldásával képesek reprodukálni (tehát a legmagasabb rendű egyenlet 30-ad rendű tenzorokra vonatkozik).

A Fourier-egyenlet egyik legfőbb problémája az egyenlet parabolikus volta, mely paradoxonként végtelen sebességű jelterjedéshez vezet [4]. Ennek első módosítása a Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenlet (MCV) volt [5], előnye az egyenlet hiperbolicitása², azaz véges jelterjedési sebessége. Barletta, Zanchini, Dedeurwaerdere és munkatársai felhívják rá a figyelmet, hogy az irreverzibilis termodinamika keretein belül a lokális egyensúlyi leírásban nem kompatibilis, az egyensúlyhoz közeledve csökken az entrópia [6, 7, 8], azonban ezt a problémát a kiterjesztett irreverzibilis termodinamika általánosított entrópia alkalmazásával kiküszöböli [9, 10]. A második hang terjedését bár képes modellezni, de még mindig hiányzik a longitudinális és a transzverzális ballisztikus jelterjedés leírása. Guyer és Krumhansl a Boltzmann-egyenlet linearizálásával származtattak a fononok hidrodinamikai leírására alkalmas egyenletet [11], amellyel megjósolhatóvá vált a második hang megjelenési hőmérséklet tartománya, ez az úgynevezett ablakfeltétel. Tzou az egyszeres fáziskésésű

¹A jelenség rendkívül alacsony hőmérsékleten (1-3 K) jelentkezik, ilyenkor elvben viszkozitás mentes lesz a folyadék. Leírására a kvantummechanikát használják.

²A hiperbolicitás vizsgálatáról és előnyeiről később bővebben szó lesz.

modellt javasolta [12], de ez csak az időtartományra vonatkozott, mint egyfajta memória hatás, és a ballisztikus terjedéshez szükséges térbeli nemlokalitás leírásához ez még nem elegendő. Chen a tranziens Boltzmann-egyenlet közelítésével származtatta a ballisztikus-diffúzív modellt; továbbá részletesen vizsgálta a Fourier-, a MCV- és a Boltzmann-egyenlet viselkedését különböző Knudsen-számok esetén [13]. Ezzel megmutatta, hogy a MCV-egyenlet mesterséges oszcillációt idéz elő a hőáramban, így az nem alkalmas nanostruktúrák modellezésére. Cimmellinek és munkatársainak munkássága a nanorendszerekben jellemző nemegyensúlyi nemlokális fonon transzportra koncentrálódik [14, 15, 16]. Wang és Guo a hőtömeg elmélet alapján származtatták a saját nem-Fourier-egyenletüket [17, 18, 19]. Munkájukat Tolman általános relativitáselméleti megfontolása inspirálta, mely szerint létezik a hő - tömeg dualitás és a hőterjedés szintén rendelkezik tehetetlenséggel [20]. E számos modell sem képes egyértelműen, tisztán leírni a ballisztikus jelterjedést, mivel ez összességében tekintve rendkívül összetett, ennek egyik oka:

- A hőterjedést 3 módus (a terjedés „sajátirányai”) írja le, 1 longitudinális és 2 transzverzális, különböző jelterjedési sebességekkel. Ebből kifolyólag a ballisztikus terjedés anizotróp, azaz irányfüggő. Yanbao Ma itt felhívja a figyelmet arra, hogy sok modellben nem tesznek különbséget ezen módusok között [21].

Landau komplex viszkozitási elmélete [22] alapján Rogers egy olyan fonongáz modellt származtatott [23], amely megtudja magyarázni az első és a második hang közötti természetes átmenetet az alacsony hőmérsékletű lézerimpulzus kísérletek kapcsán. Hátránya, hogy nem tesz különbséget a longitudinális és a transzverzális módusok között. Ma egy hibrid modellt alkalmaz, mely felhasználja a komplex viszkozitást, de mellé egy új fenomenológiai leírást is kidolgozott a longitudinális fonon terjedésre [21, 24]. Az irreverzibilis termodinamikailag konzisztens elméletek eddig a MCV-egyenletet tudták származtatni [25, 10], illetve a Guyer-Krumhansl-egyenletet disszipatív kiterjesztéssel [26, 27]. A ballisztikus jelterjedésnek nincs (eddig nem volt) irreverzibilis termodinamikai elmélete.

A célunk egy egységes modellcsalád bevezetése, melyre csak a termodinamika második főtétele jelent megszorítást, az entrópiaprodukció pozitivitása. Az ebből származtatható, a már eddig ismert modellek összehasonlítása alapján kiválasztjuk azt, amiről úgy gondoljuk, hogy az igazolni kívánt jelenségekört kellőképp és hiteles módon leírja. A megoldások során olyan jellegzetes, karakterisztikus, Fourier-jellegű megoldástól való eltéréseket keresünk, amelyeket kísérleti szempontból makroszkópikus léptékben is meg lehet találni és ki lehet mutatni, azaz támpontként szolgálnak arra nézve, hogy mit és hol keressünk. Az egyenleteket a lézerimpulzus kísérletnek megfelelő peremfeltételek mellett fogjuk tesztelni. Ez a munka a tavalyi TDK dolgozatomban [28] kezdődött, ez annak egy jelentős továbbfejlesztése.

A dolgozat két nagyobb részre tagolható. Az első részben bemutatjuk a leíró keretelméleteket, a modellek származtatását. A dolgozatban kizárólag parciális differenciálegyenletek megoldásáról lesz szó, így az elméleti összefoglalásban röviden a különböző típusokról is szót ejtünk a numerikus problémákra való tekintettel. A matematikai jellegű vizsgálatok szükségesek a gyakorlati problémák megoldásához, a modellek tulajdonságainak részletes feltérképezéséhez, ezért részletesen tárgyaljuk a rendszerre jellemző jelterjedési sebességeket a hiperbolicitás és a diszperziós relációk fejezetekben. A dolgozat második nagy részében a megoldásokat fogjuk tárgyalni, illetve elemezni. Ehhez feltétlen be kell mutatni a kidolgozott numerikus módszert

és kulcsfontosságú lesz az algoritmus stabilitási kérdése. Emellett bizonyítjuk a séma konzisztenciáját, mely a konvergencia és a hibabecslés szempontjából lényeges. Ezután kísérleteket elemzünk, részletesen tárgyaljuk a NaF kísérleteket és az Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszéken végzett méréseket is.

Végezetül a további kutatási lehetőségek összegzésével és az eddigi eredmények összefoglalásával zárjuk a dolgozatot.

2. FEJEZET

A hővezetési egyenletek általánosítása

Az általánosítás célja magasabb rendű mennyiségek bevezetése a konstitutív egyenletekbe. Hogyan is kell ezt érteni? A konstitutív egyenletek az anyagra vonatkozó, annak viselkedését leíró egyenletek, szigorúan anyagi paramétereket és objektív mennyiségeket felhasználva. A fizikai érzékünk is azt sugja, hogy a közeg egy pontjának tulajdonságai függnének a pont környezetétől valamilyen módon, de ezt még nem ismerjük. Továbbá joggal feltételezhetjük azt is, hogy a közeg előlétele is szerepet játszhat. Az előbb felsorolt tulajdonságokat nevezzük térbeli és időbeli nemlokalitásnak. Nézzük ezt kicsit részletesebben.

2.1. Memória és nemlokális hatások

A valóságban egy valamilyen módon – legyen most hőáram-impulzus – gerjesztett közegben a zavarás, azaz a hőmérséklet változása nem végtelen sebességgel terjed. Ezt jól szemlélteti a Fourier-egyenlet példája. A rendszer¹ parabolikus volta (matematikailag kissé pongyolán fogalmazva, egy időderivált hiánya) eredményezi a végtelen jelterjedési sebességet. Makroszkopikus skálán, a mérnöki problémák jelentős hányadában viszont jól alkalmazható elmélet, a rendszer egyszerű, alaposan kidolgozott megoldási módszerek állnak rendelkezésre a megoldásához, és ami a legfontosabb, ilyen lépték esetén kontinuumokra helyes eredményt szolgáltat, mivel a konstitutív egyenletekben megjelenő magasabb rendű (idő- és térderiváltak) tagok egyáltalán nem dominálnak és a hővezetés diffúzív jellege lesz a mérvadó.

Másik fontos szempont a térbeli nemlokalitás. Ahogy már említettem, az elgondolás hasonló, de itt nem időben, hanem térben terjesztjük ki a modellt, azaz a szomszédos pontok állapotait is figyelembe vesszük. Erre többféle módszer is létezik, a három legfontosabb elmélet:

- (1) Belső változók elmélete: új változók bevezetésén alapul.
- (2) Erősen nemlokális elmélet: memóriefunkcionálok és térintegrálokon alapul. Kevésbé elterjedt, mivel nem könnyű használni.
- (3) Gyengén nemlokális elmélet: a klasszikusnál magasabb rendű tér és időderiváltak bevezetésén alapul.

Ezek közül mi az első és a harmadik elmélet egyesítését fogjuk alkalmazni. A következő fejezetet a [9, 25, 29, 30, 31, 27] alapján foglalom össze.

¹Rendszer alatt mindig a belső energia mérlegegyenletét és a konstitutív egyenlet(ek)et értem.

2.2. A hővezetési elmélet általánosítása, a hierarchikus rendszer

Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy az anyag merev és izotróp. A leveztetés során az indexes jelölésmódot alkalmazom az Einstein-féle összegzési konvencióval. A belső energia mérlegegyenletéből indulunk ki:

$$\rho \dot{e} + \partial^i q^i = 0, \quad (1)$$

ahol ρ az anyag sűrűsége, e jelöli a fajlagos belső energiát, konstans fajhő esetén $e = cT$, ahol c és T az izokor fajhő és a hőmérséklet. A ∂^i a térderiváltat jelenti, a q^i pedig a belső energia áramsűrűségének a konduktív része, azaz a hőáram. A pont jelöli a szubsztanciális időderiváltat. A kiindulási feltételünk – miszerint merev közeget vizsgálunk – eredményezi, hogy a szubsztanciális időderivált megegyezik a parciális időderiválttal, valamint az áramsűrűségnek nincs konvektív része.

A klasszikus elmélet kiterjesztéséhez felhasználtunk egy belső változót, méghozzá vektorként. De miért pont vektorként? A belső változók elméletében erre vonatkozólag nincs konkrét kikötés, viszont gondoljuk el, mit is szeretnénk elérni. Kiakarjuk egészíteni a már ismert Fourier-egyenletet. Az egyenlet minden tagja vektoriális, a hőáram vektor mennyiség, a hőmérséklet gradiense szintén vektoriális. Célszerűvé válik a kiterjesztést vektoriális rendben feltételezni. A belső változó további szerepe, hogy egyensúlyban eltűnik, vagyis az egyensúlytól való eltérést mutatja, ezért nevezik még dinamikai szabadságfoknak is [32]. A kiterjesztésnek egy másik módja kerül most bemutatásra.

Az entrópia függvényét másképp definiáljuk, mint [27, 33, 28] irodalmakban; az alábbi megfontolás [34] által egyszerűbb módon érhetjük el a kompatibilitást a kinetikus elmélettel és a kiterjesztett termodinamikával [4, 9]. Ebben az esetben nem használunk vektori belső változót, helyébe a hőáramot helyettesítettük és kvadrátikus az új tagban, azaz a hőáram, mint alapváltozó és nem, mint belső változó jelenik meg a modellben

$$s(e, q^i, Q^{ij}) = \hat{s}(e) - \frac{m_1}{2} q^i q^i - \frac{m_2}{2} Q^{ij} Q^{ij}. \quad (2)$$

Legyen az entrópia áramsűrűsége

$$J^i = B^{ij} q^j + C^{ijk} Q^{jk}. \quad (3)$$

Az első tag már ismert, a második tag most az érdekes; a Q^{ij} a hőáramnál magasabb tenzoriális rendű mennyiség, mint belső változó vezetjük be a modellbe. Figyeljük meg, hogy az egyensúlytól való eltérés minimális, de termodinamikailag kompatibilis [35]. Továbbá azt is vegyük észre, hogy mindig egy tenzoriális renddel magasabb mennyiséggel szorozzuk ezeket az áramokat; a C^{ijk} szerepe is hasonló a B^{ij} -hez, szintén konstitutív függvény. Ez a fajta kiterjesztés vezet a hővezetési egyenletek hierarchikus szerkezetéhez. Helyettesítsünk be az entrópia mérlegegyenletébe

$$\rho \dot{s} + \partial^i J^i = \sigma \geq 0, \quad (4)$$

így megkapjuk az entrópiaprodukciónak egyenlőtlenségét, azaz

$$\begin{aligned} \partial^i q^j \left(B^{ij} - \frac{1}{T} \delta^{ij} \right) &+ B^{ij} (\partial^i q^j) + q^j (\partial^i B^{ij} - m_1 \dot{q}^i) \\ &+ Q^{jk} (\partial^i C^{ijk} - m_2 \dot{Q}^{ij}) + C^{ijk} (\partial^i Q^{jk}) \geq 0. \end{aligned} \quad (5)$$

	Klasszikus	Kiterjesztett	Belső változós I	Belső változós II
Áramok	$\dot{q}^i - \partial^i B^{ij}$	$B^{ij} - \frac{1}{T}\delta^{ij}$	$\dot{Q}^{jk} - \partial^i C^{ijk}$	C^{ijk}
Erők	q^i	$\partial^i q^j - Q^{ij}$	$\partial^j q^k - Q^{jk}$	$\partial^i Q^{jk}$

1. táblázat. A hierarchikus rendszerre jellemző termodinamikai erők és áramok.

Ekkor már definiálhatjuk a termodinamikai erők és áramok közötti kapcsolatokat, az egyenlőségek bal oldalán az áramok, a jobb oldalán az erők vannak:

$$m_1 \dot{q}^i - \partial^i B^{ij} = -l_1 q^i, \quad (6)$$

$$m_2 \dot{Q}^{jk} - \partial^i C^{ijk} = -k_1 Q^{jk} + k_{12} \partial^j q^k, \quad (7)$$

$$B^{ij} - \frac{1}{T} \delta^{ij} = -k_{21} Q^{ij} + k_2 \partial^i q^j, \quad (8)$$

$$C^{ijk} = n \partial^i Q^{jk}. \quad (9)$$

A második főtétel egyenlőtlenségének teljesülése megköveteli az

$$l_1, k_1, k_2, n \geq 0, \quad (10)$$

$$K = k_1 k_2 - k_{12} k_{21} \geq 0 \quad (11)$$

egyenlőtlenségek teljesülését. Egyszerűbb alakot kapunk, ha elimináljuk a B^{ij} és C^{ijk} konstitutív függvényeket, valamint a Q^{ij} tenzoriális belső változót. Ezzel az alábbi egyenlethez jutunk (egy térdimenzióban):

$$\begin{aligned} m_2 \partial_{xt} \frac{1}{T} - n \partial_x^3 \frac{1}{T} + k_1 \partial_x \frac{1}{T} = \\ m_1 m_2 \partial_{tt} q + (m_2 l_1 + m_1 k_1) \partial_t q - (m_2 k_2 + n m_1) \partial_{xxt} q + \\ + n k_2 \partial_x^4 q - (K + n l_1) \partial_{xx} q + k_1 l_1 q. \end{aligned} \quad (12)$$

Az alábbi feltevésekkel a teljes rendszer az alábbi konstitutív egyenletekre redukálható.

- **Fourier-egyenlet:** A legegyszerűbb és a mérnöki alkalmazásokban leginkább elterjedt model; $n = m_1 = m_2 = k_2 = 0$ és $k_{12} = 0$, ezzel kapjuk:

$$l_1 q = \partial_x \frac{1}{T}. \quad (13)$$

A jobb oldalon lévő reciprok hőmérséklet deriválását elvégezve és l_1 -el osztva:

$$q = -\frac{1}{l_1 T^2} \partial_x T, \quad (14)$$

ahol a Fourier-féle hővezetési együtthatóra a $\lambda = \frac{1}{l_1 T^2}$ paraméter megfeleltetés elvégezhető és a továbbiakban is alkalmazható.

- **Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenlet:** A modell validitása nagyon alacsony hőmérsékleten – nagyságrendileg 10 K – történő hővezetés esetén helytálló, mivel képes visszaadni a második hang jelenségét, azaz a hővezetés hullámtermészetét. Az erre vonatkozó javaslatot Gyarmati írta meg [9]. Ha $n = k_2 = m_2 = k_{12} = 0$, akkor adódik, hogy

$$m_1 \partial_t q + l_1 q = \partial_x \frac{1}{T}. \quad (15)$$

Újabb paraméterként a hőáramhoz tartozó relaxációs idő jelenik meg, azaz $\tau_q = \frac{m_1}{l_1}$.

- **Guyer-Krumhansl-egyenlet:** Érdekessége, hogy képes visszaadni a Fourier-egyenlet és a MCV-egyenlet megoldásait is (és az ezekre hasonlító, de alulcsillapított esetet), valamint van a megoldásoknak egy további tartománya – túlszillapított eset – ahol a megoldás jellegzetes; a $n = m_2 = 0$ paraméterekkel származtatható:

$$-K\partial_{xx}q + m_1k_1\partial_tq + k_1l_1q = k_1\partial_x\frac{1}{T}. \quad (16)$$

A K együtthatóra az eddig megismert anyagi paraméterek bevezetése után az $a = \frac{K}{k_1l_1}$ megfeleltetést használjuk és disszipációs együtthatónak fogjuk nevezni.

- **Jeffreys-típusú termodinamikai egyenlet** (vagy duális fáziskésésű modell): $n = m_1 = k_2 = k_{12} = 0$, ekkor

$$m_2l_1\partial_tq + l_1k_1q = k_1\partial_x\frac{1}{T} + m_2\partial_{xt}\frac{1}{T}. \quad (17)$$

Fontos kiemelni, hogy eltérő jelentéssel bír az itt megjelenő relaxációs idő, mint az előző egyenletek esetén, ugyanis a $\tau = \frac{m_2}{k_1}$ megfeleltetés végezhető el, ami nem azonos τ_q -val. A τ jelentésére a kinetikus elméleti leírást bemutató fejezetben térünk rá és a ballisztikus-diffúzív modellben lesz jelentősége. Mi ezzel a konstitutív egyenlettel nem foglalkozunk.

- **Green-Naghdi-egyenlet:** Két féle változata is létezik, az általános és az egyszerű GN-egyenlet. Ami mindkettőre jellemző, hogy szükség van a Casimir-féle reciprocitási relációra. A dolgozatban az egyszerű típust tárgyaljuk, a származtatásához $n = m_2 = l_1 = 0$ szükséges,

$$-K\partial_{xx}q + m_1k_1\partial_tq = k_1\partial_x\frac{1}{T}. \quad (18)$$

Az eddig bevezetett anyagi paraméterek itt is bevezethetők. További érdekesség, hogy reverzibilis esetben – azaz amikor nulla az entrópiaprodukció – eredményezhet hővezetést a klasszikus $J^i = \frac{q^i}{T}$ entrópiaáram forma mellett.

- **Cahn-Hilliard-egyenlet:** $n = m_1 = m_2 = 0$ esetén adódik, hogy

$$k_1l_1q - K\partial_{xx}q = k_1\partial_x\frac{1}{T}. \quad (19)$$

Ezzel az egyenlettel sem foglalkozunk a továbbiakban.

- **Általánosított egyenlet:** ha $n = m_1 = 0$, akkor visszkapjuk [27] szerinti általános egyenletet:

$$m_2l_1\partial_tq - m_2k_2\partial_{xt}q - K\partial_{xx}q + l_1k_1q = k_1\partial_x\frac{1}{T} + m_2\partial_{xt}\frac{1}{T}. \quad (20)$$

- **Ballisztikus-diffúzív egyenlet:** $n = k_2 = 0$ felhasználásával kapjuk. Így az egyenletrendszer

$$m_1\dot{q}^i - \partial^i B^{ij} = -l_1q^i, \quad (21)$$

$$m_2\dot{Q}^{jk} = -k_1Q^{jk} + k_{12}\partial^j q^k, \quad (22)$$

$$B^{ij} - \frac{1}{T}\delta^{ij} = -k_{21}Q^{ij}, \quad (23)$$

valamint a konstitutív egyenlet

$$m_2 \partial_{xt} \frac{1}{T} + k_1 \partial_x \frac{1}{T} = m_1 m_2 \partial_{tt} q + (m_2 l_1 + m_1 k_1) \partial_t q - K \partial_{xx} q + k_1 l_1 q . \quad (24)$$

Ekkor az entrópiaprodukció növekedése megkívánja, hogy $K = -k_{12}k_{21} \geq 0$ is teljesüljön, ami csak úgy lehetséges, ha k_{12} és k_{21} előjele ellentétes. A továbbiakban ezért bevezetjük a $\tilde{k}_{12} = -k_{12} > 0$ jelölést. Ennek a modellnek központi szerepe lesz a dolgozatban.

Ezzel megmutattuk, hogy a [27] irodalomban bevezetett általánosítást teljesen magába foglaló keretelmélet állítottunk fel, de ennél többet is kaptunk. A (6)-(9) rendszer képes a ballisztikus hőterjedési mechanizmus leírására is.

Érdekesség még, hogy a Fourier-egyenletet összesen 3 módon tartalmazza a rendszer [36, 37]:

- A zöld jelöli az eredeti Fourier-egyenletet.
- A piros szín jelöli a Fourier-egyenlet időderiváltját.
- A kék jelöli a Fourier-egyenlet kétszeri térderiváltját.

$$\begin{aligned} & \textcolor{red}{m_2} \partial_{xt} \textcolor{red}{\frac{1}{T}} - n \textcolor{blue}{\partial_x^3} \textcolor{blue}{\frac{1}{T}} + \textcolor{green}{k_1} \partial_x \textcolor{green}{\frac{1}{T}} = \\ & m_1 m_2 \partial_{tt} q + (\textcolor{red}{m_2} \textcolor{red}{l_1} + \textcolor{red}{m_1} \textcolor{red}{k_1}) \partial_t q - (m_2 k_2 + n m_1) \partial_{xtt} q + \\ & + n k_2 \partial_{xx}^4 q - (\textcolor{blue}{K} + n \textcolor{blue}{l_1}) \partial_{xxx} q + \textcolor{green}{k_1} \textcolor{green}{l_1} q . \end{aligned} \quad (25)$$

Fontos megjegyeznünk, hogy a megoldásai során mindig $n = k_2 = 0$ paraméterekkel fogunk dolgozni a lehető legkisebb csillapítás végett. Ez teljesen kizár egy Fourier-jellegű megoldást (kék színűt). Figyeljük meg, hogy a q hőáram második időderiváltjának nincs „párja”, azaz nem szerepel a hőmérsékletek oldalán hozzá tartozó tag. Ez azt jelenti, hogy nem tudjuk tisztán a Fourier-egyenletet reprodukálni, csak közelíteni azzal, ha valamely paraméterek „kicsik” és ezáltal elhanyagolható mértékű lesz a számításokban. Erre a megoldások fejezetben látunk példát. A következő fejezet röviden összefoglalja a ballisztikus energiatranszport kinetikus elméleti leírasmódját, valamint összehasonlítjuk a két modellt.

