Nemegyensúlyi termomechanika

Ván Péter
Wigner FK RMI, Elméleti Fizika Osztály

- Termodinamika és mechanika
  - Összefoglalás - tézisek
- Elvek: stabilitás, kovariancia, II. főtétel
  - Farkas lemma és Liu-eljárás
- Példák:
  - Ginzburg-Landau-egyenlet
  - Korteweg-folyadékok
  - Disszipatív relativisztikus folyadékok

Termodinamika és mechanika – kutatási célok

Statisztikus mechanika – termosztatika

Kinetikus gázelmélet – nemegyensúlyi termodinamika,
lokális egyensúly + …

Termosztatika: univerzalitás (abszolút hőmérséklet, Einstein)
meglepő mély kapcsolatok (Planck, Bekenstein, Verlinde)

Nemegyensúlyi termodinamika:
univerzalitás?, általánosság
alkalmazások (adott szintig: hőátadás, hővezetés)
kulcs: mechanika

Lokális egyensúly - *lokálisan termosztatika*.

<u>Nemegyensúlyi termodinamika</u>

Onsager (1931) – homogén.

Eckart (1940) – térelmélet, entrópiaprodukció

Prigogine, Meixner, Casimir, de Groot (1941-)

kiterjesztés: Onsager és Machlup

Konstitutív elmélet

termodinamikai lezárás

<u>Racionális mechanika</u>

reológia: Maxwell, Kelvin, Poynting-Thomson,
Boltzmann (Volterra-elv).

általánosított kontinuumok: Cosserat (1900)

Truesdell-Noll (1965), Coleman, Gurtin, … , Vilaggio, Ball

A mechanika matematikai elmélet.

memória, elvek, II. főtétel,

lokális?, egyensúly?

Nincs termosztatika. Onsagerizmus hülyeség.

Folyadékok: Fourier-Navier-Stokes

$$\dot{\rho} + \rho \partial_i v^i = 0,$$
$$\rho \dot{v}^i + \partial_j P^{ji} = 0^i,$$
$$\rho \dot{e} + \partial_i q^i = P^{ij} \partial_j v_i.$$

– alapváltozók: (ρ, v^i)

– konstitutív állapottér $C = (\rho, \partial_i v^j)$

– anyagfüggvények $q^i(C), P^{ij}(C)$

Lokális egyensúly:

$$de = Tds - pdv, \quad v = \frac{1}{\rho} \qquad p(e,v), T(e,v) \Rightarrow s(e,v)$$

Entrópiamérleg: $\rho \dot{s}(e,v) + \partial_i J^i(?) = \sigma(C) \geq 0$

$$\sigma = \frac{1}{T}\dot{e} + \frac{p}{T}\dot{v} + \partial_i\left(\frac{q^i}{T}\right) = \frac{1}{T}\left(-\partial_i q^i + P^{ij}\partial_j v_i.\right) - \frac{p}{T}\rho\frac{\rho\partial_i v^i}{\rho^2} + \partial_i\left(\frac{q^i}{T}\right) =$$

$$q^i \partial_i \frac{1}{T} + \frac{1}{T}(P^{ij} - p\delta^{ij})\partial_i v_j \geq 0$$

$$q^i \partial_i \frac{1}{T} + \frac{1}{T}(P^{ij} - p\delta^{ij})\partial_i v_j \geq 0$$

Erők és áramok + izotrópia:

$$q^i = \lambda \partial_i \frac{1}{T}, \qquad \frac{1}{T}(P^{ij} - p\delta^{ij}) = \eta\left(\partial_i v_j\right)^s + \eta_v \partial_k v^k \delta^{ij}.$$

Fourier Navier-Stokes

Feltételek (problémák):

erő-áram rendszer
entrópiaáram
mérleg: kényszer, lendületmérleg nem?
sebesség? $C = (\rho, \partial_i v^j)$
belső és teljes energia: sebességfüggő termosztatika? $e_T = e + \frac{v^2}{2},$

$$de = de_T - v_i dv^i = Tds - pdv$$

Prigogine-tétel (1945), Brenner-diffúzió (2000)
magasabbfokú folyadékok, pl. Korteweg (1901):

$$P^{ij}_{Kor} = \left(-p + \alpha\, \partial^k_k \rho + \beta \partial_k \rho \partial^k \rho\right)\delta^{ij} + \nu\, \partial^i \rho \partial^j \rho + \gamma\, \partial^{ij} \rho$$

Nemlokális nemegyensúly?

