A matematika szerepe a mérnöki tudományokban a termodinamika szemüvegén keresztül

Kovács Róbert

Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék, BME
Elméleti Fizikai Osztály, Wigner FK

2021. szeptember 03.

Mire kíváncsi a mérnök?

- Probléma $\Rightarrow$ mi a megoldás?
- Hogyan lehet ezt leegyszerűsíteni?
- Hogyan lehet ezt automatizálni?

Mi a probléma?

- Jelenségek modellezése, tervezhetősége.
- Hővezetés, fluid és szilárdtest mechanika, anyagátadás, ...
- Hogyan használjuk? $\Rightarrow$ numerikus módszerek $\Rightarrow$ VEM.

Egyszerűsítések?

- A valóság milyen vetületével akarunk foglalkozni?
- Meddig lehet valamit egyszerűsíteni?
- Idő- és térskálák szerepe?

Automatizálhatóság?

- Hogyan tudjuk ugyanazt a modellt több dologra használni?
- Hogyan lehet ezt VEM programba implementálni?
- Lehet-e még hatékonyabb?

Példa: hővezetés

- Diffúziv terjedés $\rightarrow$ Fourier: $\partial_t T = a\partial_{xx} T$
- Hullám terjedés ("Második hang") $\rightarrow$
  Maxwell-Cattaneo-Vernotte: $\boxed{\tau\partial_{tt} T} + \partial_t T = a\partial_{xx} T$
- Guyer-Krumhansl egyenlet
  $\boxed{\tau\partial_{tt} T} + \partial_t T = a\partial_{xx} T + \boxed{l^2\partial_{txx} T}$
  Predikció:

Nem-Fourier jelenségek megtalálása szobahőmérsékleten.

2 párhuzamos időskála megjelenése $\rightarrow$ heterogén anyagok.

Kísérletileg ellenőrzött!

Nehézségek

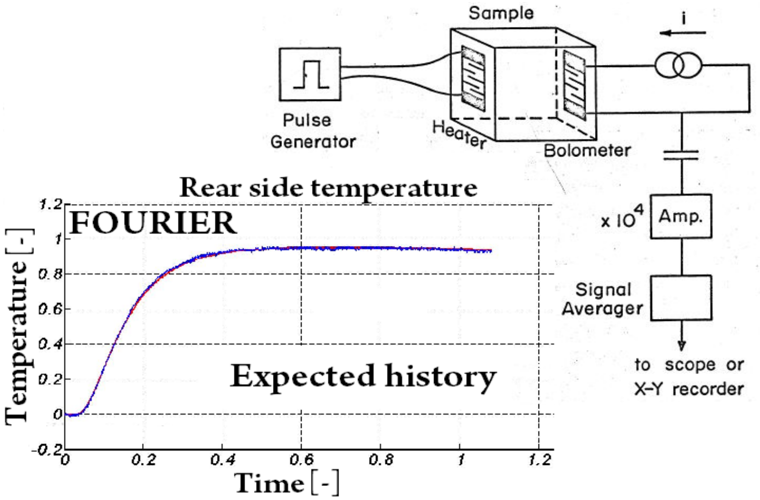
- Ugyanaz a PDE, de más háttérrel:
  RET vs. NET-BV (belső változók).
- Együtthatók megkötése?
- Érvényességi határok? $\Rightarrow$ Termodinamikai háttértől függ!
  RET: kinetikus elméleti háttér $\Rightarrow$ ritka rendszerek.
  NET-BV: kontinuum modell, több szabad paraméter.
- Eltérő értelmezése ugyannak a jelenségnek!

(Egységesítés??)

Kísérletek szerepe!

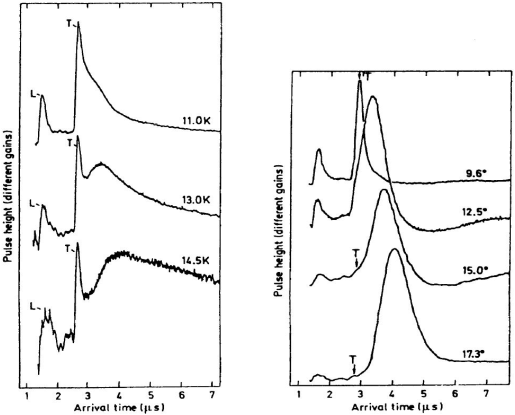
Hőimpulzus kísérlet I.