2.3. A hővezetés kinetikus elmélete

Természetesen más módszerek is léteznek a hővezetési jelenség leírására, ilyenek például a fononok közötti kölcsönhatáson alapuló modellek [4, 38]. Ez a fajta leírás-mód nem követi a kontinuum szemléletet, a statisztikus fizikára alapozva írja le a jelenségeket, mint kvázirészecskék² kölcsönhatása. A hővezetés leírására először egy rugókból és tömegpontokból álló rezgőrendszer modellt dolgoztak ki, azonban ennek egzakt megoldása [40, 22] nem disszipatív és végtelen jelterjedési sebességet ad. Landau [41] Debye és Born munkái alapján felhívja rá a figyelmet, hogy egy kristály rácsbeli atomjainak anharmonikus rezgéseinek a jellegét is figyelembe kell venni a kristály hővezető képességének vizsgálatakor. Ez viszont már nemlineáris rendszer, és végül a szolitonok felfedezéséhez vezetett a hővezetés leírása helyett. Ashcroft és

²A kvázirészecske nem igazi részecske. A fonon, mint ilyen részecske, fontos szerepet játszik a hővezetésben és az elektromos vezetőképesség jelenségének leírásában [39].

Mermin szerint a szigorúan harmonikus kristály végtelen hővezetési tényezővel kellene rendelkezzen és az anharmonikus rezgések azok, melyektől az energiatranszport véges sebességű marad [42].

Fononok között alapvetően kétféle³ kölcsönható folyamatot különböztethetünk meg ([4, 43] alapján összefoglalva).

- Normál (N) jellegű kölcsönhatás: ilyenkor a fononok momentuma megmaradó mennyiség.
- Rezisztív (R) jellegű kölcsönhatás: az N-folyamat ellenéte, ilyenkor a momentum nem konzervatív mennyiség.

Mindkét folyamatban közös, hogy az energia is megmaradó mennyiség. A hővezetési tényező az R-folyamatokhoz kapcsolódik, illetve azok $\frac{1}{\tau_R}$ frekvenciájához, azaz

$$\kappa = \frac{c^2}{3} c_v \tau_R, \quad (26)$$

ahol c a fononok Debye sebessége⁴, c_v az állandó térfogaton mért fajhő, τ_R pedig az R-folyamatok karakterisztikus ideje. Ebben a leírásmódban a Fourier-féle hővezetési törvény akkor alkalmazható, ha lényegesen több R-folyamat van jelen a rendszerben, azaz a diffúzitás dominál. Ezzel ellentétben – ahogy a hőmérsékletet csökkentjük – egyre inkább az N-típusú folyamatok kezdenek dominálni és a hővezetés hullámszerűvé válik (második hang jelensége). Ennek módosítása a MCV-egyenlet [4]:

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} + \frac{c^2}{3} c_v \frac{\partial T}{\partial x_i} = -\frac{1}{\tau_R} Q_i. \quad (27)$$

Viszont még mindig lefedetlen egy harmadik mechanizmus, a ballisztikus fononok általi energiatranszport. Ezek fő jellemzője, hogy a fononok mindenféle interakció nélkül jutnak keresztül a kristályon. Ezzel kapcsolatos legismertebb kísérletek Jackson, Walker és McNelly [44, 45] nevéhez köthetők (2.1. ábra).

Az említett kísérletekben nagyon alacsony, 10-15 K körüli NaF-ot használtak, ilyenkor már a disszipációk nagyon kis mértékben vannak jelen, bemutathatóvá válik a hőterjedés hullámtermészete.

Az 2.1. ábrán T betű jelöli a transzverzális ballisztikus fononok észlelésének idejét. Ezt a jelenséget a kinetikus elmélet a fonongáz modellezésével írja le az alábbi módon. Külön kell definiálni az R- és az N-folyamatokra is a fázissűrűséget⁵. A rezisztív folyamatok f_R eloszláshoz, míg a normál folyamatok f_N eloszláshoz tartanak:

$$f_R = \frac{y}{\exp\left(\frac{hck}{k_B T}\right) - 1}, \quad (28)$$

$$f_N = \frac{y}{\exp\left\{\frac{hck}{k_B T} \left(1 - \frac{3}{4} \frac{cp_i n_i}{aT^4}\right)\right\} - 1}. \quad (29)$$

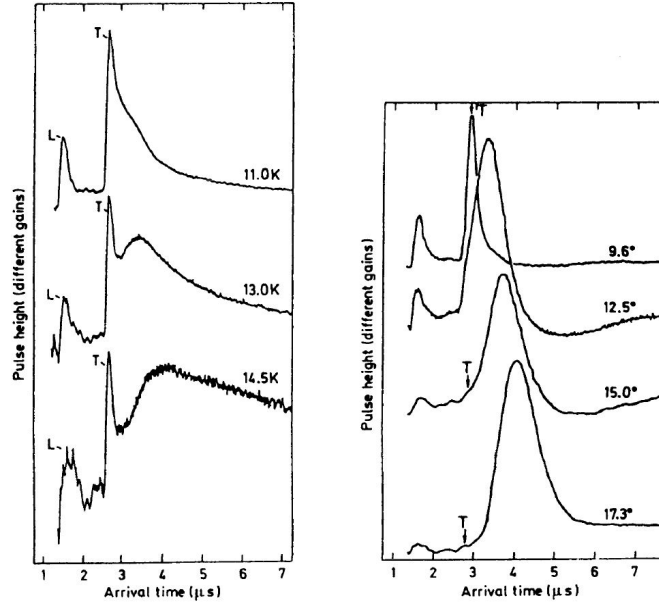
Továbbá a modell feltételezi, hogy a fononok energiasűrűségét a test T hőmérséklete meghatározza:

$$e = aT^4; \quad a = \frac{4\pi 5}{5} \frac{k_B^4}{h^3 c^3}, \quad (30)$$

³Létezik egy harmadik típus is, az úgynevezett Umklapp-folyamatok, ekkor sem az energia, sem pedig a momentum nem marad meg [43].

⁴A transzverzális és a longitudinális hangsebességek középértéke [4].

⁵A Callaway-modell kombinálja a két eloszlást a relaxációs időkkel súlyozott módon.



2.1. ábra. NaF-ban mért fonon terjedés. Bal oldali ábra: tiszta NaF esete [44]. Jobb oldali ábra: nagyon tiszta NaF esete [45]. Ballisztikus jelterjedés; L a longitudinális és T a transzverzális jel.

ahol h a Planck-állandó, k_B a Boltzmann-állandó, k pedig a hullámszám. Az eloszlásfüggvények momentumait véve vezetünk be újabb mennyiségeket⁶ az alábbi módon

$$u_{\langle i_1 i_2 \dots i_N \rangle} = \int k n_{\langle i_1 \dots i_n \rangle} f dk. \quad (31)$$

Az első momentum az energiasűrűség, a második az impulzussűrűség, a harmadik az energia áram, a negyedik pedig a nyomás deviatorikus része, azaz

$$e = hcu; \quad p_i = hu_i; \quad Q_i = hc^2 u_i; \quad N_{\langle ij \rangle} = hcu_{\langle ij \rangle}. \quad (32)$$

A momentumok képzésével mindig együtt jár a lezárás problémája [46]. Ez azt jelenti, hogy minden momentumképzésnél egy új mennyiséget kapunk, mely nem csak, hogy bonyolultabbá teszi a rendszer leírását⁷, de csak a következő momentum egyenlet határozná meg az értékét, de abban újra kapunk egy meghatározatlan mennyiséget. Erre a problémára számos lezárási eljárás létezik, a legegyszerűbb a csonkolásos eljárás, amelyben a legmagasabb rendű („ $N+1$ ”-k) momentumot nullának vesszük. Ezt alkalmazva jutunk az alábbi egyenletrendszerhez:

$$\frac{\partial u_{\langle n \rangle}}{\partial t} + \frac{n^2}{4n^2 - 1} c \frac{\partial u_{\langle n-1 \rangle}}{\partial x} + c \frac{\partial u_{\langle n+1 \rangle}}{\partial x} = \begin{cases} 0 & n = 0 \\ -\frac{1}{\tau_R} u_{\langle 1 \rangle} & n = 1 \\ -\left(\frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_N}\right) u_{\langle n \rangle} & 2 \leq n \leq N \end{cases} \quad (33)$$

Ez a rendszer csak $N = 30$ egyenlet esetén adja vissza a ballisztikus fononok helyes terjedési sebességét. Természetesen egy ekkora rendszer a gyakorlat számára

⁶Nem minden momentumhoz kapcsolódik valós fizikai háttér. Például a numerikus áramlás-tanban elterjedőben lévő módszer, a Rács-Boltzmann módszer is kinetikus megközelítést alkalmaz. Abban a leírásban csak az első 3 momentumnak van értelme.

⁷A gyakorlatban nem szoktak 3 momentumnál többet alkalmazni.

jóformán kezelhetetlen, de $N = 3$ már elegendő a megfelelő közelítéshez észben tartva, hogy a terjedési sebesség nem megfelelő. Előnye viszont, hogy két paraméterrel karakterizálható a rendszer, ez kevesebb, mint amit a ballisztikus-diffúzív egyenlet tartalmaz. Ezzel megkaptuk a kinetikus szemléletű hővezetési egyenletrendszert az alábbi formában:

$$\begin{aligned}\frac{\partial e}{\partial t} + c^2 \frac{\partial p}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{3} \frac{\partial e}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial x} &= -\frac{1}{\tau_R} p, \\ \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{4}{15} c^2 \frac{\partial p}{\partial x} &= -\left(\frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_N}\right) N.\end{aligned}\tag{34}$$

Ha a mi kontinuum megközelítésünkben elhagyjuk a disszipatív tagokat, azaz $n = k_2 = 0$ ($\rightarrow$ ballisztikus-diffúzív modell), akkor struktúrálisan ezzel egyező rendszerhez jutunk, az alábbi megfeleltetésekkel:

$$q = c^2 p; \quad Q = N; \quad \frac{1}{\tau} = \left(\frac{1}{\tau_R} + \frac{1}{\tau_N}\right) \rightarrow \tau_q = \tau_R; \quad \tau_Q = \tau,\tag{35}$$

$$\lambda = \frac{\tau_R}{3} \rho \hat{c} c^2 \rightarrow c^2 = \frac{3\lambda}{\tau_q \rho \hat{c}}; \quad \tilde{k}_{12} \tilde{k}_{21} = \frac{4}{15} \tau_q \tau_Q c^2,\tag{36}$$

ahol most $\hat{c}$ jelöli a fajhőt, megkülönböztetve a c hangsebességtől. Ezzel a mi rendszerünk:

$$\begin{aligned}\rho \hat{c} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} &= 0, \\ \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + k_{21} \frac{\partial Q}{\partial x} &= -q, \\ \tau_Q \frac{\partial Q}{\partial t} + \tilde{k}_{12} \frac{\partial q}{\partial x} &= -Q.\end{aligned}\tag{37}$$

Az együtthatók és a változók megfeleltetése után a Q belső változóról elmondhatjuk, hogy a hőáram áramát reprezentálja. Az itt bemutatott kinetikus elmélet és a kontinuum elmélet által adott rendszerek hiperbolikusak, egzakt terjedési sebesség jellemző rájuk, az ehhez kapcsolódó számításokról később lesz szó.

2.4. Az egyenletek skálafüggetlensége

Ez alatt azt értjük, hogy az egyenletrendszernek létezik olyan alakja, mely invariáns a mértékegységekre, azaz egy dimenziótlan, skálafüggetlen alak. Defináljuk hát az alábbi dimenziótlan paramétereket [47, 34]:

$$\begin{aligned}\hat{T} &= \frac{T - T_0}{T_{end} - T_0}; \quad \text{hőmérséklet,} \\ T_{end} &= T_0 + \frac{1}{\rho \cdot c \cdot L} \cdot \int_0^{t_p} q_0(t) dt; \quad \text{egyensúlyi hőmérséklet,} \\ \hat{q} &= \frac{q}{\bar{q}_0}; \quad \bar{q}_0 = \frac{1}{t_p} \cdot \int_0^{t_p} q_0(t) dt; \quad \text{hőáram és átlagos hőáram,}\end{aligned}\tag{38}$$

$$\begin{aligned}
Fo &= \frac{\alpha \cdot t}{L^2}; \quad \alpha = \frac{\lambda}{\rho \cdot c}; \quad \text{Fourier-szám (idő), hődiffúzitási tényező,} \\
\xi &= \frac{x}{L}; \quad \text{hely koordináta,} \\
\hat{\tau}_q &= \frac{\alpha \cdot \tau_q}{L^2}; \quad \hat{\tau}_Q = \frac{\alpha \cdot \tau_Q}{L^2}; \quad \text{relaxációs idők,} \\
\tau_\Delta &= \frac{\alpha \cdot t_p}{L^2}; \quad \hat{Q} = \sqrt{\frac{k_{12}}{k_{21}}} \bar{q}_0 Q; \quad \text{impulzus hossz és a hőáram árama,} \\
\hat{\kappa} &= \frac{\sqrt{\tilde{k}_{12} k_{21}}}{L} \quad \text{keresztcsatolási tényező.}
\end{aligned}$$

Ezeket behelyettesítve az egyenletekbe kapjuk azok dimenziótlan alakját. Ennek előnye, hogy átláthatóbb és könnyebben kezelhető a rendszer a kevesebb anyagi paraméter miatt, könnyebb illeszteni kísérleti eredményekhez. Természetesen adott dimenziótlan paraméterekből visszanyerhető minden adat. Az eddig bemutatott egyenleteket fogjuk átírni dimenziótlan formába, viszont a jelölések könnyebb értelmezhetősége miatt maradunk annál, ahogy bevezettük ezeket az egyenleteket, vagyis az időt t -vel és nem Fo -val fogjuk jelölni, hasonlóan a tér koordinátáknál, ott is az x -et preferáljuk. A relaxációs idők esetén elhagyjuk a kalapot a τ fölül. Szem előtt kell tartanunk, hogy innentől kizárólag dimenziótlan formákkal foglalkozunk. Alábbiakban összegzem a ballisztikus-diffúzív modell dimenziótlan formáját, valamint a belőle származtatható további konstitutív egyenleteket.

- **Ballisztikus-diffúzív modell:**

$$\begin{aligned}
\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + q + \tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial x} + \kappa \frac{\partial Q}{\partial x} &= 0, \\
\tau_Q \frac{\partial Q}{\partial t} + Q + \kappa \frac{\partial q}{\partial x} &= 0.
\end{aligned} \tag{39}$$

- **Fourier-egyenlet:** ha $\kappa = \tau_q = 0$,

$$q + \tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \tag{40}$$

- **Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenlet:** ha $\kappa = 0$,

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + q + \tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \tag{41}$$

- **Guyer-Krumhansl-egyenlet:** ha $\tau_Q = 0$ és felhasználjuk, hogy $\kappa^2 = \hat{a}$ disszipációs paraméter,

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + q + \tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial x} - \hat{a} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0. \tag{42}$$

- **Green-Naghdi - egyenlet:** speciális eset, nem követelhetjük meg, hogy $q = 0$ legyen, mert akkor minden tag kiesik,

$$\tau_q \frac{\partial q}{\partial t} + \tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial x} - \hat{a} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = 0. \tag{43}$$

Ezen egyenletek mindegyikéhez csatolni kell a belső energia mérlegegyenletét is:

$$\tau_\Delta \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0. \tag{44}$$

A megoldások fejezetben bemutatásra kerül, hogy bizonyos paraméterek együttállása esetén is reprodukálhatóak további, önhasonló megoldások.

3. FEJEZET

Parciális differenciálegyenletek

A leíró elméletekben gyakorlatilag mindenhol megjelennek a parciális differenciálegyenletek. Ismeretük nélkülözhetetlen a modern fizikai és mérnöki tudományok megértéséhez. A közönséges differenciálegyenletekkel szemben itt nem egyváltozós függvényekről van szó és ennek ténye bizonyos esetekben nagyon meg tudja nehezíteni a megoldásukat, sőt még a megoldások létezésének a bizonyítása is lényegesen körülményesebb. Szükségesnek érezzük, hogy a numerikus megoldások szempontjából röviden szót ejtsünk erről. Ismeretes, hogy a lineáris parciális differenciálegyenletek osztályozhatóak az alábbiak szerint:

- **Elliptikus** egyenletek: a megoldás függvény analitikus¹, peremérték problémákra jellemző típus, állandósult megoldást ad eredményül. A megoldásfüggvény „globális”, azaz a teljes tartománytól függ a megoldás. Tipikus példa a Laplace, Helmholtz és a Poisson-egyenletek. Numerikus szempontból a megoldásuk nem okoz különös gondot. Ebben a dolgozatban nem foglalkozunk elliptikus egyenletekkel.
- **Hiperbolikus** egyenletek: különlegességük, hogy olyan megoldásokat is megengednek, melyek nem folytonosak; numerikus szempontból ez komoly problémát jelenthet. További sajátosságuk, hogy relativisztikus megfogalmazás nélkül is a rendszerre jellemző jelterjedési sebesség véges². Rendszerint a disszipációmentes hullámegyenletek tartoznak ebbe a csoportba, ilyen például a Sommerfeld-féle hullámegyenlet és a rezgő húr egyenlete, vagy egy távolabbi fizikai problémakört tekintve a relativisztikus kvantummechanikából ismert Klein-Gordon egyenlet is. Ebben a dolgozatban is több olyan egyenletet fogunk vizsgálni, melyek hiperbolikusak – ezeket bizonyítani is fogjuk – ilyen a disszipáció mentes GN-egyenlet, a MCV- és a ballisztikus-diffúzió egyenlet is. Matematikai és fizikai háttérükről a [48], a numerikus megoldásaikról pedig a [49] irodalmak szolgáltatnak részletes leírást.
- **Parabolikus** egyenletek: általában, hasonlóan az elliptikus egyenletekhez, a megoldásfüggvény szintén sima, szakadásmentes. Azonban a rendszerre jellemző jelterjedési sebesség végtelen, ez fizikailag ellentmondásos. Diffúzió és disszipatív rendszerekre jellemző, ilyen például a Fourier-féle hővezetési egyenlet, vagy a disszipatív GN- és GK-egyenlet.

3.1. Hiperbolicitás

Ebben a fejezetben a bemutatott rendszerekre jellemző terjedési sebességeket hasonlítjuk össze, illetve megállapítjuk, hogy mely rendszerek hiperbolikusak, vagy épp

¹A végtelenszer differenciálható függvényeket nevezik így, azaz ha a Taylor-sora bármely tartományon előállítja magát a függvényt.

²A sokat emlegetett Fourier-egyenlet végtelen jelterjedési sebessége relativisztikus átírással megszüntethető.

parabolikusak. Ehhez definíció szerint [50] egy adott formára kell hoznunk a rendszert és az A^{ij} együtttható mátrix sajátértékeit kell vizsgálni. Legyen a rendszerünk az alábbi formában:

$$\partial_t u^i + A^{ij} \partial_x u^j + B^{ij} u^j = F. \quad (45)$$

Amennyiben a rendszer $n \times n$ méretű A^{ij} együtttható mátrixa diagonalizálható és a sajátértékei valósak, úgy a rendszer hiperbolikus. Ha az összes sajátérték különböző, akkor a rendszer szigorúan hiperbolikus; ha az A^{ij} mátrix szimmetrikus is, akkor szimmetrikus hiperbolikus rendszerről beszélünk. Itt u^i a változók vektora, F pedig tetszőleges szakaszonként folytonos függvény. Ennek megfelelően rendre minden rendszerünk ilyen alakra kell hozni ahhoz, hogy vizsgálható legyen. A belső energia mérlegegyenletével nincs gond, viszont egyes konstitutív egyenletek hiányosak. Ekkor új változót fogunk bevezetni és ennek megfelelően fogjuk a rendszert kezelni.

- **Fourier-egyenlet:** ekkor a változóink az $u_1 = T$ és $u_2 = q$, azonban az egyenlet hiányos, így a hőáram időderiváltját egy ε paraméterrel együtt vezetjük be,

$$\begin{aligned} \tau_\Delta \partial_t T + \partial_x q &= 0, \\ \varepsilon \partial_t q + q + \tau_\Delta \partial_x T &= 0. \end{aligned} \quad (46)$$

Ezzel együtt írjuk fel az együtttható mátrixot: $A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\tau_\Delta} \\ \frac{\tau_\Delta}{\varepsilon} & 0 \end{pmatrix}$, melynek

sajátértékei $\pm \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$. Ilyenkor, mivel ε csak egy mesterséges paraméter volt, tartassuk nullához. Ezzel a sajátértékek tartanak a végtelenhez, ami azt jelenti, hogy a rendszer parabolikus.

- **Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenlet:** ezzel könnyű dolgunk van, mivel az előző konstitutív egyenlet megegyezik a MCV-egyenlettel, ha $\varepsilon = \tau_q$; azaz a sajátértékek végesek és különbözőek, a rendszer hiperbolikus.
- **Guyer-Krumhansl-egyenlet:** ebben az egyenletben egy disszipatív taggal van több, mely egy másodrendű térderivált,

$$\begin{aligned} \tau_\Delta \partial_t T + \partial_x q &= 0, \\ \tau_q \partial_t q + q + \tau_\Delta \partial_x T - \hat{a} \partial_{xx} q &= 0. \end{aligned} \quad (47)$$

Ahhoz, hogy a megfelelő alakra hozzuk, be kell vezetni egy újabb változót, azaz $u_1 = T$, $u_2 = q$, $u_3 = \partial_x q$. Ezzel a rendszerünk:

$$\begin{aligned} \partial_t u_1 + \frac{1}{\tau_\Delta} \partial_x u_2 &= 0, \\ \partial_t u_2 + \frac{1}{\tau_q} u_2 + \frac{\tau_\Delta}{\tau_q} \partial_x u_1 - \frac{\hat{a}}{\tau_q} \partial_x u_3 &= 0, \\ \varepsilon \partial_t u_3 + u_3 - \partial_x u_2 &= 0. \end{aligned}$$

Így az együtttható mátrix a következő formát ölti: $A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\tau_\Delta} & 0 \\ \frac{\tau_\Delta}{\tau_q} & 0 & -\frac{\hat{a}}{\tau_q} \\ 0 & -\frac{1}{\varepsilon} & 0 \end{pmatrix}$,

sajátértékei a $0, \pm \frac{\sqrt{\varepsilon + a}}{\sqrt{\varepsilon \tau_q}}$, ahol szintén ε -t nullához tartva végtelen terjedési sebességeket kapunk, azaz a rendszer parabolikus.

- **Green-Naghdi-egyenlet:** az új változó bevezetése a GK eset példájából itt is adódik. Ha az $\hat{a}$ disszipációs anyagi paraméter zérus, akkor a rendszer hiperbolikus lesz, a MCV-egyenletre jellemző terjedési sebességgel, ellenkező esetben pedig parabolikus.
- **Ballisztikus-diffúzív modell:** a rendszer már eleve nagyon kényelmes formában van, a változók kézenfekvően $u_1 = T$; $u_2 = q$; $u_3 = Q$. A konstitutív egyenletek:

$$\begin{aligned}\tau_\Delta \partial_t T + \partial_x q &= 0, \\ \tau_q \partial_t q + q + \tau_\Delta \partial_x T + \kappa \partial_x Q &= 0, \\ \tau_Q \partial_t Q + Q + \kappa \partial_x q &= 0.\end{aligned}\tag{48}$$

A vizsgált együttható mátrix tehát $A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\tau_\Delta} & 0 \\ \frac{\tau_\Delta}{\tau_q} & 0 & \frac{\kappa}{\tau_q} \\ 0 & \frac{\kappa}{\tau_Q} & 0 \end{pmatrix}$, melynek saját-

értékei a 0 és a $\pm \frac{\sqrt{\kappa^2 + \tau_Q}}{\sqrt{\tau_q \tau_Q}}$. Láthatóan a keresztcsatolási paramétereknek köszönhetően két terjedési sebesség van a modellben, amennyiben ezt a csatolást megszüntetjük, úgy a MCV-egyenletre redukálódik a rendszer.