II. főtétel
kovariancia (téridő)
interdiszciplinaritás
- homogén
- nemrelativisztikus kontinuum
- relativisztikus kontinuum

egységes elmélet

Módszerek:

függvénytani elemzés + anyagi objektivitás (spéci kovariancia)
- deriváltak, Coleman-Noll-eljárás, Liu-eljárás

mechanika leválasztása (zárójelek): GENERIC
mikroerő mérleg, virtuális teljesítmény (mechanika)
extra, belső változók

1. Konstruktív módszert dolgoztam ki a klasszikus kontinuumfizika térben gyengén nemlokális elméleteiben az anyagi tulajdonságokat meghatározó konstitutív relációk meghatározására. A módszer a második főtétel alkalmazásán alapul, a racionális termodinamika Liu-eljárását terjeszti ki.
   Ezt a módszert alkalmaztam a következő esetekben:
   a) Klasszikus irreverzibilis termodinamika
   b) Egy belső változós, kényszer nélküli, másodrendűen gyengén nemlokális kontinuumelmélet: Ginzburg-Landau-egyenlet.
   c) Egy belső változós, kényszer nélküli, másodrendűen gyengén nemlokális kontinuumelmélet: általánosított kontínuummechanika
   d) Korteweg-folyadékok
   e) Merev, izotrop hővezetők

1. Termodinamikai reológia
   a) Térfogati reológia
   b) Objektív időderiváltak

1. Speciális relativisztikus disszipatív folyadékok
   a) Gibbs-reláció
   b) Generikus stabilitás

Homogén termodinamika:

kontinuum ↔ homogén

közönséges differenciálegyenletek

Onsager, Fényes, Truesdell-Bharatha (kontinuumokból!)

véges idejű termodinamika, entrópiatermelés minimalizálás, …

II. főtétel: egyensúly aszimptotikus stabilitása (Matolcsi Tamás)

összentrópia: Ljapunov-függvény

Pl. exergia = összentrópia x állandó, elvi kérdések

Értelmes lokális viszonyok:

Gibbs-reláció: entrópia értelmezés, gradiensfüggő is.

a homogén egyensúly (nem?)lineáris stabilitása

relativisztikusan: generikus stabilitás

Gyakorlat (alkalmazások):

- Általánosított hővezetés (Guyer-Krumhansl)
- ‘Gradiens’ anyagok a mechanikában (mikroszerkezet)
  - folyadékkristályok (Oseen-Frank)
  - mikrorepedezés
  - porózus anyagok
  - homok (Goodman-Cowin)
  - nyírófelületek szerkezete
- Korteweg-folyadékok
- Turbulencia
- Struktúraképző egyenletek (fázismező)
  - Ginzburg-Landau, Cahn-Hilliard, etc… és ezeken túl

….

Ginzburg-Landau (variációs)

$$F(a) = \int (f(a) + \frac{\lambda}{2}\partial_i a \partial^i a) dV \quad \Longrightarrow \delta_a F = f'(a) - \lambda \partial_k^k a$$

$$\dot{a} = -l \delta_a F$$

$$\boxed{\dot{a} = -l(f'(a) - \lambda \partial_k^k a)}$$

– II. főtétel?
– variációs, de miért?
– $+k\Delta\dot{\xi}$

Ginzburg-Landau (termodinamikai, nem lokalizálható)

$$\boxed{\begin{gathered}\partial_t a + F = 0 \\ \partial_t \partial^i a + \partial^i F = 0 \\ \partial_t s + \partial_i j_S^i \geq 0\end{gathered}}$$

$(a, \partial^i a, \partial^{ij} a)$ konstitutív állapot

(F, s, J_S^i) konstitutív függvények

Liu-eljárás (Farkas-lemma)

$$s(a, \partial^i a) \qquad j_S^i(C) = j_0^i(a, \partial^i a) - \partial_a s \, F(C)$$

$$\sigma_s = -\left(\partial_a s - \partial^i\left(\partial_{\partial^i a} s\right)\right) F \geq 0$$

$$\boxed{\partial_t a = -L\left(\partial_a s - \partial^i\left(\partial_{\partial^i a} s\right)\right)}$$

$$C = (a, \partial_x a, \partial_{xx} a) \qquad \text{konstitutív állapottér}$$

$$\partial_t s(C) + \partial_x J_x(C) - \lambda(C)(\partial_t a - f(C)) - \Lambda(C)(\partial_{tx} a - \partial_x f(C)) =$$

$$\partial_1 s \partial_t a + \partial_2 s \partial_{tx} a + \partial_3 s \partial_{txx} a + \partial_1 J_x \partial_x a + \partial_2 J_x \partial_{xx} a + \partial_3 J_x \partial_{xxx} a -$$

$$- \lambda(\partial_t a - f) - \Lambda(\partial_{tx} a - \partial_1 f \partial_x a + \partial_2 f \partial_{xx} a + \partial_3 f \partial_{xxx} a) =$$

$$\partial_t a(\partial_1 s - \lambda) + \partial_{tx} a(\partial_2 s - \Lambda) + \partial_{txx} a \partial_3 s + \partial_{xxx} a(\partial_3 J_x - \Lambda \partial_3 f) +$$

$$(\partial_1 J_x - \Lambda \partial_1 f)\partial_x a + (\partial_2 J_x - \Lambda \partial_2 f)\partial_{xx} a + \lambda f \geq 0$$