Elrendezés szilárd közegekre



Hőimpulzus kísérlet II.

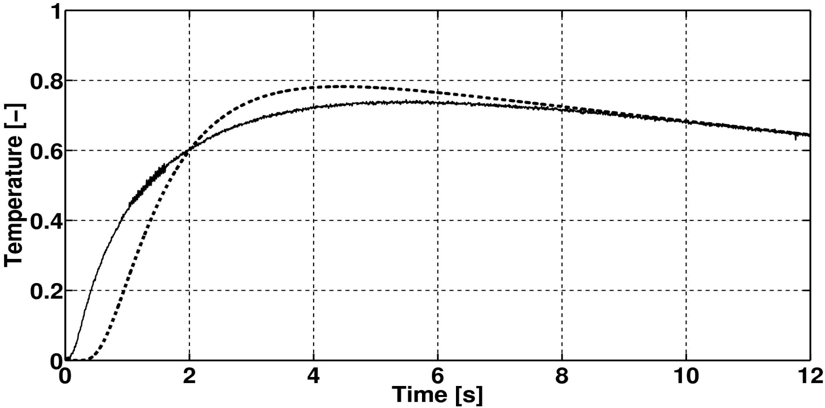
NEM a várt eredmény alacsony hőmérsékleten!



Jackson, Walker és McNelly (1968): NaF-kísérletek

Hőimpulzus kísérlet III.

Szobahőmérsékleten nem hullámjelenségeket látunk!
Fémhabra:



Mire jók a kísérletek?

- Melyik a "minimálisan" szükséges kiterjesztés?
  $\Rightarrow$ kiválasztási szempont a sok megközelítés közül!
- Modellek validálása! $\Rightarrow$ Tényleg működik?
- Gyakorlati oldalról a hiperbolicitás nem döntő.

Hogyan használjuk?

- Analitikus megoldások: a numerikus validálása, kísérletek gyors kiértékelése.
- Numerikus megoldások: stabilitás, konvergencia, összetett feladatokra.

(+ vegyes módszerek)

Példa: Guyer-Krumhansl-egyenlet

1D, merev szilárd közeg, konstans együtthatók.
Mérlegegyenlet:

$$\rho c \partial_t T + \partial_x q = 0, \tag{1}$$

Konstitutív:

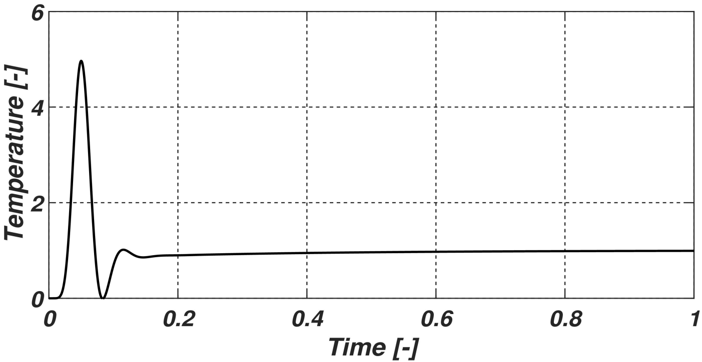
$$\tau \partial_t q + q + \lambda \partial_x T - \boxed{l^2 \partial_{xx} q} = 0. \tag{2}$$

+ időfüggő peremfeltételek + térben konstans kezdeti feltételek.
T-nyelven: $\tau \partial_{tt} T + \partial_t T = a \partial_{xx} T + \boxed{l^2 \partial_{txx} T}$

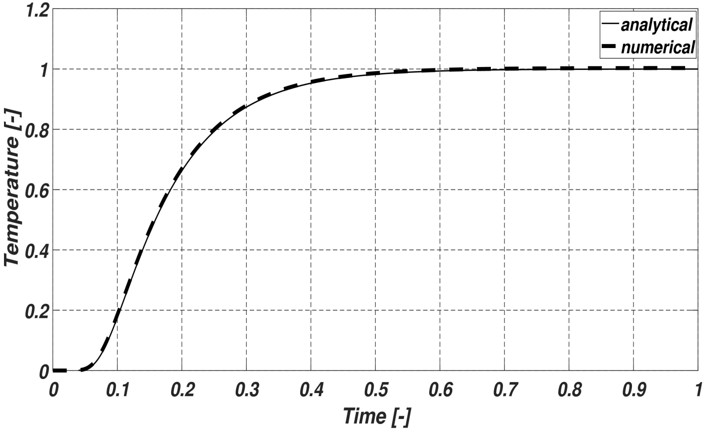
$$\begin{array}{ccccccccccc} q_1 & T_1 & q_2 & T_2 & \cdots & q_j & T_j & \cdots & q_{J-1} & T_{J-1} & q_J \\ \square & \bullet & \blacksquare & \bullet & \cdots & \blacksquare & \bullet & \cdots & \blacksquare & \bullet & \square \end{array}$$