További megjegyzés, hogy ha a (45) egyenletben szereplő B^{ij} együttható mátrix nulla, akkor a rendszer homogén. A rendszer lineáris marad ha a B^{ij} lineárisan függ u^i változóktól [50].

3.2. Diszperziós reláció

A fizika számos területén előbukkanó fogalom, használják minden olyan területen, ahol hullámokról, illetve azok viselkedéséről van szó; főbb területek az optika, kvantummechanika³, elektrodinamika. A diszperziós reláció⁴ leírja a hullám frekvenciája és a hullámszáma közötti kapcsolatot.

Tételezzük fel egy egyenlet megoldását síkhullám formájában, azaz

$$\chi = Ae^{i(kx - \omega(k)t)},\tag{49}$$

ahol A a hullám amplitúdója, $k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}$ a hullámszám és $\omega(k)$ a hullám frekvenciája, ami függ a hullámszámtól. A hullám fázissebességét a $v_p = \frac{\omega}{k}$, a csoportsebességet pedig a $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ relációk fejezik ki. Ez a két fogalom nem tévesztendő össze. A fázissebesség a hullám azonos fázisú pontjainak haladási sebességére vonatkozik. A csoportsebesség több hullám szuperpozíciójára érvényes fogalom; az egyes hullámok különböző fázissebességgel rendelkeznek, ezáltal maga a hullámcsomag is mozog a térben, ennek sebessége a csoportsebesség [52]. A két sebesség nemlineáris $w(k)$ függvény esetén nem azonos, azaz ha a terjedési sebesség is függ a hullámszámtól.

³A diszperziós reláció fontos szerepet játszott a fény részecske- és hullámtermészetének a vizsgálatában, illetve az 1924-ben de Broglie által felállított hipotézisben is, hogy minden anyagi részecske rendelkezik ezzel a dualitással.

⁴Matematikai értelemben vett diszperziós relációnak nevezzük azokat a komplex függvényeket, melyek képzetes és valós részei között létezik egy integrál kapcsolat, az úgynevezett Kramers-Kronig reláció. A fény esetében a refrakciós index diszperzív (valós) és az abszorptív (képzetes) részei között teremt kapcsolatot [51].

További fontos megjegyzés, hogy a rendszerek stabilitásának vizsgálatához is hatékony eszközt nyújt. Az exponenciális függvény akkor konvergál egy véges számhoz, ha a kitevőjének valós része negatív.

Energiaszemponthú megközelítés esetén elmondható, hogy amennyiben a rendszer konzervatív, úgy a csoportsebesség megegyezik az energiatranszport sebességével, azaz $v_g = v_e = \frac{\bar{F}}{\bar{E}}$, ahol $\bar{F}$ az átlagos energia áram és $\bar{E}$ az átlagos mechanikai energia. Viszont ha a vizsgált közeg elnyelő tulajdonságú, úgy a csoportsebesség és az energiatranszport sebessége nem egyezik meg és a csoportsebesség komplex értékű lesz; általában véve a hullámcsoport centrális hullámszáma sem állandó és az energia szempontú megközelítés nem ad egyértelmű választ a kérdésre [53].

Ebben a fejezetben a bemutatott hővezetési modellekre jellemző diszperziós relációkat vizsgáljuk, azzal a céllal, hogy a paraméterek szerepéről többet megtudjunk. Fontos megemlíteni, hogy a dimenziótlan paraméterek miatt a frekvencia és a hullámszám, valamint az ebből eredő fázissebesség és csoportsebesség esetén nincs értelme dimenziókról beszélni.

3.2.1. Fourier-egyenlet: Az egyenletrendszer az alábbi alakot ölti:

$$\tau_\Delta \partial_t T + \partial_x q = 0, \quad (50)$$

$$q + \tau_\Delta \partial_x T = 0. \quad (51)$$

Helyettesítsük be a (49) egyenletet mindkét mezőre vonatkozólag, ezzel egy algebrai egyenletrendszert kapunk. Ennek az egyenletrendszernek az M együttható mátrixát kell vizsgálnunk.

$$M = \begin{pmatrix} -\omega\tau_\Delta & k \\ ik\tau_\Delta & 1 \end{pmatrix} \\ \det M = 0 \rightarrow k^2 = i\omega \quad (52)$$

Ebből az következik, hogy a fázissebesség tisztán képzetes, de ennek valós fizikai jelentése nincs, így ezzel nem foglalkozunk tovább.

3.2.2. Guyer-Krumhansl-egyenlet: Adott az alábbi egyenletrendszer

$$\tau_\Delta \partial_t T + \partial_x q = 0, \quad (53)$$

$$\tau_q \partial_t q + q + \tau_\Delta \partial_x T - \hat{a} \partial_{xx} q = 0. \quad (54)$$

Járjunk el hasonlóképp, helyettesítés után szintén egy algebrai rendszerhez jutunk, ennek az együttható mátrixa:

$$M = \begin{pmatrix} -\omega\tau_\Delta & k \\ ik\tau_\Delta & 1 - i\omega\tau_q + \hat{a}k^2 \end{pmatrix} \\ \det M = 0 \rightarrow k = \sqrt{-\frac{i\omega^2\tau_q + \omega}{\omega\hat{a} + i}} \quad (55)$$

Viszont a komplex értékek miatt ebben a formában nagyon nehézkes elvégezni a gyökvonást, így tegyük meg az alábbi átalakítást

$$k^2 = \frac{1}{\omega^2\hat{a}^2 + 1} \left(\omega^2(\tau_q - \hat{a}) + i(\omega^3\tau_q\hat{a} + \omega) \right). \quad (56)$$

Legyen a k^2 egy $z = x + iy$ komplex számmal egyenlő, ahol

$$x = \frac{\omega^2(\tau_q - \hat{a})}{\omega^2\hat{a}^2 + 1}; \quad y = \frac{\omega^3\tau_q\hat{a} + \omega}{\omega^2\hat{a}^2 + 1}. \quad (57)$$

Ekkor a z komplex számot írhatjuk a $z = re^{i\phi}$ alakban is, ahol $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ és $\phi = \arctan(y/x)$. A gyökvonás művelete így könnyen elvégezhető, ugyanis $\sqrt{z} = \sqrt{r}e^{i\frac{\phi}{2}}$, azaz elég az argumentumot kettővel osztani, így megkaptuk a $k(w)$ függvényt, melynek valós része az exponenciális tag felbontása után

$$\operatorname{Re}\{k(\omega)\} = \sqrt[4]{\frac{\omega^4\tau_q^2 + \omega^2}{\omega^2\hat{a}^2 + 1}} \cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\omega^2\hat{a}\tau_q + 1}{\omega(\tau_q - \hat{a})}\right)\right). \quad (58)$$

Komplex diszperziós reláció esetén a csoportsebességet az $w(k)$ függvény valós részének a deriváltja határozza meg, azaz

$$v_g = \frac{d\operatorname{Re}\{\omega\}}{dk}. \quad (59)$$

De az $\omega(k)$ függvény ismeretlen; ezzel ellentétben a $k(w)$ függvényt már ismerjük, így ennek a deriváltja is megfelelő a $\frac{d\operatorname{Re}\{\omega(k)\}}{dk} = \left(\frac{d\operatorname{Re}\{k(\omega)\}}{d\omega}\right)^{-1}$ összefüggés felhasználásával. A csoportsebesség így

$$v_g = 1/\left(\frac{\omega(1 + \tau_q^2\omega^2(2 + \hat{a}^2\omega^2)) \cos(\frac{1}{2} \arctan(\frac{1+\hat{a}\tau_q\omega^2}{\hat{a}\omega - \tau_q\omega}))}{2(1 + \hat{a}^2\omega^2)^2(\frac{\omega^2 + \tau_q^2\omega^4}{1 + \hat{a}^2\omega^2})^{\frac{3}{4}}} + \frac{(-\hat{a} + \tau_q)\omega^2(-1 + \hat{a}\tau_q\omega^2) \sin(\frac{1}{2} \arctan(\frac{1+\hat{a}\tau_q\omega^2}{\hat{a}\omega - \tau_q\omega}))}{2(1 + \hat{a}^2\omega^2)^2(\frac{\omega^2 + \tau_q^2\omega^4}{1 + \hat{a}^2\omega^2})^{\frac{3}{4}}}\right). \quad (60)$$

A formula meglehetősen bonyolult, de nézzük mit tudunk kiolvasni belőle.

- **Fourier eset:** ha $\hat{a} = \tau_q = 0$, akkor a diszperziós relációra a Fourier esetet kapjuk vissza, ez nem közvetít fizikai információt számunkra.
- **MCV eset:** ha $\hat{a} = 0$, akkor a MCV-egyenletre redukálódik a rendszer, mellyel a diszperziós relációra

$$k^2 = \omega^2\tau_q + i\omega \quad (61)$$

adódik. Ekkor a $k(\omega)$ függvény valós része az (58) egyenlőséget felhasználva

$$\operatorname{Re}\{k(\omega)\} = \sqrt[4]{\omega^4\tau_q^2 + \omega^2} \cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1}{\omega\tau_q}\right)\right). \quad (62)$$

Nézzünk most kétféle közelítést.

- (1) Legyen a τ_q paramétere kicsi, azaz $\tau_q \ll 1$. Ekkor mondhatjuk, hogy $\tau_q^2 \approx 0$ és az arctan függvény tart a $\frac{\pi}{2}$ -höz, mely által a cos-os tag tart az $\frac{1}{\sqrt{2}}$ -höz. A frekvencia szigorúan pozitív, így a gyök alatti kifejezés $\sqrt[4]{\omega^2} \rightarrow \sqrt{\omega}$ módon egyszerűsödik. Ezt felhasználva

$$\operatorname{Re}\{k(\omega)\} \cong \sqrt{\frac{\omega}{2}}. \quad (63)$$

Egyszerű számolás megmutatja, hogy amíg $\tau_q \leq 0.001$, addig 100 Hz-es gerjesztő frekvenciáig a hiba 5 % alatt marad. Ezzel az egyszerűbb relációval a fázissebesség $v_p = 2k$, a csoportsebesség pedig $v_g = 4k$, azaz jó közelítéssel a hullámszám valós részével egyenesen arányosak.

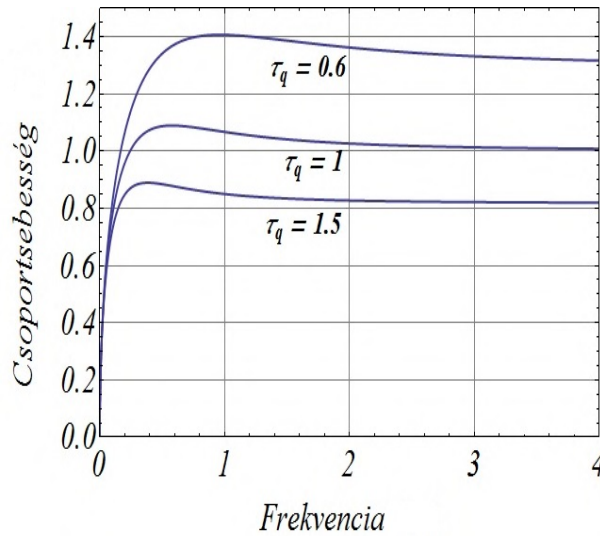
- (2) Legyen most a τ_q nagy paraméter, azaz $\tau_q^2 \gg 1$ és $\omega > 1$, mellyel $\omega^4 \gg \omega^2$. Az előző esethez hasonlóan eljárva a $k(\omega)$ függvény az alábbira egyszerűsödik:

$$\operatorname{Re}\{k(\omega)\} \cong \omega\sqrt{\tau_q}. \quad (64)$$

A hullámszám és a frekvencia közötti kapcsolat lineáris, így a fázissebesség és a csoportsebesség megegyezik, azaz $v_p = v_g = \frac{1}{\sqrt{\tau_q}}$, mely azonos a hiperbolicitás vizsgálatánál is levezetett eredménnyel. Ez azt jelenti, hogy a csoportsebesség fordítottan arányos a τ_q paraméterrel, azaz nagyobb paraméter mellett lassabb jelterjedés tapasztalható.

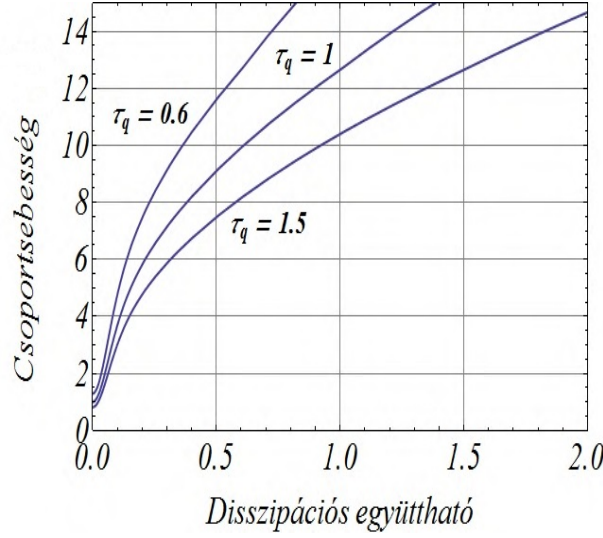
- **GK eset:** ilyenkor egyik paramétert sem tekintjük nullának, továbbá a fázissebesség és a csoportsebesség összefüggései sem lineárisak, csak speciális közelítések sorozatával mondhatnánk róla többet. Érdekesebb meg nézni az $\hat{a}$ és a τ_q paraméterek együttállását. Ekkor a diszperziós reláció a Fourier-egyenlethez tartozó relációra egyszerűsödik, amiből a csoportsebességre kapjuk, hogy $v_g = \sqrt{8\omega}$.

Fontos észrevenni, hogy a GK-egyenlet esetén a csoportsebesség nem tud komplex értéket felvenni, mivel a konstansok pozitív definiték a második főtételek teljesülése miatt. Figyeljük meg, hogy a csoportsebesség az $\hat{a}$ paraméter növelésével szintén növekszik, azaz a jelátvitel sebessége nő (3.2. ábra), erre példát a megoldásoknál fogunk még látni.



3.1. ábra. A GK-egyenletre jellemző csoportsebesség különböző τ_q paraméterek melletti ábrázolása a frekvencia függvényében, $\hat{a} = 0.001$ disszipációs paraméter állandó.

A 3.1. ábrán látható a csoportsebesség frekvencia tartományon való ábrázolása. Kis frekvenciák esetén megfigyelhető a nemlineáris jelleg, valamint a függvény szélsőértékkel rendelkezik. A nemlinearitás a magasabb frekvenciák irányában teljesen elhal és egy konstans értékhez konvergál a csoportsebesség.



3.2. ábra. A GK-egyenletre jellemző csoportsebesség különböző τ_q paraméterek melletti ábrázolása az $\hat{a}$ dimenziótlan disszipációs együttható függvényében, állandó frekvencia mellett.

3.2.3. Green-Naghdi-egyenlet: A szituáció hasonló a GK esethez, de abból ezt nem tudjuk egyszerű paraméter helyettesítéssel visszakapni a konstitutív egyenletből hiányzó hőáram miatt:

$$\tau_\Delta \partial_t T + \partial_x q = 0, \quad (65)$$

$$\tau_q \partial_t q + \tau_\Delta \partial_x T - \hat{a} \partial_{xx} q = 0. \quad (66)$$

A már bevett eljárással számoljunk tovább.

$$M = \begin{pmatrix} -\omega \tau_\Delta & k \\ ik \tau_\Delta & -i\omega \tau_q + \hat{a} k^2 \end{pmatrix}$$

$$\det M = 0 \rightarrow k^2 = \frac{i\omega^2 \tau_q}{\omega \hat{a} + i} \quad (67)$$

- **Disszipáció mentes eset:** ekkor $\hat{a} = 0$ így a hőmérsékletre nézve egy másodrendű hullámegyenletet eredményez, melyre a MCV-egyenletre is jellemző $\frac{1}{\sqrt{\tau_q}}$ fázissebesség és csoportsebesség adódik.
- **GN eset:** a $k(\omega)$ függvény valós része

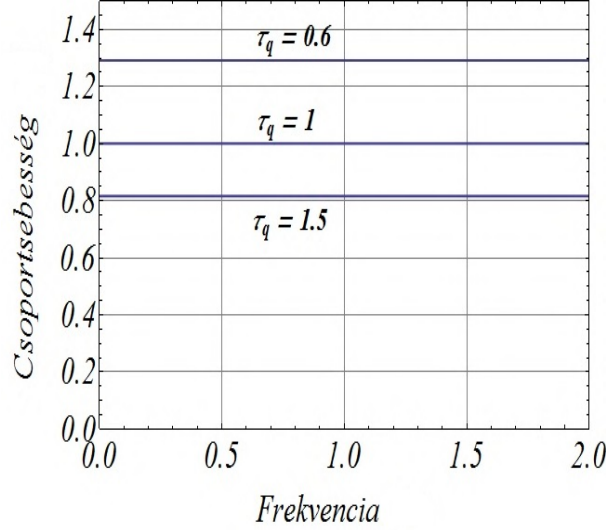
$$\text{Re}\{k(\omega)\} = \sqrt[4]{\frac{\omega^4 \tau_q^2}{\omega^2 \hat{a}^2 + 1}} \cos\left(\frac{1}{2} \arctan(\hat{a}\omega)\right). \quad (68)$$

Figyeljük meg, hogy a GK esettel összhangban itt is csökken a hullám amplitúdója az $\hat{a}$ paraméter növelésével. A csoportsebesség pedig

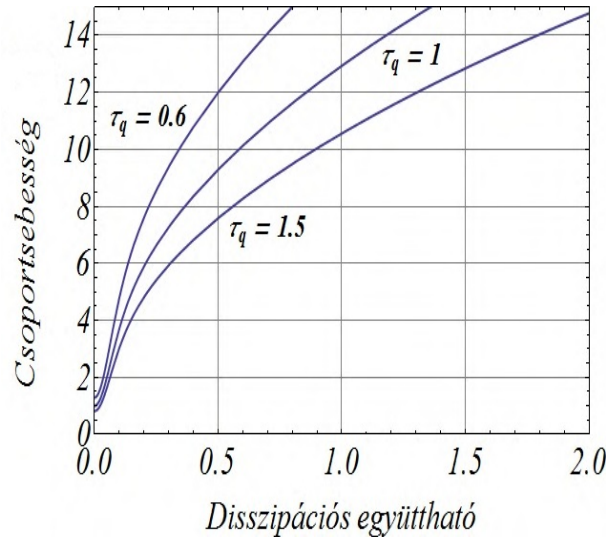
$$v_g = \frac{2(\omega + \hat{a}^2 \omega^3)}{\sqrt[4]{\frac{\omega^4 \tau_q^2}{\omega^2 \hat{a}^2 + 1}} ((2 + \hat{a}^2 \omega^2) \cos(\frac{1}{2} \arctan(\hat{a}\omega)) - \hat{a} \omega \sin(\frac{1}{2} \arctan(\hat{a}\omega)))}. \quad (69)$$

A GK esethez hasonlóan a disszipációs együttható növekedése szintén növeli a csoportsebességet. A megoldások fejezetben arra is mutatunk példát, hogy a Fourier-egyenlet megoldása ezzel az egyenlettel is közelíthető, méghozzá

nagy τ_q és $\hat{a}$ paraméterekkel úgy, hogy $\tau_q = \hat{a}$ is teljesüljön. A csoportsebesség összefüggésében is elvégezve ezeket a közelítéseket kapjuk, hogy $v_g = \sqrt{8\omega}$, ami pontosan a Fourier-egyenletre jellemző csoportsebesség.



3.3. ábra. A GN-egyenletre jellemző csoportsebesség különböző τ_q paraméterek melletti ábrázolása a frekvencia függvényében, $\hat{a} = 0.001$ disszipációs paraméter állandó.



3.4. ábra. A GN-egyenletre jellemző csoportsebesség különböző τ_q paraméterek melletti ábrázolása az $\hat{a}$ dimenziótlan disszipációs együttható függvényében, állandó frekvencia mellett.

Figyeljük meg, hogy a csoportsebesség állandó értéket vesz fel a frekvencia tartományon a relaxációs időtől függően (3.3. ábra). A disszipációs együttható növekedésével meredeken növekszik a csoportsebesség, továbbá a GK-egyenlettel azonosan függ a disszipációs együtthatótól (3.4. ábra).

3.2.4. Ballisztikus-diffúzió modell: Először nézzük a már bemutatott hierarchikus egyenletrendszer:

$$\tau_\Delta \partial_t T + \partial_x q = 0, \quad (70)$$

$$\tau_q \partial_t q + q + \tau_\Delta \partial_x T + \kappa \partial_x Q = 0, \quad (71)$$

$$\tau_Q \partial_t Q + Q + \kappa \partial_x q = 0. \quad (72)$$

A síkhullám megoldás behelyettesítésével kapjuk az alábbi együttható mátrixot és diszperziós relációt.

$$M = \begin{pmatrix} -\omega\tau_\Delta & k & 0 \\ k\tau_\Delta & -\omega\tau_q - i & k\kappa \\ 0 & k\kappa & -\omega\tau_Q - i \end{pmatrix}$$

$$\det M = 0 \rightarrow k^2 = \frac{\omega^2\tau_q + i\omega}{1 + \frac{\kappa^2\omega}{\omega\tau_Q + i}} \quad (73)$$

A valós és képzetes részeket elkülönítve kapjuk, hogy

$$k^2 = \frac{1}{\omega^2(\tau_Q + \kappa^2)^2 + 1} \left(\omega^4(\tau_Q^2\tau_q + \tau_Q\tau_q\kappa^2) + \omega^2(\tau_q - \kappa^2) + i[\omega^3(\tau_Q^2 + \tau_Q\kappa^2 + \tau_q\kappa^2) + \omega] \right). \quad (74)$$

Vegyük sorra az egyes eseteket.