Liu-egyenletek

$$\partial_a s = \lambda; \quad \partial_{\partial_x a} s = \Lambda;$$

$$\partial_{\partial_{xx} a} s = 0 \qquad \Rightarrow \boxed{s(a, \partial_x a)}$$

$$\partial_3 J_x = \Lambda \partial_3 f \ \Rightarrow \boxed{J_x = \partial_{\partial_x a} s \, f + j(a, \partial_x a)}$$

$$\sigma_s = \left(\frac{\partial s}{\partial a} - \partial_x \frac{\partial s}{\partial(\partial_x a)} \right) f \geq 0$$

Történet:

Farkas Gyula és I-Shih Liu (+I. Müller)
lineáris algebra,

Új :

A kényszer deriváltja is kényszer.
Az entrópiaáram konstitutív.

Müller-féle K vektor és a racionális termodinamika

A fejlődési egyenlet származtatása termodinamikailag.

Folyadékok: Fourier-Navier-Stokes 2.

$$\dot{\rho} + \rho\partial_i v^i = 0,$$
$$\rho\dot{v}^i + \partial_j P^{ji} = 0^i,$$
$$\rho\dot{e} + \partial_i q^i = P^{ij}\partial_j v_i.$$

– alapváltozók: (ρ, v^i)

– konstitutív állapottér $C = (\rho, \partial_i\rho, \partial_i v^j)$

– anyagfüggvények $q^i(C), P^{ij}(C)$

Lokális egyensúly:

$$de = Tds - pdv, \quad v = \frac{1}{\rho} \qquad p(e,v), T(e,v) \Rightarrow s(e,v)$$

Entrópiamérleg: $\rho\dot{s}(e,v) + \partial_i J^i(?) = \sigma(C) \geq 0$

$$\sigma = \frac{1}{T}\dot{e} + \frac{p}{T}\dot{v} + \partial_i\left(\frac{q^i}{T}\right) = \frac{1}{T}\left(-\partial_i q^i + P^{ij}\partial_j v_i.\right) - \frac{p}{T}\rho\frac{\rho\partial_i v^i}{\rho^2} + \partial_i\left(\frac{q^i}{T}\right) =$$

$$q^i\partial_i\frac{1}{T} + \frac{1}{T}(P^{ij} - p\delta^{ij})\partial_i v_j \geq 0$$

Folyadékok: Fourier-Navier-Stokes 2.

$$\dot{\rho} + \rho\partial_i v^i = 0,$$
$$\rho\dot{v}^i + \partial_j P^{ji} = 0^i,$$
$$\rho\dot{e} + \partial_i q^i = P^{ij}\partial_j v_i.$$

– alapváltozók: (ρ, v^i, e)

– konstitutív állapottér

$$C = (\rho, \partial_i \rho, \partial_{ij}\rho, v^i, \partial_i v^j, e_T, \partial_i e_T)$$

– anyagfüggvények $q^i(C), P^{ij}(C), s(C), J_S^i(C)$

Liu-eljárás:

$$0 \le \rho\dot{s}(C) + \partial_i J^i(C) - \lambda(C)\left(\dot{\rho} + \rho\partial_i v^i\right) - \Lambda^i(C)\left[\partial_i\left(\dot{\rho} + \rho\partial_i v^i\right)\right] -$$
$$\Gamma_i(C)\left(\rho\dot{v}^i + \partial_j P^{ji}(C)\right) - \gamma(C)\left(\rho\dot{e}_T + \partial_i q_T^i(C)\right) \ge 0$$

- Elsőrendűen gyengén nemlokális: FNS
- Teljes energiával (+lendületmérleg) és belső energiával ugyanaz.
- Parciális vagy szubsztanciális időderivált nem számít.

Liu eljárás eredménye:

$$s = s_e(\rho, \partial_i \rho, e_T - v^2/2)$$

$$J_S^i = \left(q^i - v_j P^{ij}\right)\frac{1}{T} + \frac{\rho^2}{2}\left(\partial_{\partial_i \rho} s \partial_j v^j + \partial_{\partial_j \rho} s \partial_j v^i\right) + J_0^i$$

$$\left(q^i - v_j P^{ij}\right)\partial_i \frac{1}{T} - \frac{1}{T}\left[P^{ij} - \left(p + \frac{T\rho^2}{2}\partial_k\left(\partial_{\partial_k \rho} s\right)\right)\delta^{ij} - \frac{T\rho^2}{2}\partial_j\left(\partial_{\partial_i \rho} s\right)\right]\partial_i v_j \geq 0$$

Ideális folyadék:

$$P_{rev}^{ij} = \frac{T\rho^2}{2}\left[\left(\partial_k\left(\partial_{\partial_k \rho} s\right) - 2\partial_\rho s\right)\delta^{ij} - \partial_j\left(\partial_{\partial_i \rho} s\right)\right]$$

$$P^{ij}_{rev} = \frac{T\rho^2}{2}\left[\left(\partial_k\left(\partial_{\partial_k\rho}s\right) - 2\partial_\rho s\right)\delta^{ij} - \partial_j\left(\partial_{\partial_i\rho}s\right)\right]$$