COMSOL megoldás

Hőimpulzus kísérlet modellezése, VEM-mel, nem valós megoldás:

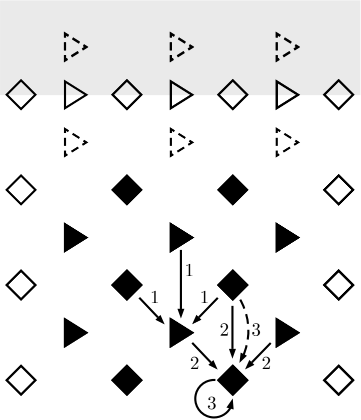


Valós megoldás



Kitekintés: szimplektikus léptetés

Mechanikai alkalmazások: rugalmas hullámterjedés.

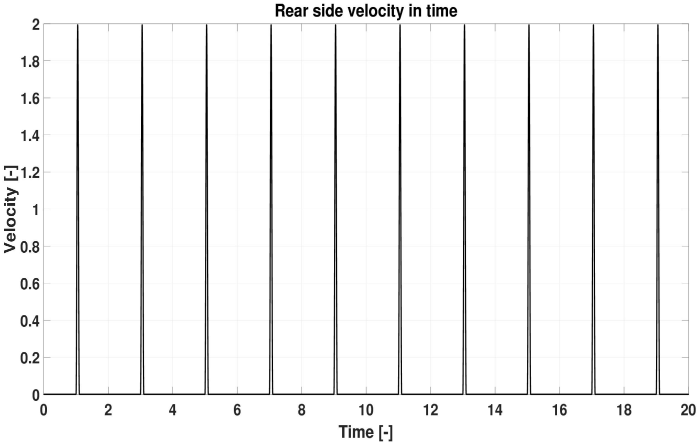


$$\rho\partial_t v = -E\partial_x \varepsilon, \qquad \partial_t \varepsilon = \partial_x v$$

$$\varepsilon_j^{n+1} = \varepsilon_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(v_{j+1}^n - v_j^n\right),$$

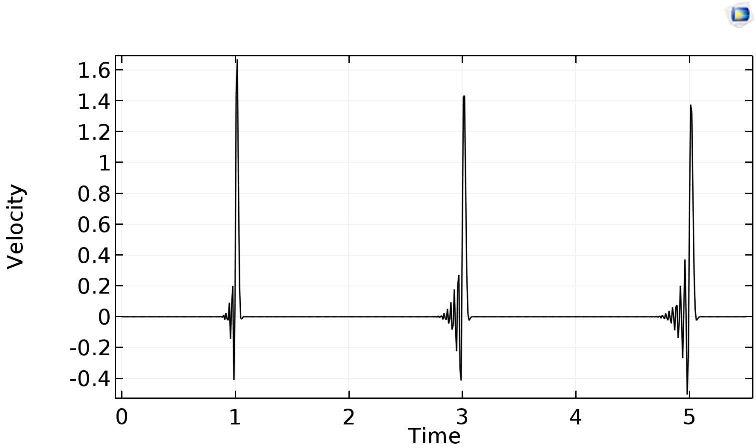
$$v_j^{n+1} = v_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\frac{E}{\rho}\left(\varepsilon_j^{n+1} - \varepsilon_{j-1}^{n+1}\right).$$

Energiát őrző megoldás



COMSOL megoldás

Diszperzív + disszipatív (vagy instabil).



Hol is tartunk?

- A modelleket származtatni kell $\rightarrow$ termodinamika.
- A modelleket meg kell oldani $\rightarrow$ termodinamika.
  Stabilitás, peremfeltételek.
- Egyszerűsítések esetén $\rightarrow$ termodinamika.
  Nemlinearitások!
- Végeredmény:
  valós, konvergens megoldás hatékony megtalálása.

Köszönöm a figyelmet!