- **MCV eset:** a legszembetűnőbb eset, ha megszüntetjük a konstitúciós egyenletek közötti csatolást, akkor azonnal a MCV-egyenletre redukálódik a rendszer a diszperziós relációval együtt.
- **Fourier eset:** az előző gondolatot folytatva, ha τ_q zérus, akkor tovább redukáljuk a rendszerünk és a Fourier-egyenlethez jutunk. Másik lehetőség, hogy ha egyik paraméter sem zérus, akkor a κ és a τ_q legyenek „kis” paraméterek, ekkor a Fourier-hez nagyon hasonló megoldást fogunk kapni.
- **GK eset:** legyen $\kappa^2 = \hat{a}$ és $\tau_Q = 0$, úgy a GK-egyenletre jellemző diszperziós relációt kapjuk vissza, ami az egyenletrendszerből is jól látható.
- **Ballisztikus-diffúzió eset:** a $k(\omega)$ függvény valós része

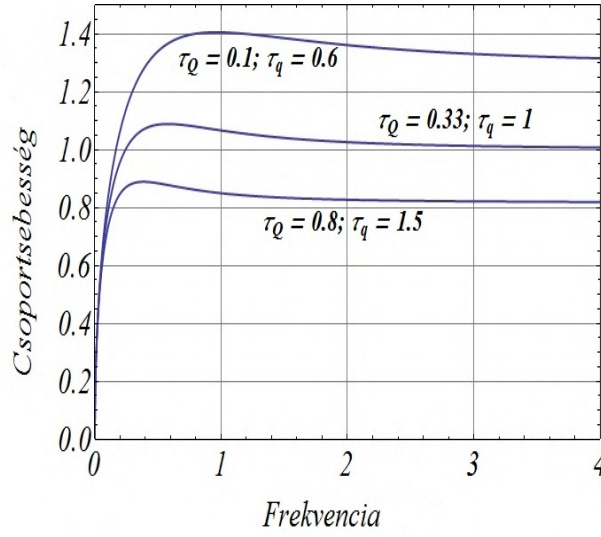
$$\begin{aligned} \operatorname{Re}\{k(\omega)\} &= \sqrt[4]{\frac{\omega^2(1 + \tau_q^2\omega^2)(1 + \tau_Q^2\omega^2)}{1 + \omega^2(\tau_Q + \kappa^2)^2}} \times \\ &\times \cos\left(\frac{1}{2} \arctan\left(\frac{1 + \omega^2(\tau_Q^2 + \kappa^2(\tau_q + \tau_Q))}{\omega(\tau_q - \kappa^2) + \omega^3\tau_q\tau_Q(\tau_Q + \kappa^2)}\right)\right) \end{aligned} \quad (75)$$

A fenti alak csak a csoportsebesség meghatározására lesz hasznunkra. Ha még azonnal a determináns képzésekor elhagyjuk a képzetes tagokat, akkor abból a fázissebességre visszkapjuk a hiperbolicitás vizsgálatának során meghatározott jelterjedési sebességet, azaz

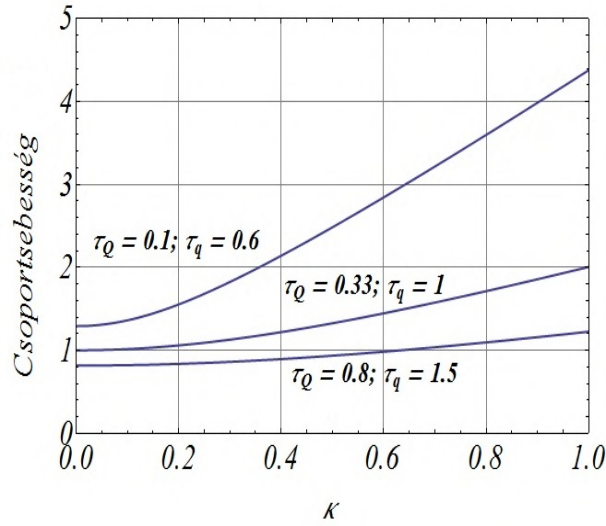
$$v_p = \sqrt{\frac{\kappa^2 + \tau_Q}{\tau_q\tau_Q}}. \quad (76)$$

Vegyük észre, hogy amíg τ_q és τ_Q kicsi paraméterek, $\kappa > 1$, valamint igaz még, hogy $\tau_q\omega = \tau_Q\omega = 1$, akkor az egész $\operatorname{Re}\{k(\omega)\}$ összefüggés közelíthető $\frac{1}{\kappa}$ -val, a fázissebesség pedig $\kappa\omega$ -val. A csoportsebességre kapott összefüggés túl hosszú, közlésétől eltekintünk. Ebben az esetben sem lehet komplex

értékű a csoportsebesség. A paramétereiktől való függést szemléletesen a csoportsebesség függvényének képével mutathatjuk be (3.5. és 3.7. ábrák).



3.5. ábra. A ballisztikus-diffúzív egyenletre jellemző csoportsebesség különböző τ_q és τ_Q paraméterek melletti ábrázolása a frekvencia függvényében, $\kappa = 0.001$ paraméter állandó. A GK-egyenlettel megegyező karakterisztikát láthatunk.

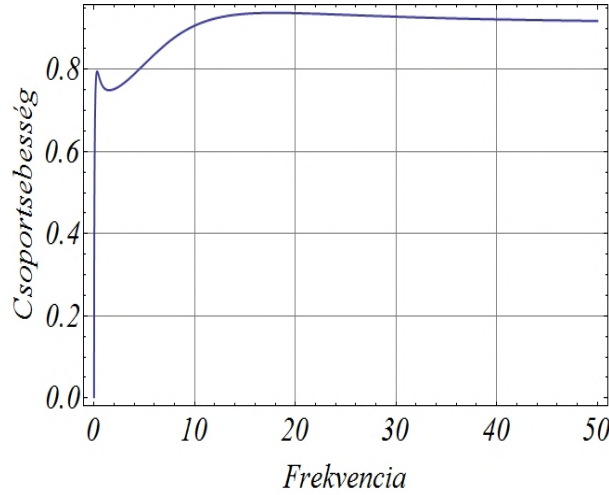


3.6. ábra. A ballisztikus-diffúzív egyenletre jellemző csoportsebesség különböző τ_q és τ_Q paraméterek melletti ábrázolása a κ dimenzióatlan paraméter függvényében, állandó frekvencia mellett.

Fontos észrevennünk a 3.5. ábrán, hogy a $v_g(\omega)$ függvénynek szélsőértéke van, mely a már említett ablakfeltételre utalhat. Azonban ennek jelentése további vizsgálatokat igényel. A csoportsebesség minden esetben a

GN-egyenlet általi értékekhez konvergál és szintén konstans marad a frekvencia tartományban. Érdekes tulajdonsága, hogy a κ paraméter növelésével növekszik a csoportsebesség (3.7. ábra), de másképp, mint a GK- és GN-egyenleteknél.

A ballisztikus tartományban⁵ szemléltetett paraméterek esetén az alábbiak szerint alakul a csoportsebesség frekvencia függése. Figyeljük meg, hogy ebben az esetben két maximum helylyel is rendelkezik a függvény.



3.7. ábra. A ballisztikus-diffúzív egyenletre jellemző csoportsebesség különböző $\tau_q = 1.9$, $\tau_Q = 0.07$ és $\kappa = 0.2$ paraméterek melletti ábrázolása a frekvencia függvényében.

Ezzel a fejezettel pontosabb képet kaphattunk arról, hogy milyen módon módosítják az egyes paraméterek a kapott megoldásokat a terjedési sebességekre fókuszálva. Láthattuk, hogy a legtöbb diszperziós relációban jelen vannak a frekvencia magasabb rendű hatványai is, ami disszipációra és diszperzióra utal. A numerikus megoldások pontosságában ennek a két jelenségnek nagy szerepe van. A disszipáció a hullám ellapulását okozza, míg a diszperzió egy állandó érték körüli oszcillációként jelentkezik. Egy numerikus séma stabilitásának vizsgálata során olyan feltételeket határoozunk meg, melyek nem engedik, hogy ezek a mesterséges oszcillációk az időben előrehaladva növekedjenek. A lézerimpulzus kísérlet bemutatása után részletesen tárgyaljuk a konvergencia bizonyítását, mely szoros kapcsolatban áll a stabilitással.

⁵Megoldások fejezet, 6.22. ábra

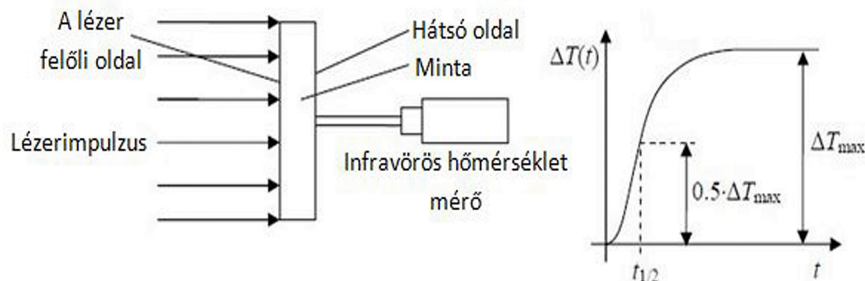
4. FEJEZET

A lézerimpulzus kísérlet

A bemutatott hővezetési modelleket a széles körben elterjedt lézerimpulzus kísérleten „teszteljük”. Ezt a módszert az anyagok hőfizikai paramétereinek (hőfokvezetési és hővezetési tényező) mérésére használják. Több oka van annak, hogy ezt a kísérletet választottuk:

- A módszert több, mint 50 éve használják, jól kidolgozott, a technikai fejlődésének hála folyamatos fejlesztés alatt van.
- A mérnöki gyakorlat számára jól ismert, a mérés egyszerű és könnyen reprodukálható, széles körben alkalmazott mérési eljárás az anyagok hővezetési tényezőjének mérésére.
- Ami a számunkra legfontosabb, a Fourier-féle hővezetésen túli jelenségek kimutatására a legalkalmasabb módszer lehet a kis karakterisztikus idejű hőimpulzus miatt.

A mérés során a minta hátfalán mérik a hőmérséklet időbeli változását és abból vissza számolhatóak a kívánt hőfizikai paraméterek, így főként mi is ezt a fajta karakterisztikát fogjuk figyelemmel kísérni. A mérés vázlata a 4.1. ábrán látható.



4.1. ábra. A lézerimpulzus mérési módszer sematikus vázlata.

4.1. Kezdeti és peremfeltételek

A kezdeti feltételek megadásakor homogén mezőket tételezünk fel a dimenziótlan egyenletekben, egyformán zérus kiindulási értékkel. A peremfeltételek nem ilyen egyszerűek. A legtöbb modell esetén a hőmérséklet és a hőáram mezővel dolgozunk, a ballisztikus-diffúzív modell esetén viszont egy harmadik mennyiség is fellép, a hőáram árama. Induljunk ki abból, hogy a lézerimpulzus egy hőáram, ennek megfelelően a hőáram mezőre adunk meg peremfeltételt. Nem foglalkozunk a minta lehűlésével, így a hőáram impulzus után a minta mindkét oldalán állandó nulla hőáramot definiálunk.

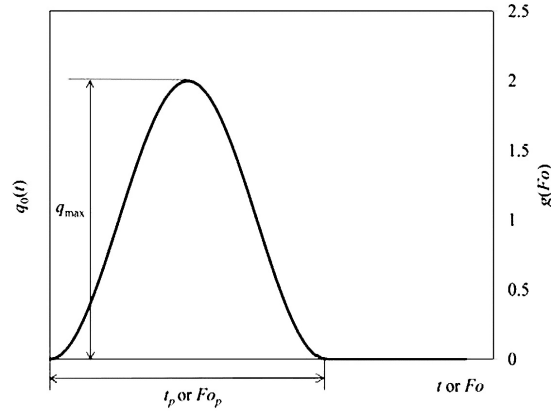
Ha az egyenletrendszerünket csak a hőmérsékletet tartalmazó formára hoznánk, azaz kiküszöbölnénk a hőáramot (és esetleg a hőáram áramát), akkor úgy gondolhatjuk, hogy az egyenlet térbeli rendjéből egyértelműen meghatározható a szükséges peremfeltételek száma. Ez általában véve igaz is, viszont magát a peremfeltételt megadni közel sem egyszerű. Mivel ilyenkor nem szerepel explicit módon a hőáram az egyenleteinkben, így elkerülhetetlen a konstitutív egyenletek alkalmazása. A térben nemlokális egyenleteknél (például a GK- és GN-egyenletek) mindenképp szükség van a hőáram mezőre, egészen pontosan annak „féloldalas” deriváltjára. A [28] dolgozatban láthattuk, hogy ennek hiánya a megoldások egy bizonyos paraméter tartományán „fizikátlan” eredményre vezet, negatív hőmérséklet alakul ki.

A ballisztikus-diffúzív modell esetén a helyzet még bonyolultabb, mivel a hőmérséklet harmadik deriváltját is ismernünk kéne a peremeken. Így lényegesen egyszerűbb - és a lézerimpulzus kísérletben kézenfekvőbb is - a hőáramot megadni a peremen. A rendszereink ilyen szempontú megoldása vezetett minket egy olyan diszkretizálási eljáráshoz, ahol a peremfeltételeket különleges módon kezelhetjük, erről részletesen a következő fejezetben lesz szó, most csak a hőáram mezőre vonatkozó peremfeltételek tárgyaljuk.

A lézerimpulzust definiáljuk az alábbi módon [47]:

$$q_{x=0} = \begin{cases} 1 - \cos(2\pi \cdot \frac{t}{t_p}) & \text{ha } 0 < t \leq t_p \\ 0 & \text{ha } t > t_p \end{cases}$$

Ennek ábrázolása látható a 4.2. ábrán.



4.2. ábra. Lézerimpulzus peremfeltétel.

Fontos észrevenni, hogy a függvény „simán” indul, azaz a deriváltja a kezdeti időpontban nulla, valamint a hullám kifutása is ilyen. Ez numerikus szempontból fontos. A nem nulla derivált mesterséges numerikus perturbációt idéz elő. Ez jól érzékeltethető az egységugrás függvény példáján. A kiindulási időpontban lévő hirtelen ugrás (a derivált itt végtelen) lehetetlenné teszi a véges differenciával történő „sima” megoldást, bármilyen finom is a diszkretizáció, teljesen nem fognak eltűnni a kétértelmű numerikus hibák.

Természetesen a valóságban a kísérletek során nem ilyen jelalak jelenik meg. Mi a jelalaktól való függést nem vizsgáljuk, az egyenletek kvalitatív viselkedésének tanulmányozásához ez is elegendő. Viszont az impulzus hossza a kísérlet időtartamához képest kicsi, ezért várhatóan a pontos jelalak nem játszik lényeges szerepet.

5. FEJEZET

Numerikus módszer

Az egyenletek megoldásához a véges differencia módszert használtuk. Ennek vannak előnyei és hátrányai is:

- Könnyű a diszkretizálás, jól követhető a séma pontossága, peremfeltételtől függetlenül használható, egyszerű leprogramozni.
- Mesterséges numerikus jelenségek, oszcillációk és fázishiba lehetősége. A hirtelen változó megoldásokat körülményes kezelni.

Célunk volt egy könnyen kezelhető explicit sémát írni, mely hasonló szerkezetű egyenletrendszerekre könnyen kiterjeszthető. Mivel a vizsgált hővezetési modellek rendre hasonló struktúrával bírnak, így ez egy fontos szempont, viszont a stabilitás vizsgálata elengedhetetlen. A séma konzisztenciájának a vizsgálatára is szükség van, melynek igazolásával a Lax-Richtmyer tétel¹ [54] alapján a séma konvergenciája² is biztosítottá válik. A konzisztencia vizsgálattal együtt a séma hibájára is becslést tudunk majd adni.

5.1. Diszkretizálás

A sémánk sajátossága, hogy egymáshoz képest eltolt mezőket alkalmaz, melyet az alábbi 5.1. ábra is szemléltet.

Az egyik mező a minta teljes tértartományát lefedi (a fenti szélesebb), addig a másik $\frac{\Delta x}{2}$ -vel el van tolva. Képzeljük el magunk előtt, hogy a mintát kis darabokra bontjuk, kontinuumok kölcsönhatását számoljuk. Ezzel a fajta diszkretizálással megkülönböztetünk felület jellegű és térfogat jellegű mennyiségeket, azaz ami a teljes tartományt lefedi, ott a cellák határait írjuk fel az egyenleteket, az eltolt mező esetén pedig a cellák középpontjára, mint egyfajta átlagként kezelve az adott cellára vonatkozólag. További tulajdonsága, hogy így a térfogati mennyiségekre nem szükséges peremfeltételeket definiálnunk. Ezzel a megfontolással tehát elegendő lesz számunkra a hőáram, mint peremfeltétel, a többi mennyiséget eltoltnak tekintjük. Ez a választás viszont önkényes, ha hőmérsékletet szeretnénk definiálni a peremen, akkor a többi mennyiséget fogjuk eltolni. Vegyes peremfeltétel esetén viszont megfontolandó a választás.

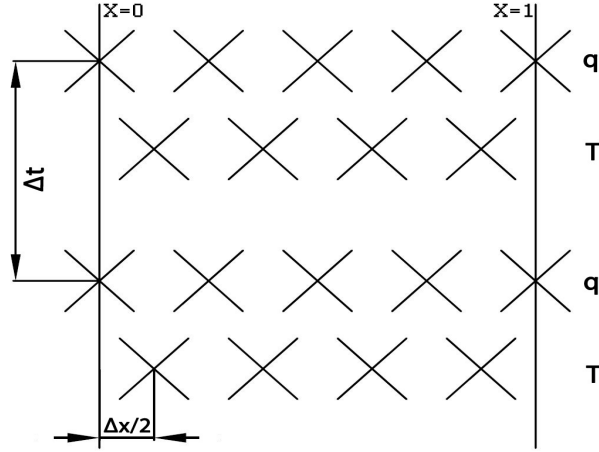
A belső energia mérlegegyenlete minden modellhez szükséges és egységes, ennek diszkretizált formája a hőmérsékletre rendezve:

$$T_j^{n+1} = T_j^n - \frac{\Delta t}{\tau_\Delta \Delta x} (q_{j+1}^n - q_j^n). \quad (77)$$

Nézzük most modellenként a konstitutív egyenleteket:

¹Másnéven Lax ekvivalencia tétele.

²Liu [55] is felhívja rá a figyelmet, hogy a különböző diszkretizációs eljárásoknak eltérő a pontossága, konvergenciájának sebessége és a rendszerre jellemző fázissebessége, melynek vizsgálata kevésbé terjedt el.



5.1. ábra. Diszkretizálási eljárás.

- **Fourier-egyenlet:**

$$q_j^{n+1} = -\frac{\tau_\Delta}{\Delta x}(T_j^n - T_{j-1}^n). \quad (78)$$

- **Guyer-Krumhansl-egyenlet:**

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\tau_q} q_j^n - \frac{\tau_\Delta \Delta t}{\tau_q \Delta x}(T_j^n - T_{j-1}^n) + \frac{\hat{a} \Delta t}{\tau_q \Delta x^2}(q_{j+1}^n - 2q_j^n + q_{j-1}^n). \quad (79)$$

Ebből az Maxwell-Cattaneo-Vernotte modell visszakapható az $\hat{a} = 0$ paraméter mellett.

- **Green-Naghdi-egyenlet:**

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\tau_\Delta \Delta t}{\tau_q \Delta x}(T_j^n - T_{j-1}^n) + \frac{\hat{a} \Delta t}{\tau_q \Delta x^2}(q_{j+1}^n - 2q_j^n + q_{j-1}^n). \quad (80)$$

- **Ballisztikus-diffúzív egyenlet:**

$$q_j^{n+1} = q_j^n - \frac{\Delta t}{\tau_q} q_j^n - \frac{\tau_\Delta \Delta t}{\tau_q \Delta x}(T_j^n - T_{j-1}^n) - \frac{\kappa \Delta t}{\tau_q \Delta x}(Q_j^n - Q_{j-1}^n), \quad (81)$$

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n - \frac{\Delta t}{\tau_Q} Q_j^n - \frac{\kappa \Delta t}{\tau_Q \Delta x}(q_{j+1}^n - q_j^n). \quad (82)$$

A ballisztikus-diffúzív modellben nem csak a hőmérséklet, de a hőáram árama is eltolt mennyiség a diszkretizáció szempontjából. A séma roppant egyszerű, időben előrelépő, térben pedig visszalépő. Ez persze csak a séma szempontjából igaz, fizikailag a diszkretizáció miatt centrális. A sémánk fő hátránya a pontossága, mivel a közelítés mindenhol elsőrendű; de előnye a roppant egyszerű felépítése és kis számításigénye.

5.2. Konzisztencia

Egy numerikus séma konzisztens, ha $\Delta x, \Delta t$ tart a nullához, úgy a numerikus megoldás is tart a pontos megoldáshoz. Ennek bizonyításához nem kell mást tenni, mint a séma egyes elemeit Taylor-sorba fejteni, majd visszahelyettesíteni a sémába.

Ezzel megkapjuk az egyes hőfizikai mennyiségekre ható numerikus („diszkrét”) operátort. Ezt kivonva az eredeti egyenlet folytonos értékkészletű operátorából nullát kell kapjunk.

Nézzük először a belső energia mérlegegyenletét; írjuk fel az eredeti egyenletet és a sémát az alábbi formákban:

$$\begin{aligned}\tau_\Delta \partial_t T + \partial_x q &= 0, \\ P_1 &= \tau_\Delta \frac{\partial}{\partial t}; \quad P_2 = \frac{\partial}{\partial x},\end{aligned}\tag{83}$$

ahol P_1 és P_2 a hőmérséklet és a hőáram operátorai.

$$\tau_\Delta \frac{T_j^{n+1} - T_j^n}{\Delta t} + \frac{q_{j+1}^n - q_j^n}{\Delta x} = 0\tag{84}$$

Fejtsük sorba a T_j^{n+1} és q_{j+1}^n tagokat az alábbi módon:

$$T_j^{n+1} = T_j^n + \Delta t \partial_t T + \frac{\Delta t^2}{2} \partial_{tt} T + O(\Delta t^3),\tag{85}$$

$$q_{j+1}^n = q_j^n + \Delta x \partial_x q + \frac{\Delta x^2}{2} \partial_{xx} q + O(\Delta x^3),\tag{86}$$

és (84) egyenletbe helyettesítve:

$$\tau_\Delta \left(\partial_t T + \frac{1}{2} \Delta t \partial_{tt} T + O(\Delta t^2) \right) + \left(\partial_x q + \frac{1}{2} \Delta x \partial_{xx} q + O(\Delta x^2) \right) = P_{1_{\Delta t, \Delta x}} T + P_{2_{\Delta t, \Delta x}} q,\tag{87}$$

ahol $P_{1_{\Delta t, \Delta x}}$ és $P_{2_{\Delta t, \Delta x}}$ diszkrét operátorok. Ezután tartassuk nullához a differencia tagokat, majd vonjuk ki az eredeti egyenletből; az eredmény nulla. A séma a léptékek csökkentésével a valós megoldáshoz tart. A séma konzisztencia rendje 1, így a konvergencia rendje is 1.

Az összes modell közül csak a GK esetre fejtjük ki a levezetést, mivel egyrészt a szerkezete megegyezik az összes többivel, illetve egyértelműen lehet belőle származtatni is a Fourier és MCV modelleket, valamint a GN egyenlettel is nagy hasonlóságot mutat. Másrészt a ballisztikus modell esetén a diszkretizálás szerkezete teljesen megegyező, ugyanolyan konzisztencia és konvergencia rend jellemző az összes sémára.