Potenciál tulajdonság, Lagrange sűrűség:

$$\partial_j \frac{P^{ij}_{rev}}{T} = \rho\partial^i U \qquad\qquad U = -\partial_\rho(\rho s) + \partial_i\left(\rho\partial_{\partial_i\rho}s\right)$$

Schrödinger-Madelung folyadék

(Fisher entrópia forma)

$$s_{SchM}(e,\rho,\nabla\rho) = s\left(e - \frac{\nu_{SchM}}{2}\left(\frac{\partial_i\rho}{2\rho}\right)^2\right)$$

$$\mathbf{P}^{\mathrm{r}}_{\mathrm{SchM}} = -\frac{1}{8}\left(\Delta\rho\mathbf{I} + \nabla^2\rho - \frac{2\nabla\rho\otimes\nabla\rho}{\rho}\right)$$

Potenciálként : $\nabla \cdot \mathbf{P}^{r} = \rho \nabla U_Q$

$\Psi = \sqrt{\rho} e^{-i\nabla \mathbf{v}}$

Bernoulli egyenlet

Schrödinger egyenlet

$$U_Q = -\partial_\rho (\rho s_e) + \nabla \cdot (\rho \partial_{\nabla\rho} s_e)$$

Euler-Lagrange

Variációs eredet

Fourier-Navier-Stokes

$$\dot{n} + n\partial_i v^i = 0,$$
$$\dot{\varepsilon} + \varepsilon\partial_i v^i + \partial_i q^i + P^{ij}\partial_i v_j = 0,$$
$$\dot{k}^i + k^i\partial_j v^j + \partial_j P^{ij} = 0^i,$$

$$q^i \partial_i \frac{1}{T} - \frac{1}{T}\Big(P^{ij} - \underbrace{(Ts + \mu n - \varepsilon)}_{p}\delta^{ij}\Big)\partial_i v_j \geq 0$$

$$\boxed{\begin{aligned} q^i &= -\lambda\partial^i T, \\ \Pi^{ij} &= -\xi\partial_k v^k \delta^{ij} - 2\eta\langle\partial_i v^j\rangle. \end{aligned}}$$

Isotropic linear constitutive relations,
$\langle\rangle$ is symmetric, traceless part

Equilibrium:

$$n(x_i,t) = const., \quad \varepsilon(x_i,t) = const., \quad v^i(x_i,t) = const.$$

Linearization, …, Routh-Hurwitz criteria:

$$\lambda > 0, \quad \eta > 0, \quad \xi > 0,$$
$$\partial_\varepsilon T > 0,$$

Thermodynamic stability (concave entropy)

$$\underbrace{(\varepsilon + p)\partial_\varepsilon p + n\partial_n p > 0}_{\text{Hydrodynamic stability}} \quad \Leftrightarrow \quad \underbrace{\partial_\varepsilon T\partial_n \frac{\mu}{T} - \partial_n T\partial_\varepsilon \frac{\mu}{T} > 0}_{-T^2 Det(\partial^2 s)}$$

Fourier-Navier-Stokes

$$\dot{n} + n\partial_i v^i = 0,$$
$$\dot{\varepsilon} + \varepsilon\partial_i v^i + \partial_i q^i + P^{ij}\partial_i v_j = 0,$$
$$\dot{k}^i + k^i\partial_j v^j + \partial_j P^{ij} = 0^i,$$

$$\boxed{\begin{aligned} q^i &= -\lambda\partial^i T, \\ \Pi^{ij} &= -\xi\partial_k v^k\delta^{ij} - 2\eta\left\langle \partial_i v^j \right\rangle. \end{aligned}}$$

$$q^i\partial_i \frac{1}{T} - \frac{1}{T}\left(P^{ij} - (\underbrace{Ts + \mu n - \varepsilon}_{\text{p}})\delta^{ij}\right)\partial_i v_j \geq 0$$

Isotropic linear constitutive relations,
<> is symmetric, traceless part

Equilibrium:

$$n(x_i, t) = const., \qquad \varepsilon(x_i, t) = const., \qquad v^i(x_i, t) = const.$$

Linearization, …, Routh-Hurwitz criteria:

$$\lambda > 0, \quad \eta > 0, \quad \xi > 0,$$
$$\partial_\varepsilon T > 0,$$

Thermodynamic stability
(concave entropy)

$$\underbrace{(\varepsilon + p)\partial_\varepsilon p + n\partial_n p > 0}_{\text{Hydrodynamic stability}} \quad \Leftrightarrow \quad \underbrace{\partial_\varepsilon T\partial_n \frac{\mu}{T} - \partial_n T\partial_\varepsilon \frac{\mu}{T}}_{-T^2 Det(\partial^2 s)} > 0$$