Ebben az esetben az alábbi tagok sorfejtésére van szükség:

$$T_{j-1}^n = T_j^n - \Delta x \partial_x T + \frac{1}{2} \Delta x^2 \partial_{xx} T - O(\Delta x^3),\tag{88}$$

$$q_{j-1}^n = q_j^n - \Delta x \partial_x q + \frac{\Delta x^2}{2} \partial_{xx} q - \frac{\Delta x^3}{6} \partial_x^3 q + \frac{\Delta x^4}{24} \partial_x^4 q - O(\Delta x^5),\tag{89}$$

$$q_{j+1}^n = q_j^n + \Delta x \partial_x q + \frac{\Delta x^2}{2} \partial_{xx} q + \frac{\Delta x^3}{6} \partial_x^3 q + \frac{\Delta x^4}{24} \partial_x^4 q + O(\Delta x^5),\tag{90}$$

$$q_j^{n+1} = q_j^n + \Delta t \partial_t q + \frac{1}{2} \Delta t^2 \partial_{tt} q + O(\Delta t^3).\tag{91}$$

A hőáram két tagját magasabb rendig kellett sorbafejteni a sémában szereplő másodrendű derivált miatt. Visszahelyettesítve (79) egyenletbe:

$$\begin{aligned}\tau_q \left(\partial_t q + \frac{1}{2} \Delta t \partial_{tt} q + O(\Delta t^2) \right) + q_j^n + \tau_\Delta \left(\partial_x T - \frac{1}{2} \Delta x \partial_{xx} T - O(\Delta x^2) \right) + \\ - \hat{a} \left(\partial_{xx} q + \frac{1}{12} \Delta x^2 \partial_x^4 q + O(\Delta x^4) \right).\end{aligned}\tag{92}$$

Ebből látható, hogy a másodrendű centrális derivált másodrendben pontos, de a séma legalacsonyabb rendje számít, így ennek is a konzisztencia rendje 1.

Néhány fontos megjegyzés a konzisztenciával kapcsolatban:

- Az előbbieken bemutatott levezetés a sémánk gyenge („w-consistent”) konzisztenciát bizonyítja. Konvencionális értelemben ezt szokták egy séma konzisztenciája alatt érteni. Viszont ez azzal jár, hogy a differenciaegyenleteink nem biztos, hogy örökölnék minden tulajdonságot ami a differenciálegyenletekre vonatkozik [56]. Az erős konzisztencia („s-consistent”) bizonyítása lényegesen körülményesebb. Számunkra jelenleg a gyenge konzisztencia is elegendő.
- A már említett Lax-Richtmyer ekvivalencia elv pontosabb megfogalmazása: egy kezdetiérték problémára vonatkozó lineáris parciális differenciálegyenlet vele konzisztens véges differenciákkal való közelítése konvergens, ha a séma stabil. A kezdetiérték probléma korrekt kitűzöttségű kell legyen, azaz
 - (1) létezik megoldás,
 - (2) ez a megoldás egyértelmű,
 - (3) a megoldás folytonosan függjön a kezdeti és peremfeltételektől,
 ahol az első két pont, a megoldás létezése és unicitása magában foglalja a peremfeltételek ellenőrzését is.

Azaz a konvergencia biztosításához a sémánk stabilitását még bizonyítani kell. Szimmetrikus hiperbolikus rendszerekre könnyen tudunk korrekt kitűzöttségű problémát megadni [43]. Ennek további vizsgálatát, a szükséges tételek bizonyítását és pontosabb matematikai megfogalmazását [57] részletezi.

5.3. Stabilitásvizsgálat

A numerikus séma akkor marad stabil, ha a közelítés hibája véges marad. Ennek ellenőrzésére a Neumann- és Jury-módszereket alkalmazzuk. Először nézzük a Neumann-féle eljárást közelebbről. Tételezzük fel az egyenleteink megoldását az alábbi formában:

$$\phi_j^n = \xi^n e^{ikj\Delta x}, \quad (93)$$

ahol i a képzetes egység, k a hullámszám, $j\Delta x$ a „ j ”-edik térlépés, n pedig az időlépés indexe. A séma stabil, ha a ξ növekményi faktorra igaz, hogy $|\xi| \leq 1$. Ha $|\xi| = 1$, akkor a sémát konzervatívnak nevezzük. Helyettesítsünk vissza a sémákba, kezdjük a belső energia mérlegegyenletével:

$$-T_j^{n+1} + T_j^n - \frac{\Delta t}{\tau_\Delta \Delta x} (q_{j+1}^n - q_j^n) = 0, \quad (94)$$

$$(\xi - 1)T_0 + \frac{\Delta t}{\tau_\Delta \Delta x} (e^{ik\Delta x} - 1) q_0 = 0. \quad (95)$$

Mivel két mennyiséggel, a hőmérséklettel és a hőárammal dolgozunk, ezért egy lineáris algebrai egyenletrendszerre fogunk jutni. A legegyszerűbbel, a Fourier-egyenlettel kezdjük,

$$\xi q_0 + \frac{\tau_\Delta}{\Delta x} (1 - e^{-ik\Delta x}) T_0 = 0. \quad (96)$$

Így a rendszer az alábbi formát ölti

$$\begin{pmatrix} \xi - 1 & \frac{\Delta t}{\tau_q \Delta x} (e^{ik\Delta x} - 1) \\ \frac{\tau_q \Delta}{\Delta x} (1 - e^{-ik\Delta x}) & \xi \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T_0 \\ q_0 \end{pmatrix} = 0.$$

A rendszernek akkor van triviálistól különböző megoldása, amikor az együttható mátrix determinánsa zérus. Ezáltal a rendszer $F(\xi)$ karakterisztikus polinomja a következő:

$$F(\xi) = \xi^2 - \xi - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) = 0. \quad (97)$$

Fontos észrevétel, hogy a polinomot úgy kell rendezni, hogy a legmagasabb fokú tag együtthatója pozitív legyen. A hővezetési modellek vizsgálatakor amíg a rendszer másodrendű marad, nem okoz gondot. Egyedül a ballisztikus modell harmadrendű, ott ezt feltétlen figyelembe kell venni, mivel a Jury-kritériumok alkalmazásakor relációt változtat. Továbbá megjegyzendő, hogy a Jury-kritériumok diszkrét rendszerek vizsgálatára alkalmasak, míg a közismertebb Routh-Hurwitz kritériumok folytonos rendszerekre, illetve bilineáris transzformációval diszkrét rendszerre is alkalmazható [58]. A stabilitási kritériumok szerepe, hogy a karakterisztikus polinom együtthatóiból következtethetünk a gyökeire. Amíg a gyökök a komplex számsíkon elhelyezkedő egységkörön belül vannak, addig a differenciaegyenlet egyensúlya aszimptotikusan stabil. Általános szabály, hogy „n”-ed rendű polinomhoz n+1 számú feltétel tartozik.

Most nézzük az általános Jury feltételeket:

- (1) $F(\xi = 1) \geq 0$
- (2) $F(\xi = -1) \geq 0$ ha n páros és $F(\xi = -1) \leq 0$ ha n páratlan
- (3) $|a_0| \leq a_n$, azaz ha a legmagasabb fokú tag együtthatója 1, úgy a triviális megoldás esetén is biztosítja, hogy a konstans nulladrendű tag ne legyen nagyobb egynél.

Ha ezek a feltételek teljesülnek, akkor a séma stabil és a növekményi faktorra igaz lesz, hogy $|\xi| \leq 1$. A továbbiakban csak a karakterisztikus polinomot írjuk fel és a kritérium számára utalunk.

- **Fourier-egyenlet:** a polinomot már levezettük, nézzük a kritériumokat:

- (1) $\frac{4\Delta t}{\Delta x^2} > 0$; ez minden esetben teljesül.
- (2) $1 + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2} > 0$; szintén minden paraméter kielégíti.
- (3) $\Delta t < \frac{\Delta x^2}{4}$; a harmadik Jury-kritérium feltételt szab az időlépésre nézve.

- **Guyer-Krumhansl-egyenlet:** tekintsük a polinomot az $a_2\xi^2 + a_1\xi + a_0 = 0$ alakban, ahol

$$\begin{aligned} a_2 &= 1, \\ a_1 &= \frac{\Delta t}{\tau_q} - 2 - \frac{\hat{a}\Delta t}{\tau_q \Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2), \\ a_0 &= 1 - \frac{\Delta t}{\tau_q} + \frac{\hat{a}\Delta t}{\tau_q \Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) - \frac{\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2). \end{aligned}$$

A $\cos(k\Delta x) = -1$ érték jelenti a szélsőértéket, minden esetben ezt vesszük alapul. Ezt figyelembe véve a kritériumokra kapjuk, hogy:

- (1) $\frac{4\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2} > 0$;
- (2) $\frac{\Delta x^2}{4} \left(\frac{2\tau_q}{\Delta t} - 1 \right) + \frac{\Delta t}{2} > \hat{a}$.
- (3) Az abszolút érték miatt két feltételt kapunk; $\Delta t - \frac{\Delta x^2}{4} < \hat{a}$.

A másik kritérium pedig $\frac{\Delta x^2}{4} \left(\frac{2\tau_q}{\Delta t} - 1 \right) + \Delta t > \hat{a}$, mely gyengébb, mint a 2. pontban leírt, mivel $\frac{\Delta t}{2} < \Delta t$.

A MCV-egyenletre vonatkozó feltételt $\hat{a} = 0$ mellett kapjuk meg.

- **Green-Naghdi-egyenlet:** a konstitutív egyenletből a GK esethez képest hiányzik a hőáram nulladrendű deriváltja, így nem meglepő, hogy a $\frac{\Delta t}{\tau_q}$ paraméter fog hiányozni a polinom együtthatóiból, azaz:

$$a_2 = 1,$$

$$a_1 = -2 - \frac{\hat{a}\Delta t}{\tau_q \Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2),$$

$$a_0 = 1 + \frac{\hat{a}\Delta t}{\tau_q \Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2) - \frac{\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2} (2 \cos(k\Delta x) - 2).$$

Így a stabilitás feltételei:

- (1) $\frac{4\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2} > 0$; vagyis ez egyezik a GK esettel.
- (2) $\frac{\tau_q \Delta x^2}{2\Delta t} + \frac{\Delta t}{2} > \hat{a}$.
- (3) Az abszolút érték miatt most is két feltételt kapunk; $\Delta t < \hat{a}$ feltétel kizárja az $\hat{a} = 0$ esetet, ami összhangban áll a termodinamikai feltételekkel is.

A másik kritérium pedig $\frac{\tau_q \Delta x^2}{2\Delta t} + \Delta t > \hat{a}$; most is ez a gyengébb, mivel $\Delta t > \frac{\Delta t}{2}$.

- **Ballisztikus-diffúzív egyenlet:** a rendszer 3 egyenletből áll, így a polinom is harmadfokú, együtthatói a következők.

$$a_3 = 1$$

$$a_2 = \frac{\Delta t}{\tau_q} + \frac{\Delta t}{\tau_Q} - 3$$

$$a_1 = \frac{\Delta t^2}{\tau_q \tau_Q} + 3 - \frac{2\Delta t}{\tau_q} - \frac{2\Delta t}{\tau_Q} - \left(\frac{\kappa^2 \Delta t^2}{\tau_q \tau_Q \Delta x^2} + \frac{\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2} \right) (2 \cos(k\Delta x) - 2)$$

$$a_0 = \frac{\Delta t}{\tau_q} + \frac{\Delta t}{\tau_Q} - \frac{\Delta t^2}{\tau_Q \tau_q} - 1 + \left(\frac{\kappa^2 \Delta t^2}{\tau_q \tau_Q \Delta x^2} - \frac{\Delta t^2}{\tau_q \Delta x^2} \left(\frac{\Delta t}{\tau_Q} - 1 \right) \right) (2 \cos(k\Delta x) - 2)$$

Az eddig szokásos követelményeken kívül szükség van még egy negyedik követelményre is, mégpedig:

$$|b_0| > |b_2|, \text{ ahol } b_0 = \begin{vmatrix} a_0 & a_3 \\ a_3 & a_0 \end{vmatrix} \text{ és } b_2 = \begin{vmatrix} a_0 & a_1 \\ a_3 & a_2 \end{vmatrix}.$$

Jól láthatóan nagyon gyorsan elbonyolódnak a kritériumok, ennél az esetnél a numerikus kiértékelés javallott. Az első 3 kritériumot még le lehet vezetni analitikusan, de a formulák nem olyan átláthatóak ahogy eddig, nem szolgáltatnak többlet információt, ezért ezek közlésétől eltekintünk.

Ezzel a stabilitásvizsgálat végére értünk, a sémák konvergenciája biztosított.

6. FEJEZET

Megoldások és összehasonlítások

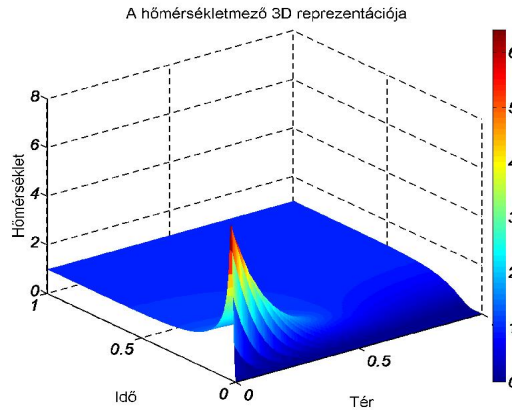
Ebben a fejezetben bemutatjuk, hogy az egyenletekben szereplő paraméterek milyen hatást gyakorolnak a megoldásokra. A rendszerek fontos tulajdonsága, hogy a paraméterek bizonyos együttállásakor vagy akár a köztük lévő nagyságrendi különbség hatására visszakapjuk a Fourier-egyenlet megoldását. Olyan kvalitatív analízist folytatunk, melyre kísérletet lehet tervezni, vagyis olyan különbségeket keresünk, mely kísérletileg is megfogható. A megoldások elemzését a Fourier-egyenlettel kezdjük, ez egy standard karakterisztikát fog jelenteni, az ettől való eltéréseket fogjuk keresni.

6.1. A Fourier-egyenlet megoldásai

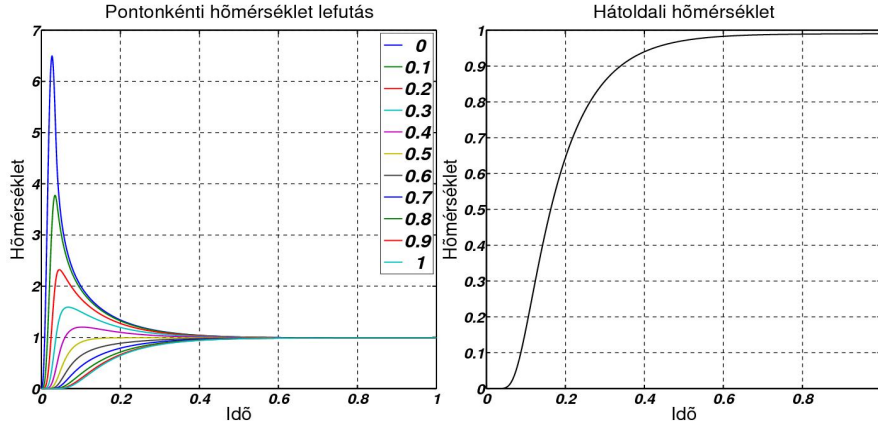
Ha a dimenziótlan, hőmérsékletre rendezett (98) Fourier-egyenletet vizsgáljuk, akkor láthatóan az egyenlet nem tartalmaz paramétert. Kizárólag a peremfeltételben jelenik meg a rendszer egyetlen időparamétere amitől a megoldás függ: a τ_Δ impulzushossz. Az egyenlet:

$$\partial_t T = \partial_{xx} T. \quad (98)$$

Felhívjuk rá a figyelmet, hogy ezzel a dimenziótlanítással maga τ_Δ tartalmazza a szükséges anyagi paramétereket, amiből mindent vissza lehet számolni egy esetleges illesztés során. A legtöbb megoldás esetén a $\tau_\Delta = 0.04$ értékkel fogunk dolgozni Cziel és munkatársai [47] alapján, ez alól csak a ballisztikus modell lesz kivétel. Itt emeljük ki, hogy egyetlen hőmérsékletre rendezett egyenlet sem tartalmazza ilyen formában a τ_Δ paramétert. A megoldásokat a 6.1. és 6.2. ábrák mutatják.



6.1. ábra. A hőmérsékletmező 3D reprezentációja a Fourier-egyenlet megoldásánál.



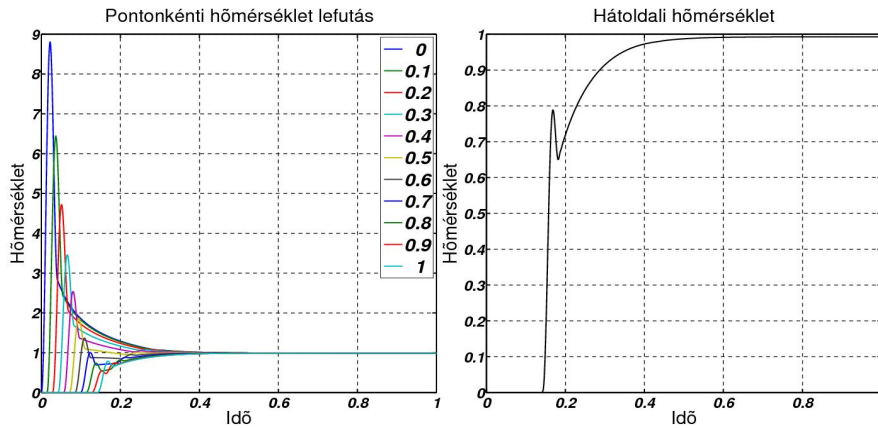
6.2. ábra. Fourier-egyenlet megoldása $\tau_\Delta = 0.04$ paraméterrel. A többi egyenlet megoldását ezzel hasonlítjuk össze.

6.2. A Maxwell-Cattaneo-Vernotte-egyenlet megoldásai

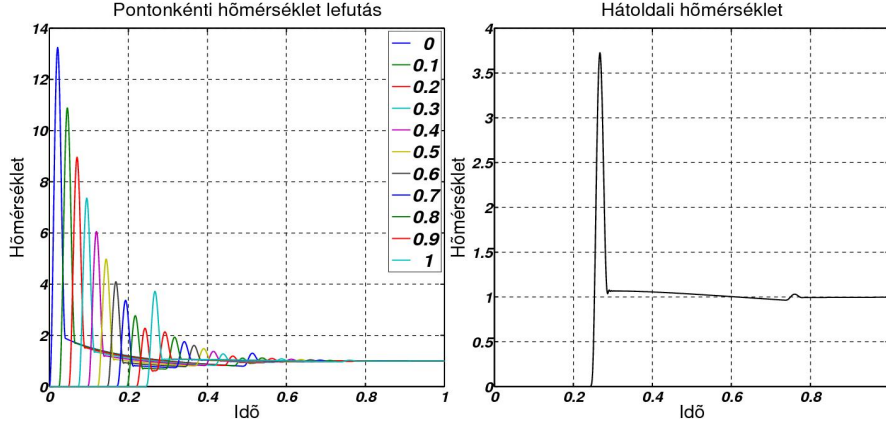
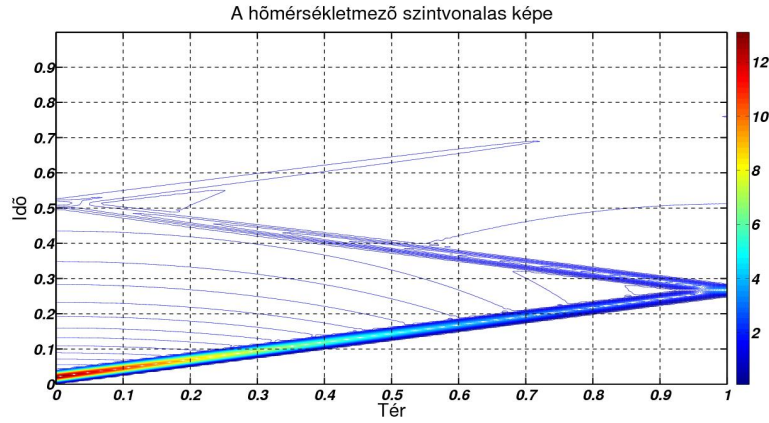
A Fourier-egyenlet kiegészül egy időderiválttal, ennek megfelelően a hővezetést csillapított hullámterjedés formájában írja le:

$$\tau_q \partial_{tt} T + \partial_t T = \partial_{xx} T. \quad (99)$$

A τ_q ha tart a nullához, akkor tartunk a Fourier-egyenlet megoldásához. Ha viszont egyre nagyobb a τ_q paraméter, annál inkább erősödik a megoldás hullámjellege (6.3., 6.4., 6.5. ábrák) és egy másodrendű hullámegyenlet megoldásához (disszipáció mentes GN-egyenlet) tart. Megfigyelhető még, hogy a τ_q paraméter növelésével a jelterjedési sebesség csökken.



6.3. ábra. MCV-egyenlet megoldása $\tau_\Delta = 0.04$ és $\tau_q = 0.02$ paraméterekkel. A jobboldali ábrán már jól megfigyelhető a hullámszerű terjedés, valamint helyesen visszakaptuk a rendszer karakterisztikus $\frac{1}{\sqrt{\tau_q}}$ jelterjedési sebességét.

6.4. ábra. MCV-egyenlet megoldása $\tau_\Delta = 0.04$ és $\tau_q = 0.06$ paraméterekkel.6.5. ábra. MCV-egyenlet megoldása szintvonalas ábrázolásban $\tau_\Delta = 0.04$ és $\tau_q = 0.06$ paraméterekkel. A hőimpulzus visszaverődik, majd kisimul.

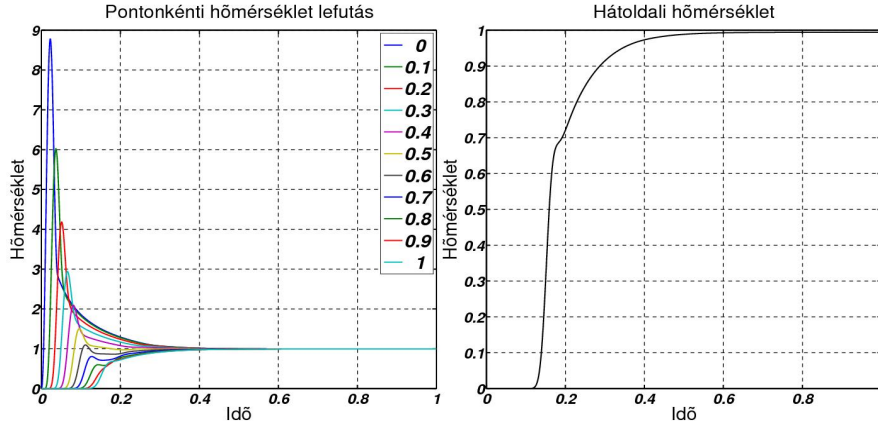
6.3. A Guyer-Krumhansl-egyenlet megoldásai

Ahogy eddig is láttuk, $\hat{a} = 0$ paraméter visszaadja a MCV-egyenletet, így ezzel itt már nem foglalkozunk. Ahogy ezt a paramétert növeljük, úgy egyre disszipatívabb a rendszer, nő a csillapítás (6.6. ábra). Az alábbi, (100) hőmérsékletre rendezett egyenletben érdemes észrevennünk, hogy nem csak az eredeti Fourier-egyenlet, hanem annak az időderiváltja is benne van:

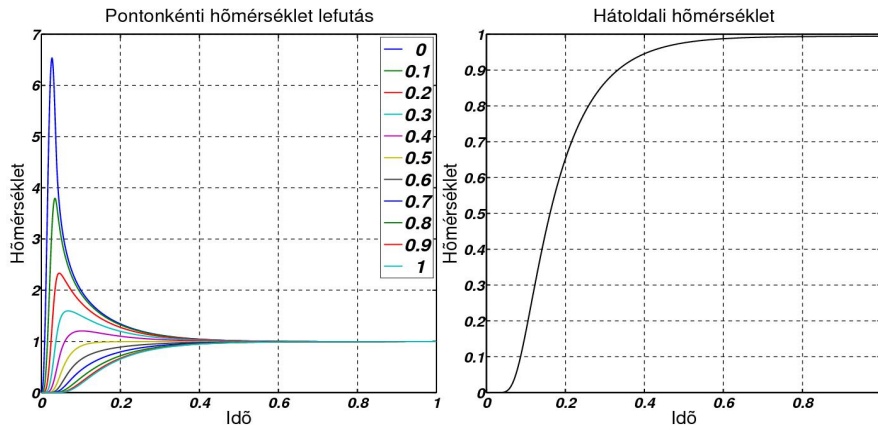
$$\tau_q \partial_{tt} T + \partial_t T = \partial_{xx} T + \hat{a} \partial_{txx} T. \quad (100)$$

Ebből következően, ha $\tau_q = \hat{a}$, akkor olyan egyenlethez jutunk, mely pontosan a Fourier-egyenlet megoldását adja vissza (6.7. ábra).

Ha tovább növeljük a disszipációs paramétert, akkor a rendszer túlszillapítottá válik, melynek érdekessége, hogy megnő a jelterjedési sebesség (6.8. ábra). Figyeljük meg, hogy ez a tapasztalatunk összhangban áll a diszperziós relációból számolt csoportsebességgel.



6.6. ábra. GK-egyenlet alulcsillapított (MCV-jellegű) megoldása $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 0.02$; $\hat{a} = 0.001$ paraméterekkel. A jobboldali ábrán a hullámszerű terjedés még kivehető.



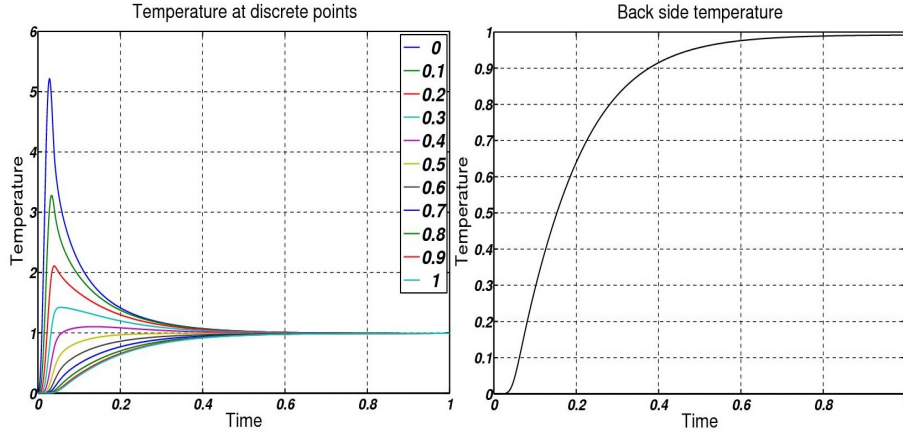
6.7. ábra. GK-egyenlet Fourier-jellegű megoldása $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = \hat{a} = 0.02$ paraméterekkel. Ekkor pontosan a 6.2. ábrán látható megoldást kapjuk vissza.

6.4. A Green-Naghdi-egyenlet megoldásai

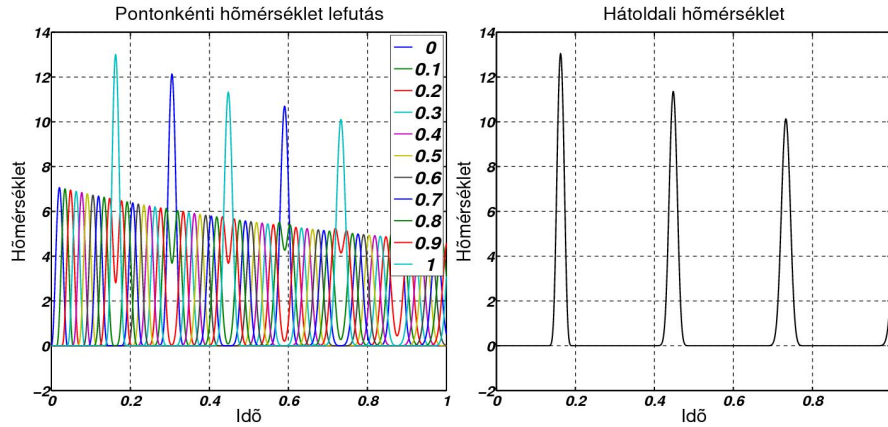
Bár a konstitutív egyenletből nem látszik, a hőmérsékletre rendezett (101) formából láthatóan csillapított hullámegyenlettel van dolgunk. Amennyiben $\hat{a} = 0$, úgy a rendszer disszipációmentes, azonban ezt az esetet a termodinamikai feltételek kizárják. A hőmérsékletre rendezett GN-egyenlet:

$$\tau_q \partial_{tt} T = \partial_{xx} T + \hat{a} \partial_{ttx} T. \quad (101)$$

A 6.9. ábra egy gyengén csillapított megoldást mutat. A hőmérsékletcsúcsok a hullám visszaverődését szemléltetik, melyet a szintvonalas (6.10. ábra) reprezentációval jobban meg lehet érteni.



6.8. ábra. GK-egyenlet túlszillapított megoldása $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 0.02$; $\hat{a} = 0.04$ paraméterekkel. A hőmérséklet hamarabb kezd emelkedni, mint a Fourier-egyenlet esetében (6.2. és 6.7. ábrák).



6.9. ábra. GN-egyenlet megoldása $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 0.02$; $\hat{a} = 10^{-4}$ paraméterekkel. Jól kivehető a hullám visszaverődése és gyengülése.

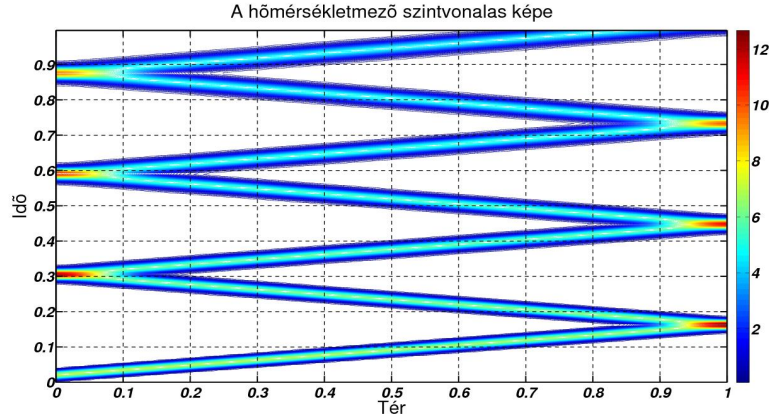
Láthatóan a hullám kezd kiszélesedni, vagyis a hullám energiája eloszlik a térben az idő múlásával. Kis mértékű csillapítás esetén az eddigi megoldások karakterisztikus idejéhez¹ mérten elég sokáig tart.

A 6.11. és 6.12. ábrák egy olyan megoldást mutatnak, ahol a csillapítás mértéke az előzőnél jóval nagyobb, a hullám gyorsan disszipálódik a térben.

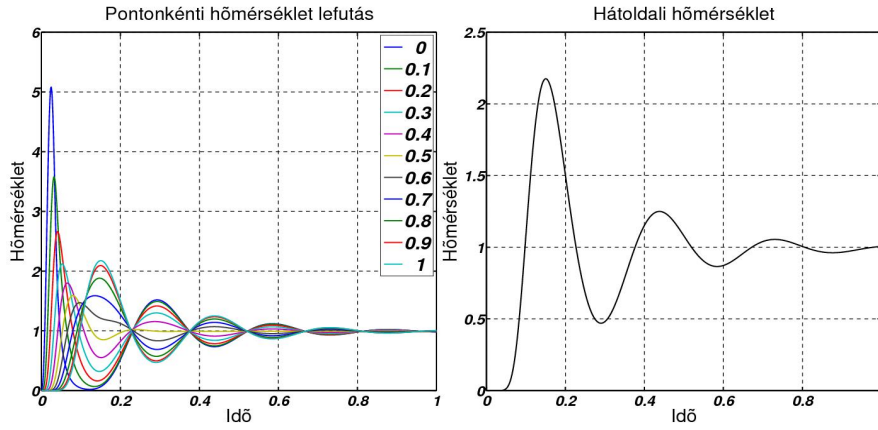
Ha párhuzamosan növeljük a τ_q és $\hat{a}$ paramétereket, melyeknek ugyanolyan értéket adunk, akkor kezdjük közelíteni a Fourier-egyenlet megoldását, ezek eredményét a 6.13. és 6.14. ábrák szemléltetik.

Ha a τ_q paramétert változatlanul hagyjuk és csak az $\hat{a}$ paramétert növeljük, úgy egy túlszillapított hullámot kapunk, mely gyorsan eléri az állandósult állapotát és gyorsan terjed (6.15. ábra).

¹Az eddig tapasztalt megoldásoknál az időintervallum 0-tól 1-ig tartott, ekkorra már a rendszer majdnem minden esetben elérte a stacionárius állapotát. Ebben az esetben pedig egy nagyságrenddel több időre van szükség.



6.10. ábra. GN-egyenlet megoldása szintvonalas ábrázolásban $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 0.02$; $\hat{a} = 10^{-4}$ paraméterekkel.



6.11. ábra. GN-egyenlet megoldása $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 0.02$; $\hat{a} = 0.02$ paraméterekkel.

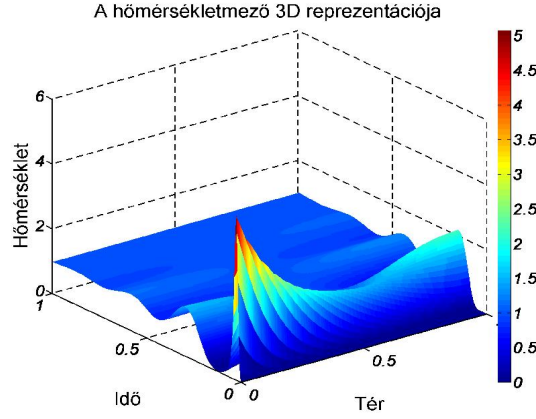
6.5. A ballisztikus-diffúzív egyenlet megoldásai

Fontos felhívni rá a figyelmet, hogy a hierarchikus rendszer továbbiakban részletezett vizsgálatakor nem vettünk számításba minden paramétert, azaz leegyszerűsítettük a rendszert. Az itt bemutatott ballisztikus-diffúzív modell hőmérsékletre rendezett alakja a következő:

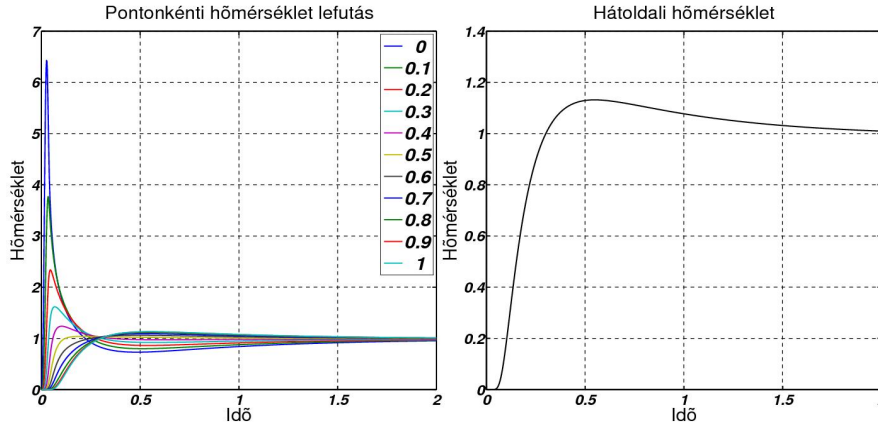
$$\tau_Q \tau_q \partial_{ttt} T + (\tau_Q + \tau_q) \partial_{tt} T + \partial_t T = \partial_{xx} T + (\tau_Q + \kappa^2) \partial_{txx} T. \quad (102)$$

Mint látható, tartalmazza a Fourier-egyenletet, de felfogható a GK-egyenlet egy memória kiterjesztéseként is. A τ_Q idő paraméter nem csak a harmadrendű időderivált együtthatójaként jelenik meg, hanem másik két tagnál is szerepel. Továbbá érdemes észrevenni, hogy a csatolási paraméterek az $\hat{a}$ paraméterhez hasonlóan a disszipációt erősítik. Ebből láthatóan reprodukálni lehet az eddig tárgyalt modellek megoldásait, viszont nem csak egyszerű paraméter beállítások mellett, nem elég egyszerűen egyenlővé tenni két paramétert a τ_Q miatt.

6.5.1. Fourier-típusú megoldások



6.12. ábra. A hőmérsékletmező 3D reprezentációja a GN-egyenlet $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 0.02$; $\hat{a} = 0.02$ paraméterekkel való megoldásánál.



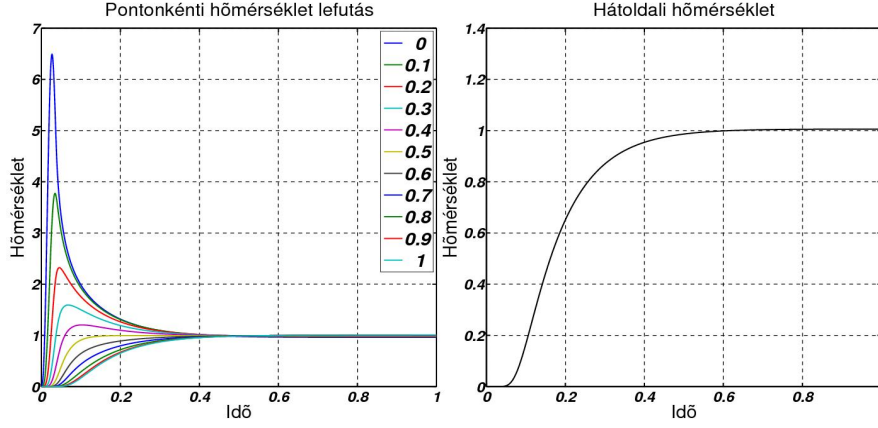
6.13. ábra. GN-egyenlet megoldása $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 0.8$; $\hat{a} = 0.8$ paraméterekkel.

- „Kicsinek” választva a τ_Q ; τ_q ; κ paramétereket, példaként legyen $\tau_Q = \tau_q = \kappa = 0.001$, úgy az egyenletünk az eredeti Fourier-egyenlethez tart (6.16. ábra).
- Az előző esettől eltérően legyen most a τ_Q lényegesen nagyobb. Ekkor a GK-megoldás által is reprodukált, az eredeti Fourier-egyenlet időderiváltjának a megoldása is szerepet játszik és szintén Fourier-típusú lefutást tapasztalhatunk (6.17. ábra).
- A ballisztikus-diffúzív modell bevezetésekor² tárgyalt okok miatt a harmadik Fourier-féle megoldás nem reprodukálható.

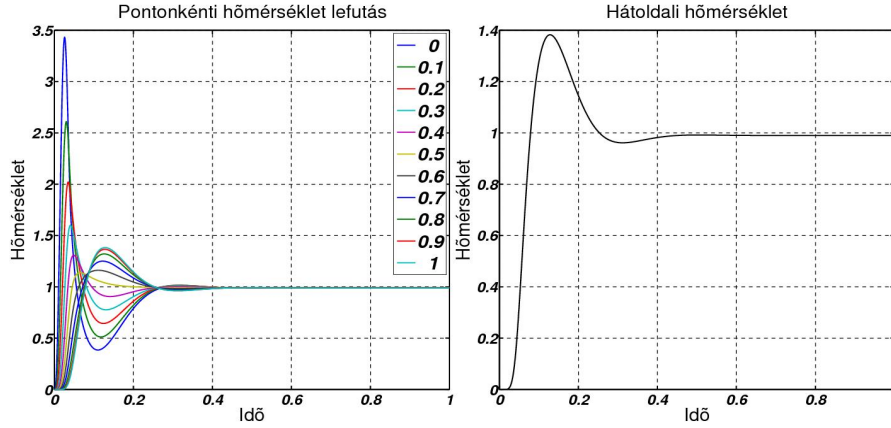
6.5.2. MCV-típusú megoldások Ha az egyenlet rendszerben megszüntetjük a csatolást a hőáram és a hőáram árama között, vagyis $\kappa = 0$, akkor a két mennyiség teljesen független lesz egymástól, a jelterjedés így független lesz a τ_Q paramétertől³ is, és tisztán MCV megoldásokat tudunk reprodukálni (6.18. ábra).

²Lásd: A hővezetési elmélet általánosítása, a hierarchikus rendszer című fejezetet.

³Lásd a hiperbolicitás fejezetet.



6.14. ábra. GN-egyenlet Fourier-jellegű megoldása $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 10$; $\hat{a} = 10$ paraméterekkel.



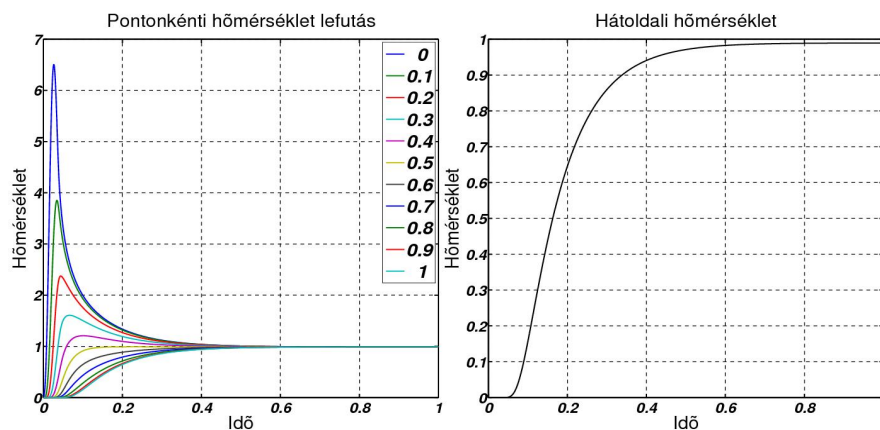
6.15. ábra. GN-egyenlet megoldása $\tau_\Delta = 0.04$; $\tau_q = 0.02$; $\hat{a} = 0.06$ paraméterekkel.

6.5.3. GK-típusú megoldások Legyen $\tau_Q \ll \tau_q$, ekkor a harmadrendű idő-derivált együtthatója is kicsi marad, a vegyes derivált tag együtthatóinál pedig legyen $\kappa = 0.25$, így igaz lesz, hogy $\kappa^2 \gg \tau_Q$. Mivel a keresztcsatolási paraméterek szerepe hasonló a GK-egyenletben látott $\hat{a}$ disszipációs paraméterhez, így ezzel közelítjük ezt a fajta karakterisztikát. Ebben az esetben egy túlszillapított esetet szemléltetünk a 6.19. ábrán.

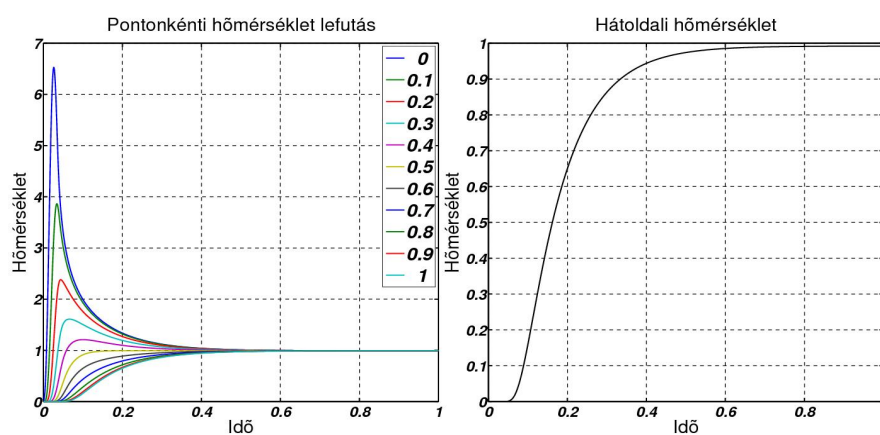
Hasonló elgondolással egyéb GK-típusú megoldásokat is reprodukálni lehet.

6.5.4. GN-típusú megoldás Hasonló jellegű hullámterjedés is reprodukálható ahhoz, amit a GN-egyenlet megoldásainál is láttunk a $\tau_q = 0.7$; $\tau_Q = 15$; $\kappa = 9$; $\tau_\Delta = 0.04$ paramétereket mellett, melyeket a 6.20. és 6.21. ábrák szemléltetnek.

6.5.5. Ballisztikus megoldások Ezalatt az 2.1. ábrán látható karakterisztikát értjük, azaz tipikusan olyan megoldásokat keresünk, ahol a két hőmérsékletcsúcs

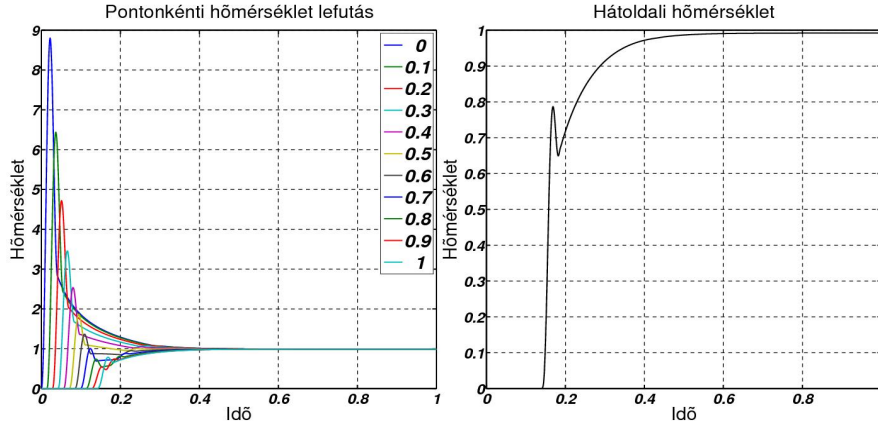


6.16. ábra. A ballisztikus egyenlet Fourier-jellegű megoldása $\tau_Q = \tau_q = \kappa = 0.001$ paraméterekkel.

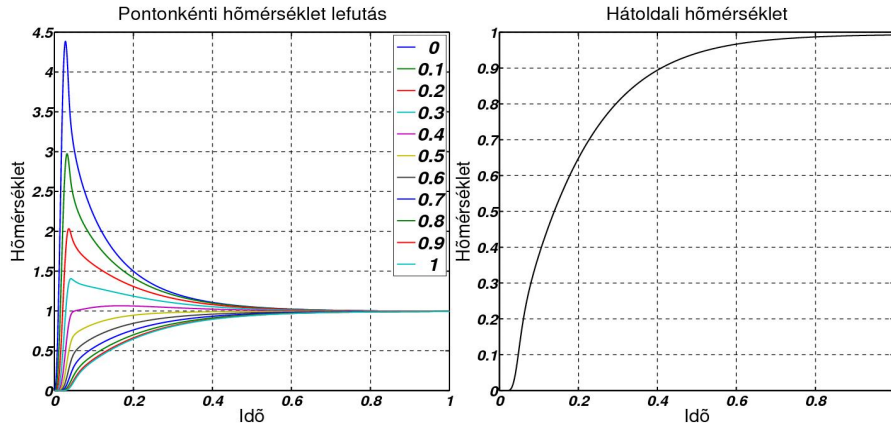


6.17. ábra. A ballisztikus egyenlet Fourier-jellegű megoldása $\tau_Q = 1; \tau_q = \kappa = 0.001$ paraméterekkel.