Termodinamikai elmélet

Dinamikai törvény: $\dot{a} = f(a)$

$$a = (v, c, \varepsilon, \ldots)$$

1 Sztatika (egyensúlyi tulajdonságok)

$$\exists S \qquad \left(\frac{\partial S}{\partial e} = \frac{1}{T}, \quad \ldots \quad , \frac{\partial S}{\partial a} = \Gamma_a \right)$$

2 Dinamika

$$\dot{S}(a) = DS(a) \cdot \dot{a} = DS(a) \cdot f(a) \geq 0$$

1 + 2 + elszigetelt rendszer

S Ljapunov függvénye

a dinamikai törvény egyensúlyának

Irreverzibilitás $\Rightarrow$ közelítés az egyensúlyhoz

Stabilitási szerkezet $\Rightarrow$ Dinamikai szerkezet

<u>1. példa (diszkrét)</u>

$$\dot{a} = f(a)$$
$$\dot{S}(a) \geq 0$$

a dinamikai egyenlet
minden megoldása esetén

$$\boxed{f(a) = ?}$$

$$0 \leq \dot{S}(a) = DS(a) \cdot f(a) \quad \Longrightarrow \quad f(a) = l(a) DS(a)$$

relaxációs dinamika

2. példa (kontinuum)

$$\dot{\mathbf{a}} + \nabla \cdot \mathbf{j}_a = \sigma_a$$ mérlegek $$\mathbf{a} = (\rho, \rho\mathbf{v}, \ldots)$$

(más is lehet)

- állapottér: $\mathbf{a}$
- konstitutív tér: $C = (\mathbf{a}, \dot{\mathbf{a}}, \nabla\mathbf{a}, \ldots)$
- anyagfüggvények: $\mathbf{j}_a(C)$

gyengén nemlokális

Második főtétel:

$$\dot{s}(C) + \nabla \cdot \mathbf{j}_s(C) = \sigma_s \geq 0$$

$\boxed{\text{Anyagelmélet}}$

Módszer: Liu eljárás - Farkas lemma - Lagrange szorzók

De: konstruktívan

3. példa (Ginzburg-Landau)

$$\boxed{\begin{aligned}&\partial_t \xi = g\\&\partial_t s + \nabla \cdot j_s \geq 0\end{aligned}}$$

$(\xi, \nabla\xi, \nabla^2\xi)$ állapottér

(g, s, j_s) állapot függvények

$\Uparrow$

Liu eljárás

$$s(\xi, \nabla\xi) \qquad j_s(.) = j_0(\xi, \nabla\xi) - \partial_\xi s\, g(.)$$

$$\sigma_s = -(\partial_\xi s - \nabla \cdot \partial_{\nabla\xi} s) g \geq 0$$

$\Downarrow$

$$\boxed{\partial_t \xi = g = -l(.)(\partial_\xi s - \nabla \cdot \partial_{\nabla\xi} s)}$$

Hővezetés

$$\partial_t u + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0$$

$$(u = cT)$$

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \longrightarrow c\partial_t T - \lambda \Delta T = 0$$

Fourier

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T - \tau\, \partial_t \mathbf{q} \longrightarrow \tau c \partial_{tt} T + c\partial_t T - \lambda \Delta T = 0$$

Maxwell-Cattaneo

$$\partial_t \mathbf{q} + G = 0 \qquad ? \qquad \partial_t s + \nabla \cdot \mathbf{j}_s \geq 0$$

Gyengén nemlokális kiterjesztett termodinamika

$$\boxed{\begin{aligned} \partial_t u + \nabla \cdot \mathbf{q} &= 0 \\ \partial_t \mathbf{q} + G &= 0 \\ \partial_t s + \nabla \cdot \mathbf{j}_s &\geq 0 \end{aligned}}$$

$(u, \nabla u, \mathbf{q}, \nabla \mathbf{q}, \nabla^2 \mathbf{q})$ konstitutív tér

$(G, s, \mathbf{j}_s)$ anyagfüggvények

Lokális állapot: $s(u, \mathbf{q})$

Liu eljárás:

$$\mathbf{j}_s(u, \mathbf{q}, \nabla \mathbf{q})$$

$$\sigma_s = \nabla \cdot \mathbf{j}_s - \partial_u s \nabla \cdot \mathbf{q} - \partial_{\mathbf{q}} s G \geq 0$$

megoldás?