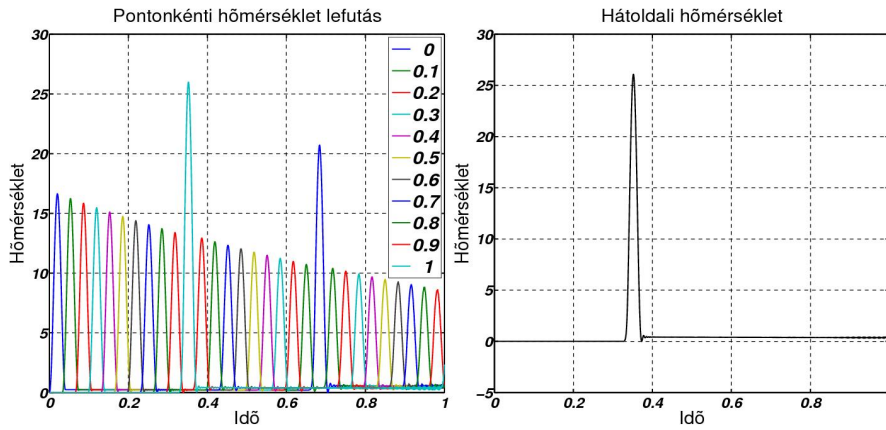
jelen van. Itt fontos szerepet játszik a lézerimpulzus hossza, mivel jelentősen befolyásolja a ballisztikus jel meglétét, erre példát a következő két ábra, a 6.22. és a 6.23. mutatnak.



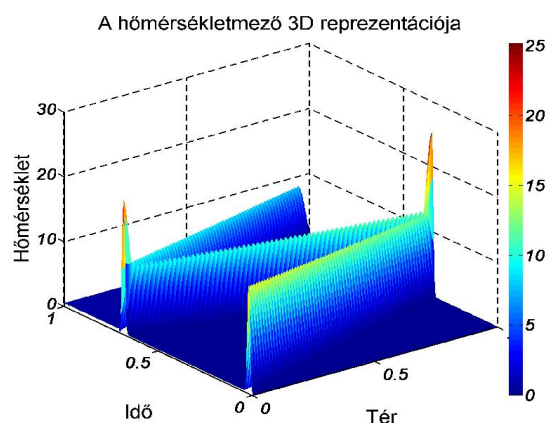
6.18. ábra. A ballisztikus egyenlet MCV-jellegű megoldása $\tau_q = 0.02$; $\kappa = 0.001$ paraméterekkel.



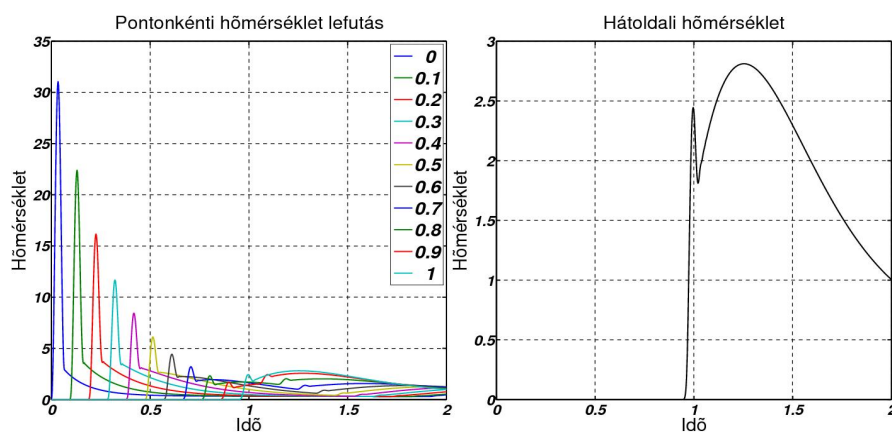
6.19. ábra. A ballisztikus egyenlet GK-jellegű megoldása $\tau_q = 0.02$; $\tau_Q = 0.001$; $\kappa = 0.25$ paraméterekkel.



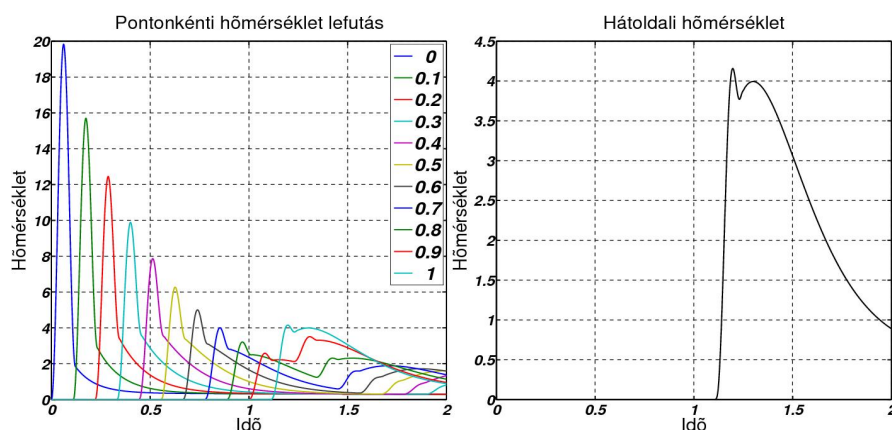
6.20. ábra. A ballisztikus egyenlet GN-jellegű megoldása $\tau_q = 0.7$; $\tau_Q = 15$; $\kappa = 9$; $\tau_\Delta = 0.04$ paraméterekkel.



6.21. ábra. A hőmérsékletmező 3D reprezentációja a ballisztikus egyenlet $\tau_q = 0.7$; $\tau_Q = 15$; $\kappa = 9$; $\tau_\Delta = 0.04$ paraméterekkel való GN-jellegű megoldásánál.



6.22. ábra. A ballisztikus egyenlet ballisztikus-diffúzív megoldása $\tau_q = 1.9$; $\tau_Q = 0.07$; $\kappa = 0.28$; $\tau_\Delta = 0.065$ paraméterekkel.



6.23. ábra. A ballisztikus egyenlet ballisztikus-diffúzív megoldása $\tau_q = 1.9$; $\tau_Q = 0.07$; $\kappa = 0.2$; $\tau_\Delta = 0.12$ paraméterekkel.

7. FEJEZET

Kísérletek

7.1. Ballisztikus modellek összehasonlítása a kísérletekkel

Ebben az alfejezetben a NaF kísérletet vetjük össze 3 elmélettel:

- (1) Dreyer és Struchtrup kinetikus elméleti modellje [4],
- (2) Yanbao Ma által használt komplex viszkozitás modell [21, 24],
- (3) Kontinuum termodinamikai úton származtatott ballisztikus-diffúzív modell [34].

A fenti modellekben közös, hogy mind a NaF kísérletek alapján mérik a modell „jóságát”, azonban különböző részletekre helyezik a hangsúlyt. Amíg Dreyer és Struchtrup a kvalitatív reprezentációra helyezi a hangsúlyt, addig Ma már kvantitatív egyezést kap. A dimenziótlanítást a NaF 13 K hőmérsékleten jellemző anyagi paramétereire [59] végezzük el, melyek az alábbiak:

$$\rho = 2866 \frac{kg}{m^3}; \quad c = 2.774 \frac{J}{kgK}; \quad \lambda = 20500 \frac{W}{mK}, \quad (103)$$

ahol ρ a sűrűség, c a fajhő és λ a hővezetési tényező. Dreyer és Struchtrup más lézerimpulzus szélesség (Δt_1) és minta szélesség (L_1) paramétereket használ, mint Ma (Δt_2 és L_2) a Jackson - Walker kísérletek reprodukálására, pont az előbb említett eltérés miatt, de nagyságrendileg megegyeznek.

$$\Delta t_1 = 10^{-7}s; \quad L_1 = 6.26mm; \quad \Delta t_2 = 2.4 \cdot 10^{-7}s; \quad L_2 = 7.9mm \quad (104)$$

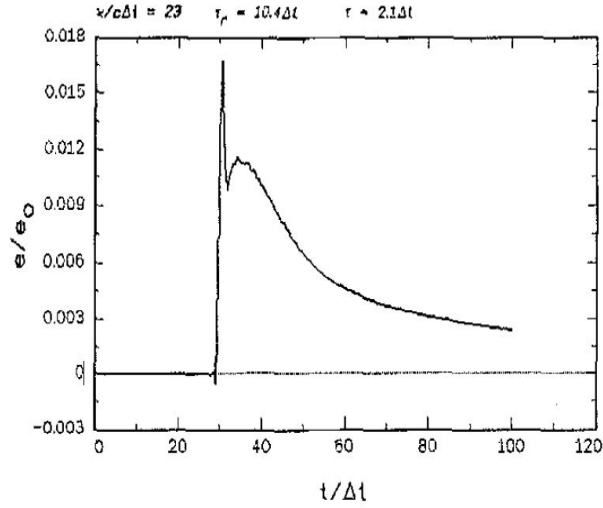
Ezek alapján a teljes dimenziótlanítás elvégezhető. A cikkekben adottak a relaxációs idők, a κ paramétert pedig a megfelelő jelterjedési sebességhez kell állítani¹. Először nézzük a Dreyer - Struchtrup kinetikus modelljével való összevetést. A karakterisztika aminek a reprodukálása a célunk, a 7.1. ábrán látható.

A 7.2. ábra mutatja a mi eredményünket. A kinetikus elmélettel való összevetés megmutatja, hogy a közegre jellemző hangsebességet az alábbi összefüggés adja meg dimenziós és dimenziótlan formában:

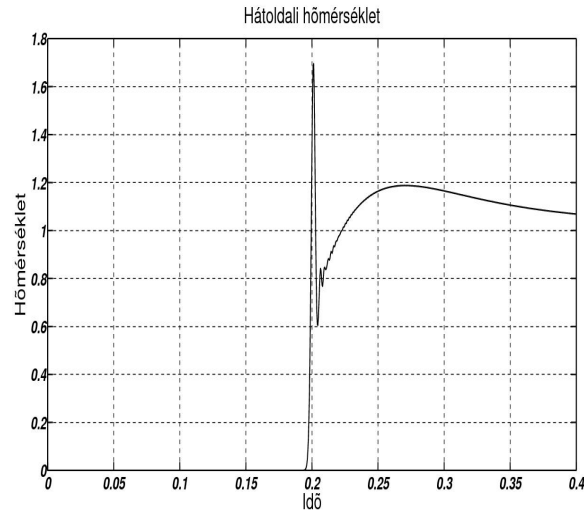
$$c = \sqrt{\frac{3\alpha}{\tau_q}}; \quad \hat{c} = \sqrt{\frac{3}{\hat{\tau}_q}}, \quad (105)$$

ahol c a dimenziós, $\hat{c}$ a dimenziótlan hangsebesség, α a hődiffúzitás, mely az anyagi paraméterek alapján szintén adott, τ_q pedig a hőáramhoz tartozó relaxációs idő. Ezt felhasználva a hangsebesség értéke $c = 2724.3 \frac{m}{s}$. Ezáltal a κ paramétert be lehet állítani oly módon, hogy visszacapjuk a hangsebességet. Fontos újra megemlíteni, hogy a kinetikus elmélet csak $N = 30$ egyenlet mellett adja vissza helyesen a terjedési sebességet, nekünk is ehhez kell igazodni ha Dreyer és Struchtrup eredményét szeretnénk reprodukálni. A κ paramétert az alapján állítottuk be, hogy a

¹Ebből a szempontból a hiperbolicitás vizsgálata alapvető jelentőségű.



7.1. ábra. Dreyer és Struchtrup által megoldott kinetikus modell a $\tau_R = 10.4\Delta t$; $\tau = 2.1\Delta t$ dimenziós paraméterekkel, ahol Δt az impulzus szélessége [4].



7.2. ábra. A mi modellünk megoldása a $\tau_q = 0.068$; $\tau_Q = 0.0137$; $\kappa = 0.102$; $\tau_\Delta = 0.0065$ dimenziótlan paraméterekkel.

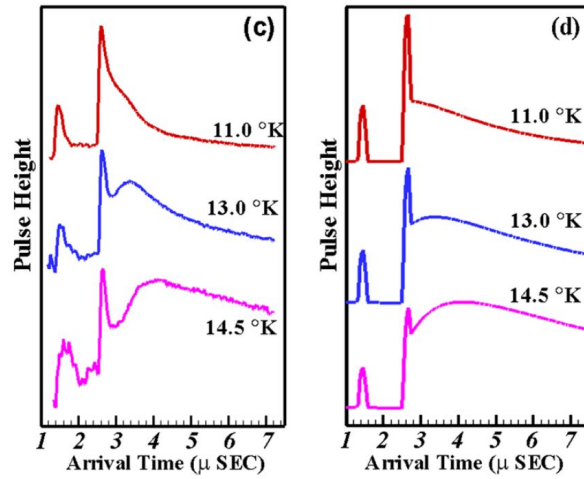
megfelelő dimenziótlan időpontban érzékeljük a ballisztikus jelet, ebben az esetben ez $Fo = 0.196$. Összegezve a paramétereinket:

$$\tau_q = 0.068; \tau_Q = 0.0137; \kappa = 0.102; \tau_\Delta = 0.0065. \quad (106)$$

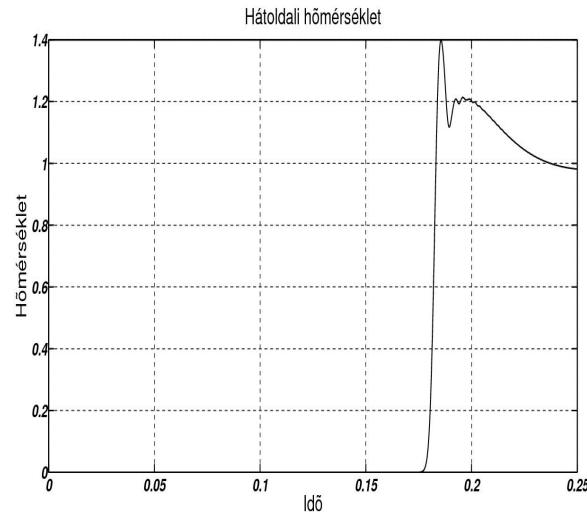
A modellünk reprodukálja Dreyer és Struchtrup jelterjedési sebességeit [4].

Nézzük most Yanbao Ma adatait [24]. Megadja a relaxációs idő adatokat, valamint a hangsebességet is amivel számol:

$$\tau_R = 0.937\mu s; \tau_N = 0.338\mu s; \rightarrow \tau_Q = 0.248\mu s; c = 3187 \frac{m}{s}. \quad (107)$$



7.3. ábra. Yanbao Ma illesztése; baloldali képen a mért eredmények, a jobboldali képen pedig az illesztett görbéi láthatóak [24]. Ezek közül számunkra a kék színnel jelzett, 13 K-hez tartozó görbe a releváns.



7.4. ábra. A ballisztikus-diffúzív modell illesztése a $\tau_q = 0.039$, $\tau_Q = 0.007$, $\tau_\Delta = 0.01$, $\kappa = 0.04$ paraméterekkel. A görbe karakterisztikája helyes, de a ballisztikus terjedési sebesség nem egyezik, $Fo = 0.12$ -nél kellene kezdődjön a felfutás.

A 7.3. ábra Ma eredményeit mutatja, melyek közül a 13 K-hez tartozó görbét kell támpontnak vennünk. A ballisztikus-diffúzív modellel történő illesztés eredményét a 7.4. ábra mutatja. A görbe karakterisztikája egyezik a mért adatokkal, ellenben a terjedési sebességet nem helyesen adta vissza. A dimenziós paramétereink:

$$\tau_q = 0.937 \mu s; \tau_Q = 0.168 \mu s; c = 1849 \frac{m}{s}. \quad (108)$$

Sem a Dreyer-Struchtrup modellben, sem Ma modelljében nem egyértelmű a hátoldali peremfeltétel. Az általunk használt adiabatikus peremfeltétel helyett nem világos, hogy a kísérleti feltételeknek mi felelne meg jobban.

7.2. További alkalmazások

- A ballisztikus-diffúzív modellek alkalmazása nem korlátozódik az alacsony hőmérsékletű hővezetési jelenségek leírására. Fontos alkalmazási területet képviselnek a nanométer méretű elektromos eszközök is. A hőelektromos hatás együtt jár a hővezetési tényező változásával is, ami nagyban befolyásolhatja az eszköz hatásfokát, működőképességét [60].
- A kinetikus modellel való összevetés megmutatta, hogy a közegre jellemző hangsebesség a hővezetési tényezővel is kapcsolatban áll. Mechanikai alakváltozások figyelembevételével a helyzet tovább bonyolódik, a viszkozitás is szerepet fog játszani [61].
- Figyelmet érdemel a Knudsen-szám függő hővezetési együtthatóval való leírásmód. Amikor a minta karakterisztikus hossza egy nagyságrendbe esik a közepes szabad úthosszal², akkor a ballisztikus terjedés játszik szerepet. Alvarez és Jou megmutatták [62], hogy a Knudsen-szám hővezetési együtthatóban történő figyelembevétele a MCV-egyenletben jobb közelítést eredményez, mint a szokásos megoldásai a MCV-egyenletnek. Ekkor Chen [13] cikkében említett hőáramoscilláció megszüntethető, továbbá a Fourier-egyenlet helyett a ballisztikus-diffúzív modellhez fog konvergálni a hőáram nagy időintervallumot tekintve.

7.3. Az EGR-kísérlet kiértékelése

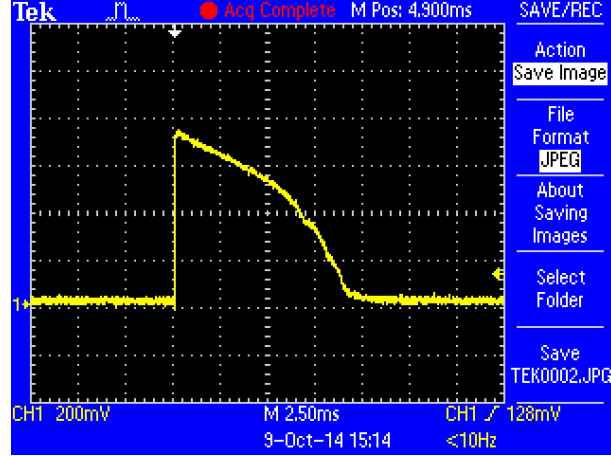
Előzetes mérések alapján 2014. június 3-án az Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszéken Both Soma (mérés), Gróf Gyula (kalibráció) és Ván Péter (minta előkészítés és mérés) végeztek kísérleteket makroszkópikus nem-Fourier hővezetés észlelése céljából.

Fourier-jellegű hőterjedéstől várhatóan nem csak akkor tapasztalhatunk eltérést, ha alacsony, néhány K hőmérsékleten vizsgáljuk az anyag tulajdonságait, hanem inhomogén összetételű anyagok esetén is [63, 64, 65]. A modelljeink effektívek, vagyis az egyenletekben szereplő anyagi paramétereink összességében jellemzik az anyag inhomogenitását is. A kísérletekhez elsősorban réteges szerkezetű minták készültek, mivel ezeket könnyebb legyártani és a komponensek is ismertek. Több kísérlet készült, ezek közül most csak egyet nézünk meg részletesebben.

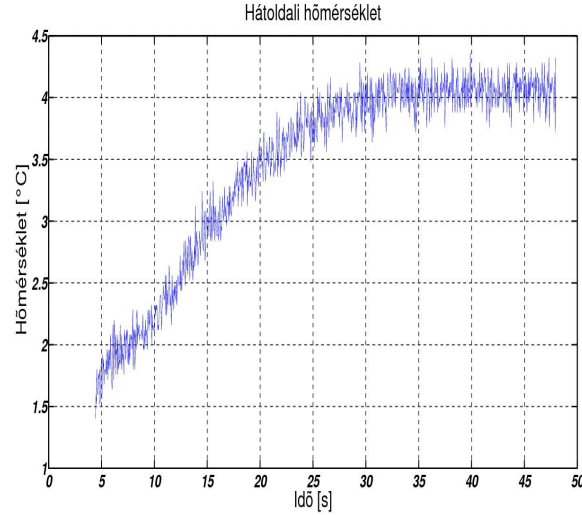
Ez a minta 16 rétegből áll, összesen 8 réteg, 180 g-os papír és 8 réteg alumínium fólia követi egymást felváltva, a minta teljes vastagsága 3,35 mm. A kísérlet felépítése megfelel az eddig tárgyalt numerikus szimulációknak. Az alábbi, 7.5. ábrán látható az impulzus alakja, mely bár eltér a szimulációkban alkalmazottól, a peremfeltételek tárgyalásánál említett okok miatt alkalmazható. A 7.6. ábrán a mért hőmérséklet látható az idő függvényében. Mivel ez a görbe a trigger jeltől indul, így a szimulációval való összevetéshez az origóba kell tolni. Következő lépésként az egyensúlyi hőmérsékletre kell normálni, azaz úgy kell leosztani a görbe minden pontját, hogy az egyensúlyi hőmérséklet egynél legyen.

Ez a mérési eredmény azért érdekes, mert egyrészt nagyon gyors a hőmérséklet felfutás, másrészt azonnal az elején mintha látható lenne egy kiugró „púp”. A gyors, azonnali hőmérséklet emelkedés több más mintánál is megfigyelhető volt. Az

²Egy részecske által két ütközés között átlagosan megtett út. A Knudsen-szám a közepes szabad úthossz és a minta karakterisztikus hosszának az aránya.



7.5. ábra. A kísérletben használt jelalak.



7.6. ábra. A minta hátfalán mért hőmérséklet értékek.

illesztést először a Fourier-egyenlettel kezdjük a hődiffúzitás megállapítására, mivel ebben az esetben ez az egyetlen illesztendő paraméter. A többi modell ennek értékét örökölni fogja. Az illesztést másik két modellel is elvégzem, az egyik a GK-egyenlet lesz a másik pedig a ballisztikus-diffúzív rendszer. Ezzel a két modellel befolyásolható a jelterjedés sebessége, ugyanez a Fourier-egyenletről nem mondható el. A MCV- és a GN-egyenletekkel itt nem foglalkozunk. Az illesztések jóságát az abszolút hibával szemléltetjük és a négyzetes eltéréssel jellemezzük:

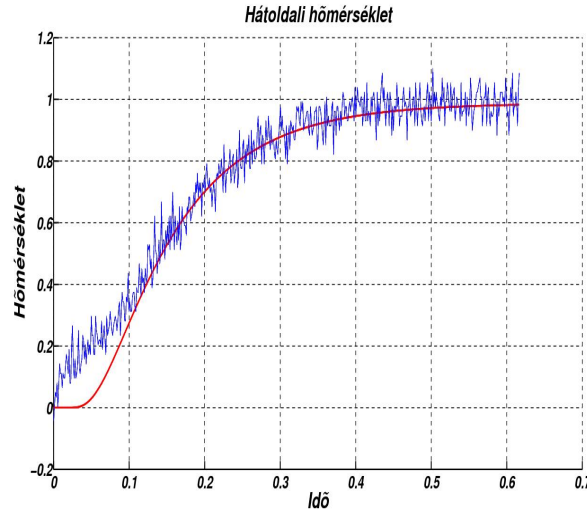
$$\chi = \sqrt{\sum_i \Delta x_i^2}, \quad (109)$$

ahol χ jelöli a négyzetes eltérést, Δx a számított és a mért értékek közötti eltérést, az i index pedig a mérési pontokra vonatkozik. Az összegzés az összes mérési pontra vonatkozik.