$$s(u,\mathbf{q}) = s_0(u) - \frac{1}{2}\mathbf{q}\cdot\mathbf{m}(u,\mathbf{q})\cdot\mathbf{q}$$ kiterjesztett entrópia

$$\mathbf{j}_s(u,\mathbf{q},\nabla\mathbf{q}) = \mathbf{B}(u,\mathbf{q},\nabla\mathbf{q})\cdot\mathbf{q}$$ entrópia áram (Nyíri)

$$\sigma_s = (\mathbf{B} - \partial_u s\mathbf{I}) : \nabla\mathbf{q} + (\nabla\cdot\mathbf{B} + G\cdot\widehat{\mathbf{m}})\cdot\mathbf{q} \geq 0$$

$$\mathbf{B} - \partial_u s\mathbf{I} = L_{11}\nabla\mathbf{q} + L_{12}\mathbf{q}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{B} + G\cdot\widehat{\mathbf{m}} = L_{21}\nabla\mathbf{q} + L_{22}\mathbf{q}$$

$$\boxed{\widehat{\mathbf{m}}\cdot\partial_t\mathbf{q} + \nabla\cdot(L_{11}\nabla\mathbf{q} + L_{12}\mathbf{q} + \partial_1 s\mathbf{I}) = L_{21}\nabla\mathbf{q} + L_{22}\mathbf{q}}$$

Guyer-Krumhansl +

$$\tau\,\partial_t\mathbf{q} + \lambda\nabla T = \mathbf{q}$$

Két komponensű gyengén nemlokális keverék

$$\rho = \nu_1\gamma_1 + \nu_2\gamma_2 = \nu\gamma$$

γ szilárd komponens sűrűsége
ν térfogateloszlási függvény

$$\boxed{\begin{aligned} &\dot{\gamma} = 0 \\ &\dot{\nu} + \nu\nabla\cdot\mathbf{v} = 0 \\ &\nu\gamma\dot{\mathbf{v}} + \nabla\cdot\mathbf{P}(\mathrm{C}) = \mathbf{0} \\ &\dot{\mathrm{s}}(\mathrm{C}) + \nabla\cdot\mathbf{j}_{\mathrm{s}}(\mathrm{C}) \geq 0 \end{aligned}}$$

$(\gamma, \nu, \mathbf{v})$ alapállapot

$$C = (\gamma, \nabla\gamma, \nu, \nabla\nu, \mathbf{v}, \nabla\mathbf{v})$$

konstitutív állapot

$$\mathrm{s}(\mathrm{C}), \mathbf{j}_{\mathrm{s}}(\mathrm{C}), \mathbf{P}(\mathrm{C})$$

konstitutív függvények

Kényszerek: $(1), \nabla(1), (2), \nabla(2), (3)$

$$
\begin{aligned}
&\rho\partial_{\gamma}s = \Gamma_1,\\
&\rho\partial_{\nabla\gamma}s = \Gamma_2,\\
&\rho\partial_{\nu}s = \Gamma_3,\\
&\rho\partial_{\nabla\nu}s = \Gamma_4,\\
&\rho\partial_{\mathbf{v}}s = \Gamma_5,\\
&\rho\partial_{\nabla\mathbf{v}}s = \mathbf{0},\\
&(\partial_{\nabla\nu}\mathbf{j}_s - \Gamma_5\partial_{\nabla\nu}\mathbf{P})^s = \mathbf{0},\\
&(\partial_{\nabla\lambda}\mathbf{j}_s - \Gamma_5\cdot\partial_{\nabla\gamma}\mathbf{P})^s = \mathbf{0},\\
&(\partial_{\nabla\mathbf{v}}\mathbf{j}_s - \Gamma_4\nu\mathbf{I} - \Gamma_5\cdot\partial_{\nabla\mathbf{v}}\mathbf{P})^s = \mathbf{0}.
\end{aligned}
$$

Liu-egyenletek

$$
\begin{aligned}
&\partial_{\nu\nabla\nu}s = \mathbf{0},\\
&\partial_{\nu\nabla\gamma}s = \mathbf{0},\\
&\partial_{\nabla\nu\nabla\nu}s = \mathbf{0},\\
&\partial_{\nabla\nu\nabla\gamma}s = \mathbf{0}.
\end{aligned}
$$

izotróp, másodrendű

Megoldás:

$$s(\nu, \nabla \nu, \gamma, \nabla \gamma, \mathbf{v}) = s_e(\nu, \gamma) - m(\nu, \gamma)\,\frac{\mathbf{v}^2}{2} - \alpha(\gamma)\,\frac{(\nabla \gamma)^2}{2}$$

$$\mathbf{j}_s(C) = -m(\nu, \gamma)\,\mathbf{v} \cdot \mathbf{P}(C) - \mathbf{j}_1(\nu, \gamma, \mathbf{v}).$$

$$-\nabla(\mathrm{m}\mathbf{v}) : \mathbf{P} + \rho(\alpha \nabla \gamma \circ \nabla \gamma - \nu \partial_\nu \mathrm{s}\mathbf{I}) : \nabla \mathbf{v} \geq 0$$

Egyszerűsítés:

$$m = 1, \quad \mathbf{j}_1(\nu, \gamma, \mathbf{v}) = \mathbf{0}, \quad \partial_\nu s_e = -\frac{p}{\rho^2}.$$

Entrópia produkció:

$$\boxed{-\left(\mathbf{P}-\underbrace{(p\mathbf{I}+\alpha\nabla\gamma\circ\nabla\gamma)}_{\mathbf{P}^{r}}\right):\nabla\mathbf{v}\geq 0}$$

Coulomb-Mohr

Goodman-Cowin:

$$\mathbf{P}^{r}=(p+\alpha(\nabla\nu)^{2}+2\alpha\nu\Delta\nu)\mathbf{I}-2\alpha\nabla\nu\circ\nabla\nu$$

$$\gamma\ddot{\nu}-\nabla\cdot\mathbf{h}=\sigma_{\dot{\nu}}$$

Konfigurációs erők mérlege

Coulomb-Mohr:

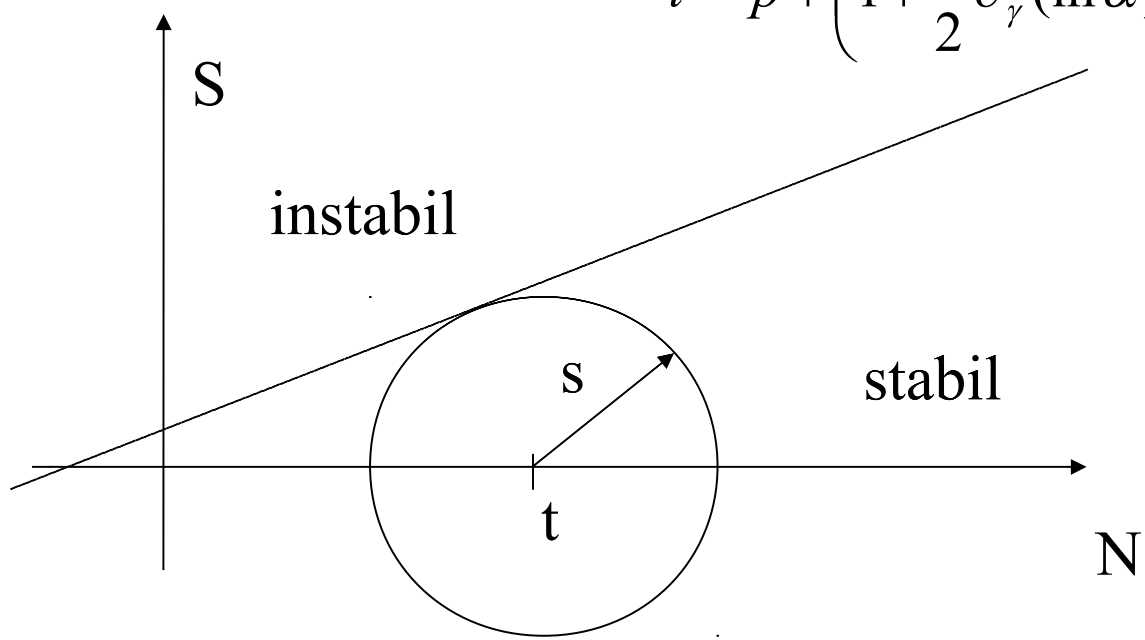
$$\mathbf{N} := \mathbf{n} \cdot \mathbf{P}^{r} \cdot \mathbf{n} \qquad \mathbf{S} := \mathbf{P}^{r} - \mathbf{N}$$

$$\mathbf{S}^2 + (\mathbf{N} - \mathbf{t})^2 = \mathbf{s}^2$$

$$t = p + \left(1 + \frac{1}{2}\partial_{\gamma}(\ln \alpha)\right)s$$

$$s = \rho\alpha(\nabla\gamma)^2$$

$$t = p - \rho\alpha(\nabla\gamma)^2$$



Entrópia a (információ elméleti, prediktív, bayesi) statisztikus fizikában

(Jaynes, 1957):

Az információ mértéke egyértelmű általános fizikai feltételek mellett.

(Shannon, 1948; Rényi, 1963)

- Extenzivitás (átlag, sűrűség)
- Additivitás

$$s(f_1 f_2) = s(f_1) + s(f_2)$$

$$\Rightarrow \quad s(f) = -k \ln f$$

(egyértelmű megoldás)

Entrópia a “gyengén nemlokális” (?) statisztikus fizikában (Fisher, Frieden, Plastino, …):