7.3.1. Fourier-egyenlet illesztése A hődiffúzivitás paraméterét állítva először dimenziótlanítottuk a mért értékeket, majd számoltuk a hőmérsékleteloszlást. Ebben az esetben

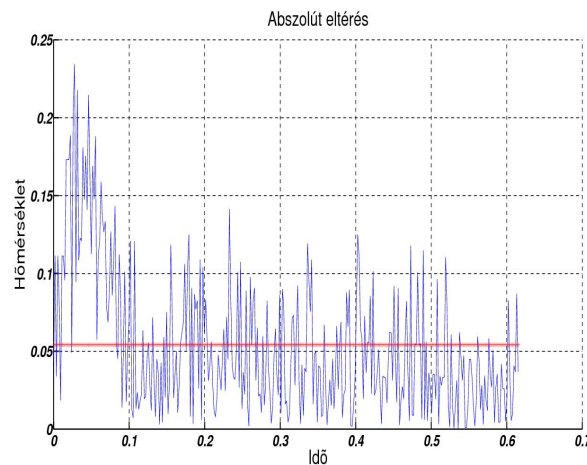
$$\alpha = 1.59 \cdot 10^{-7} \frac{m^2}{s} \quad (110)$$

bizonyult a legjobb értéknek, ezt a többi modell is örökölni fogja.



7.7. ábra. A minta hátfalán a mért és számolt hőmérsékleteloszlás dimenziótlan formában. A piros görbe mutatja a számított értékeket.

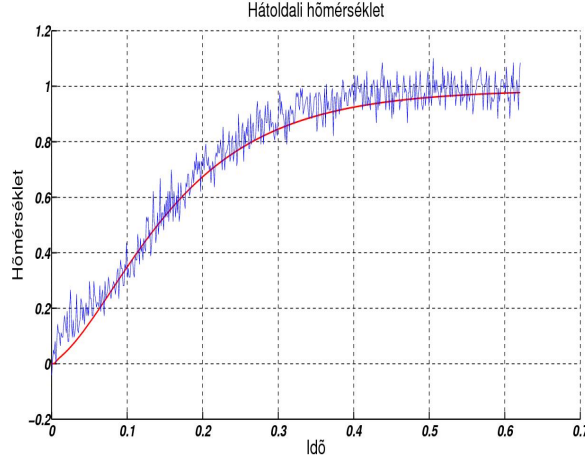
A 7.7. ábra mutatja az illesztés eredményét, a piros görbe a számított értékeket. Lényeges eltérés a mérés elején mért értékekhez képest tapasztalható, a Fourier-egyenlet szerint a jelfelfutás később indulhat meg, mint ahogy azt a mérés mutatja. Ez jól látszik a 7.8. ábrán is.



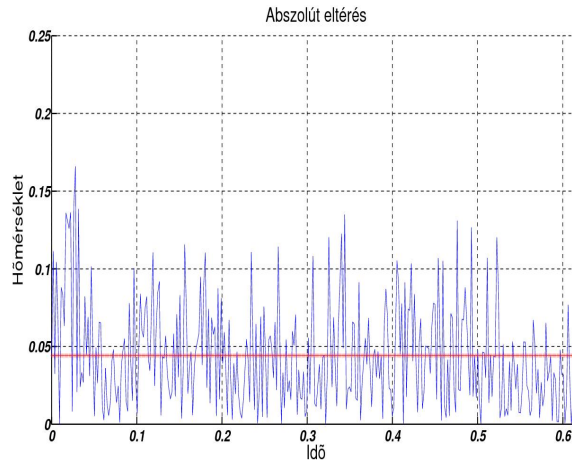
7.8. ábra. Az abszolút hiba az egyes mérési pontokban. A piros vonal az átlagos abszolút hibát jelöli ($E = 0.054$). A négyzetes eltérés pedig $\chi = 2.254$.

7.3.2. Guyer-Krumhansl-egyenlet illesztése Ebben az esetben befolyásolni tudjuk a jelterjedés sebességét a disszipációs paraméterrel. Ekkor olyan megoldás is előállítható, melyben a hátoldali hőmérséklet felfutás szinte azonnal megindul (7.9. ábra). A felhasznált paraméterek:

$$\alpha = 1.59 \cdot 10^{-7} \frac{m^2}{s}; \quad \tau_q = 0.141s; \quad a = 2.244 \cdot 10^{-7} m^2. \quad (111)$$



7.9. ábra. A minta hátfalán a mért és számolt hőmérséklet eloszlás dimenziótlan formában. A piros görbe mutatja a számított értékeket.

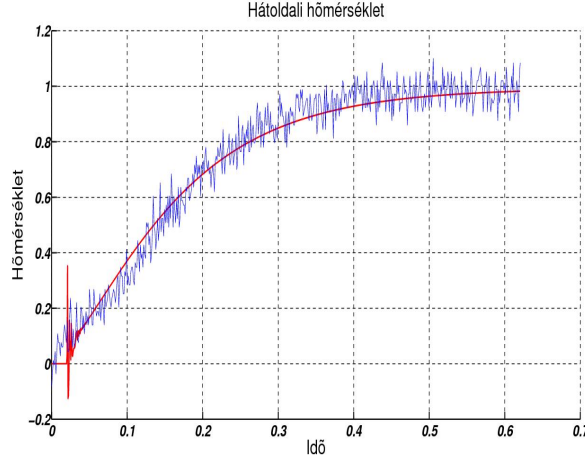


7.10. ábra. Az abszolút hiba az egyes mérési pontokban. A piros vonal az átlagos abszolút hibát jelöli ($E = 0.0442$). A négyzetes eltérés pedig $\chi = 1.75$.

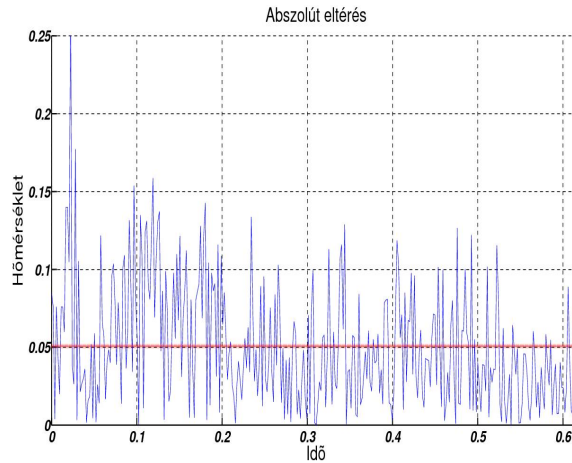
Figyeljük meg, hogy ilyen paraméterbeállítás mellett a megoldásban nem jelentkezik a GK-tartomány egy másik jellegzetessége, a „sarkosodás”, azaz a hőmérsékletfelfutás nem meredeken indul [34]. A gyors jelterjedésnek köszönhetően a mérés elején lévő hirtelen hőmérséklet emelkedéshez jobban illeszkedik (7.10. ábra), ebből eredően jobb illesztés érhető el a GK-egyenlettel, mint a Fourier-egyenlettel.

7.3.3. Ballisztikus-diffúzív modell A célunk a mérés elején látható „púp” reprodukálása volt, erre a másik két modell nem képes. A paraméterek:

$$\alpha = 1.59 \cdot 10^{-7} \frac{m^2}{s}; \tau_q = 0.21s; \tau_Q = 0.28s; \kappa = 0.155. \quad (112)$$



7.11. ábra. A minta hátfalán a mért és számolt hőmérséklet eloszlás dimenziótlan formában. A piros görbe mutatja a számított értékeket.



7.12. ábra. Az abszolút hiba az egyes mérési pontokban. A piros vonal az átlagos abszolút hibát jelöli ($E = 0.0459$). A négyzetes eltérés pedig $\chi = 2.035$.

A 7.11. ábrán látható megoldásban bár sikerült a mérés elején tapasztalható „púpot” reprodukálni, a keskeny impulzus szélesség numerikus hibát okozott, ezért tapasztalható az oszcilláció. Ebből kifolyólag a hibaeloszlás (7.12. ábra) ebben a tartományban nem fedti a modell valós illeszthetőségét. Ennek ellenére közel azonos az átlagos hiba mértéke, mint a GK-egyenlet esetében. Az utóbbi két modell kedvezőbb karakterisztikát tudott reprodukálni, amik összességében jobb illesztést eredményeztek.

8. FEJEZET

Összefoglalás

A dolgozat első felében részletesen ismertettük a hierarchikus rendszer származtatását és kapcsolatát a kinetikus elmélettel. Ellenőriztük az egyes rendszerek hiperbolicitását, a jelterjedési sebességeket is megállapítottuk. További vizsgálatokat végeztünk a diszperziós relációkon keresztül az egyes paraméterek szerepének feltérképezésére, szintén a jelterjedési sebességre fókuszálva. A megállapított tulajdonságokat is felhasználtuk a megoldások elemzésében. Láttuk, hogy a ballisztikus-diffúzív modell képes reprodukálni a Fourier-, a MCV-, a GK- és a GN-egyenletek megoldásait. Ezen felül tartalmazza a ballisztikus hővezetési jelenséget is, melynek különleges jelentősége van nanorendszerek esetén.

Részletesen elemeztük a modellek megoldására alkalmazott numerikus eljárást, bizonyítottuk a stabilitását és a konvergenciáját. További lehetőség a séma fejlesztése, a mesterséges numerikus diszperzió csökkentése lehet. Ezzel csökkenne a szükséges térlépések száma, azaz csökkenne a séma számításigénye. Ezzel szorosan összefügg a séma pontossága, illetve a pontos megoldáshoz való konvergencia sebessége.

Az alkalmazási területeken belül részletesen elemeztük a NaF-on alacsony hőmérsékleten végzett mérési eredményeket. Dreyer és Struchtrup által számolt eredményt pontosan visszakaptuk, azonban láttuk, hogy Yanbao Ma paramétereit felhasználva a terjedési sebességet nem ugyanúgy adja meg. Ez további vizsgálatokat igényel, ugyanis Ma más modellt használ, nem feltétlenül lehet egyenesen megfeleltetni egymásnak az anyagi paramétereket.

Az EGR-kísérlet kiértékelése alapján elmondható, hogy a GK-egyenlet reális modell lehet inhomogén anyagok modellezésére. A jelterjedési sebesség jól kezelhető és realisabb eredményt kaptunk, mint a Fourier-egyenlet megoldásával. A ballisztikus-diffúzív egyenlettel a megfigyelt (de nem túlságosan kiugró) „púpot” is modellezni tudjuk. Ez a jelenség a makroszkópikus ballisztikus terjedés első megfigyelése lehet. Oka nem lehet a második hang. Természetesen további kísérleti és elméleti vizsgálatokra van szükség ebben az irányban. A mesterséges oszcillációk miatt az illesztés jóságára nem mondhatunk biztosat, pontosabb sémával az éles ugrásoknál jelentkező hibákat előbb meg kell szüntetni.

A ballisztikus-diffúzív modellnek fő alkalmazási területe azonban a nanoeszközök megfelelő modellezése. A hőelektromos hatás, a mechanikai deformáció, mind hatással vannak a hővezetésre, a ballisztikus jelterjedésre. További kutatási lehetőség a mechanikai modellekkel való kapcsolatának részletes feltérképezése, például a deformációkkal való csatolt modell létrehozása, melyben az akusztikai és relaxációs, reológiai jelenségek főszerepet kapnának. Ezzel párhuzamosan változna a hőfeszültségek leírásának módja is [66, 36, 67].

9. FEJEZET

Köszönetnyilvánítás

Nagyon hálás vagyok Ván Péternek, aki jó meglátásaival, türelmével és rengeteg munkával járult hozzá a dolgozat elkészültéhez.

Köszönet illeti Fülöp Tamást a $\text{\LaTeX}$ program használatához nyújtott segítségért és a numerikus séma alapötletének felvetéséért.

Köszönöm még Czél Balázsnak és Gróf Gyulának az értékes észrevételeiket és tanácsaikat.

Édesanyámnak és Édesapámnak is szeretnék köszönetet mondani, amiért áldozatot hoznak a tanulmányaim érdekében és megteremtik számomra a szükséges körülményeket ehhez.

Irodalomjegyzék

- [1] Varjú Katalin. *Attoszekundumos impulzusok keltése és alkalmazásai*. Szegedi Tudományegyetem, 2011.
- [2] C. T. Lane, H. A. Fairbank, and W. M. Fairbank. Second sound in liquid helium II. *Physical Review*, 71:600–605, 1947.
- [3] R. J. Donnelly. The two-fluid theory and second sound in liquid helium. *Physics Today*, 62(10):34–39, 2009.
- [4] W. Dreyer and H. Struchtrup. Heat pulse experiments revisited. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 5:3–50, 1993.
- [5] C. Cattaneo. Sur une forme de lequation de la chaleur eliminant le paradoxe dune propagation instantanee. *Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L Academie Des Sciences*, 247(4):431–433, 1958.
- [6] A. Barletta and E. Zanchini. Hyperbolic heat conduction and local equilibrium: a second law analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(5):1007–1016, 1997.
- [7] E. Zanchini. Hyperbolic heat conduction theories and nondecreasing entropy. *Physical Review B*, 60(2):991–997, 1999.
- [8] T. Dedeurwaerdere, J. Casas-Vázquez, D. Jou, and G. Lebon. Foundations and applications of a mesoscopic thermodynamic theory of fast phenomena. *Physical Review E*, 53(1):498, 1996.
- [9] I. Gyarmati. On the wave approach of thermodynamics and some problems of non-linear theories. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 2:233–260, 1977.
- [10] D. Jou, J. Casas-Vázquez, and G. Lebon. Extended irreversible thermodynamics. *Reports on Progress in Physics*, 51(8):1105, 1988.
- [11] R. A. Guyer and J. A. Krumhansl. Thermal conductivity, second sound, and phonon hydrodynamic phenomena in nonmetallic crystals. *Physical Review*, 148:778–788, 1966.
- [12] D. Y. Tzou. *Macro-to micro-scale heat transfer: the lagging behavior*. CRC Press, 1996.
- [13] Gang Chen. Ballistic-diffusive heat-conduction equations. *Physical Review Letters*, 86(11):2297, 2001.
- [14] V. A. Cimmelli. Different thermodynamic theories and different heat conduction laws. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 34(4):299–333, 2009.
- [15] V.A. Cimmelli, A. Sellitto, and D. Jou. Nonlocal effects and second sound in a nonequilibrium steady state. *Physical Review B*, 79(1):014303, 2009.
- [16] V.A. Cimmelli, A. Sellitto, and D. Jou. Nonlinear evolution and stability of the heat flow in nanosystems: Beyond linear phonon hydrodynamics. *Physical Review B*, 82(18):184302, 2010.
- [17] Z.-Y. Guo, B.-Y. Cao, and M. Wang. General heat conduction equations based on the thermomass theory. *Frontiers in Heat and Mass Transfer (FHMT)*, 1(1), 2010.
- [18] M. Wang and Z.-Y. Guo. Understanding of temperature and size dependences of effective thermal conductivity of nanotubes. *Physics Letters A*, 374(42):4312–4315, 2010.
- [19] M. Wang, N. Yang, and Z.-Y. Guo. Non-Fourier heat conductions in nanomaterials. *Journal of Applied Physics*, 110(6):064310, 2011.
- [20] R. C Tolman. On the weight of heat and thermal equilibrium in general relativity. *Physical Review*, 35(8):904, 1930.
- [21] Yanbao Ma. A transient ballistic–diffusive heat conduction model for heat pulse propagation in nonmetallic crystals. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 66:592–602, 2013.
- [22] L.D. Landau és E.M. Lifsic. *Elméleti fizika VI – Hidrodinamika*. Tankönyvkiadó, 1980.
- [23] S.J. Rogers. Transport of heat and approach to second sound in some isotropically pure alkali-halide crystals. *Physical Review B*, 3(4):p1440, 1971.
- [24] Yanbao Ma. A hybrid phonon gas model for transient ballistic-diffusive heat transport. *Journal of Heat Transfer*, 135(4):044501, 2013.

- [25] Gyarmati István. *Nemegyensúlyi termodinamika*. Műszaki Könyvkiadó, 1976.
- [26] V.A. Cimmelli and P. Ván. The effects of nonlocality on the evolution of higher order fluxes in nonequilibrium thermodynamics. *Journal of Mathematical Physics*, 46(11):112901, 2005.
- [27] P. Ván and T. Fülöp. Universality in heat conduction theory – weakly nonlocal thermodynamics. *Annalen der Physik (Berlin)*, 524(8):470–478, 2012.
- [28] Kovács Róbert. Általánosított hővezetési egyenletek vizsgálata, tdk dolgozat, 2013.
- [29] P. Ván. Weakly nonlocal irreversible thermodynamics. *Annalen der Physik (Leipzig)*, 12(3):146–173, 2003.
- [30] P. Ván. Weakly nonlocal irreversible thermodynamics – the Guyer-Krumhansl and the Cahn-Hilliard equations. *Physic Letters A*, 290(1-2):88–92, 2001.
- [31] P. Ván. Weakly nonlocal irreversible thermodynamics – the Ginzburg-Landau equation. *Technische Mechanik*, 22(2):104–110, 2002.
- [32] J. Verhás. *Thermodynamics and rheology*. Akadémiai Kiadó-Kluwer Academic Publisher, 1997.
- [33] Kovács Róbert. Általánosított hővezetési egyenletek vizsgálata. In Vásárhelyi Balázs Török Ákos, Görög Péter, editor, *Mérnökgeológia-Közetmechanika 2013*, pages 345–357, 2013.
- [34] R. Kovács and P. Ván. Generalized heat conduction in laser flash experiments. 2014. benyújtva.
- [35] T. Fülöp, Cs. Asszonyi, and P. Ván. Distinguished rheological models in the framework of a thermodynamical internal variable theory. 2014. accepted in Continuum Mechanics and Thermodynamics [arXiv: 14070882].
- [36] A. Berezovski, J. Engelbrecht, and M. Berezovski. Waves in microstructured solids: a unified viewpoint of modelling. *Acta Mechanica*, 220:349–363, 2011.
- [37] T. Fülöp, R. Kovács, and P. Ván. A thermodynamical approach to wave phenomena. 2014. Lecture held at the conference Complexity of Nonlinear Waves, 12/09/2014 in Tallinn.
- [38] M. Grmela, G. Lebon, P. G. Dauby, and M. Bousmina. Ballistic-diffusive heat conduction at nanoscale: Generic approach. *Physics Letters A*, 339:237–245, 2005.
- [39] Dr. Fogarassy Bálint. *Bevezetés a szilárdtestfizikába*. ELTE Eötvös Kiadó, 1997.
- [40] E. Fermi, J. Pasta, and S. Ulam. Studies of nonlinear problems. 1955.
- [41] L.D. Landau és E.M. Lifsic. *Elméleti fizika X – Kinetikus fizika*. Tankönyvkiadó, 1984.
- [42] N. E. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid state physics*. Harcourt College Publishers, 1976.
- [43] I. Müller and T. Ruggeri. *Rational Extended Thermodynamics*. Springer, 2 edition, 1998.
- [44] H.E. Jackson and C.T. Walker. Thermal conductivity, second sound and phonon-phonon interactions in naf. *Physical Review B*, 3, 1968.
- [45] H.E. Jackson, C.T. Walker, and T.F. McNelly. Second sound in NaF. *Physical Review Letters*, 25, 1970.
- [46] Veres Gábor. *Bevezetés az elméleti plazmafizikába*. ELTE Eötvös Kiadó, 2008.
- [47] B. Czél, T. Fülöp, Gy. Gróf, and P. Ván. Comparison of temperature responses of the laser flash method in case of parabolic and hyperbolic heat conduction models. In Dombi Sz., editor, *11th International Conference on Heat Engines and Environmental Protection, Balatonfüred*, pages 133–139, Budapest, 2013. BME, Dep. of Energy Engineering.
- [48] P. D. Lax. *Hyperbolic Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 2006.
- [49] L. Rezzolla. *Numerical Methods for the Solution of Hyperbolic Partial Differential Equations*. SISSA, International School for Advanced Studies, 2005.
- [50] E. F. Toro and E. F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*.
- [51] H. Bremermann. Distributions, complex variables, and fourier transforms. 1965.
- [52] Geszti Tamás. *Kvantummechanika*. Typotex, 2007.
- [53] V. Gerasik and M. Stastna. Complex group velocity and energy transport in absorbing media. *Physical Review E*, 81, 2010.
- [54] P. D. Lax and R. D. Richtmyer. Survey of the stability of linear finite difference equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 9(2):267–293, 1956.
- [55] Y. Liu. Fourier analysis of numerical algorithms for the Maxwell equations. *Journal of Computational Physics*, 124:396–416, 1996.
- [56] P. Amodio, Y. A. Blinkov, V. P. Gerdt, and R. L. Scala. On consistency of finite difference approximations to the Navier-Stokes equations. In *Computer Algebra in Scientific Computing*, pages 46–60. Springer International Publishing, 2013. arXiv:1307.0914v2.
- [57] P. Brenner. The cauchy problem for symmetric hyperbolic systems in L_p spaces. *Mathematica Scandinavica*, 19:27–37, 1966.

- [58] M. N. Mahyuddin. Digital control system. Lecture notes, University Sains Malaysia, 2008.
- [59] S. Bargmann and P. Steinmann. Finite element approaches to non-classical heat conduction in solids. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 9(2):133–150, 2005.
- [60] A. Sellitto, V.A. Cimmelli, and D. Jou. Influence of electron and phonon temperature on the efficiency of thermoelectric conversion. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 80:344 – 352, 2015.
- [61] S. R. de Groot and P. Mazur. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications, 1963.
- [62] F.X. Alvarez and D. Jou. Memory and nonlocal effects in heat transport: from diffusive to ballistic regimes. *Applied Physics Letters*, 90(8):083109, 2007.
- [63] W. Kaminski. Hyperbolic heat conduction equation for materials with a nonhomogeneous inner structure. *Journal of Heat Transfer*, 112(3):555–560, 1990.
- [64] P. J. Antaki. New interpretation of non-Fourier heat conduction in processed meat. *Journal of Heat Transfer*, 127(2):189–193, 2005.
- [65] B. Czél, T. Fülöp, Gy. Gróf, Á. Gyenis, and P. Ván. Simple heat conduction experiments. In Domby Sz., editor, *11th International Conference on Heat Engines and Environmental Protection*, pages 141–146, Budapest, 2013. BME, Dep. of Energy Engineering.
- [66] A. Berezovski, J. Engelbrecht, and G. A. Maugin. Thermoelasticity with dual internal variables. *Journal of Thermal Stresses*, 34(5-6):413–430, 2011.
- [67] A. Berezovski and M. Berezovski. Influence of microstructure on thermoelastic wave propagation. *Acta Mechanica*, 224(11):2623–2633, 2013.