– Extenzivitás

– Additivitás

$$s(f_1 f_2, D(f_1 f_2)) = \tilde{s}(f_1, Df_1) + \tilde{s}(f_2, Df_2)$$

– Izotrópia

$$s(f, Df) = \widehat{s(}f, (Df)^2)$$

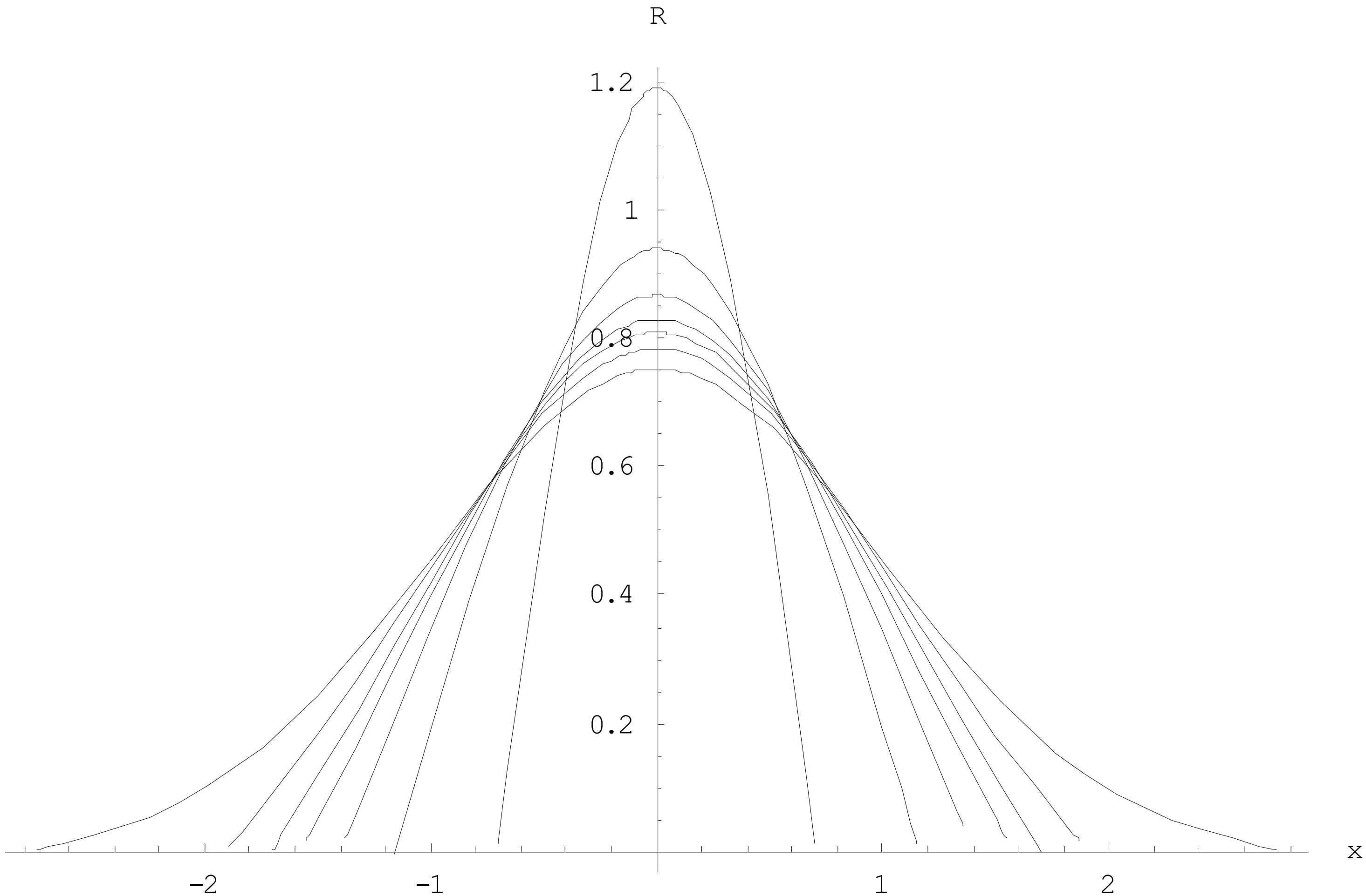
(egyértelmű megoldás)

$$\widehat{s}(f,(Df)^2) = -k \ln f - k_1 \frac{(Df)^2}{f^2}$$

Boltzmann-Gibbs-Shannon

Fisher

- Maxent : véges tartó, hatványfarok
- Magasabb deriváltakat nem érdemes



$$\Lambda = \frac{\alpha + k}{4k_1} = (1, 1.1, 1.2, 1.3, 1.5, 2, 5), \quad \frac{k}{2k_1} = 1, \quad \frac{\beta}{8mk_1} = 1$$

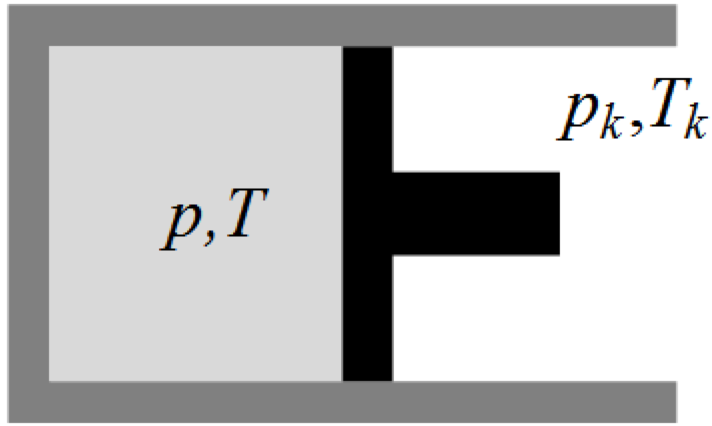
Összefoglalás

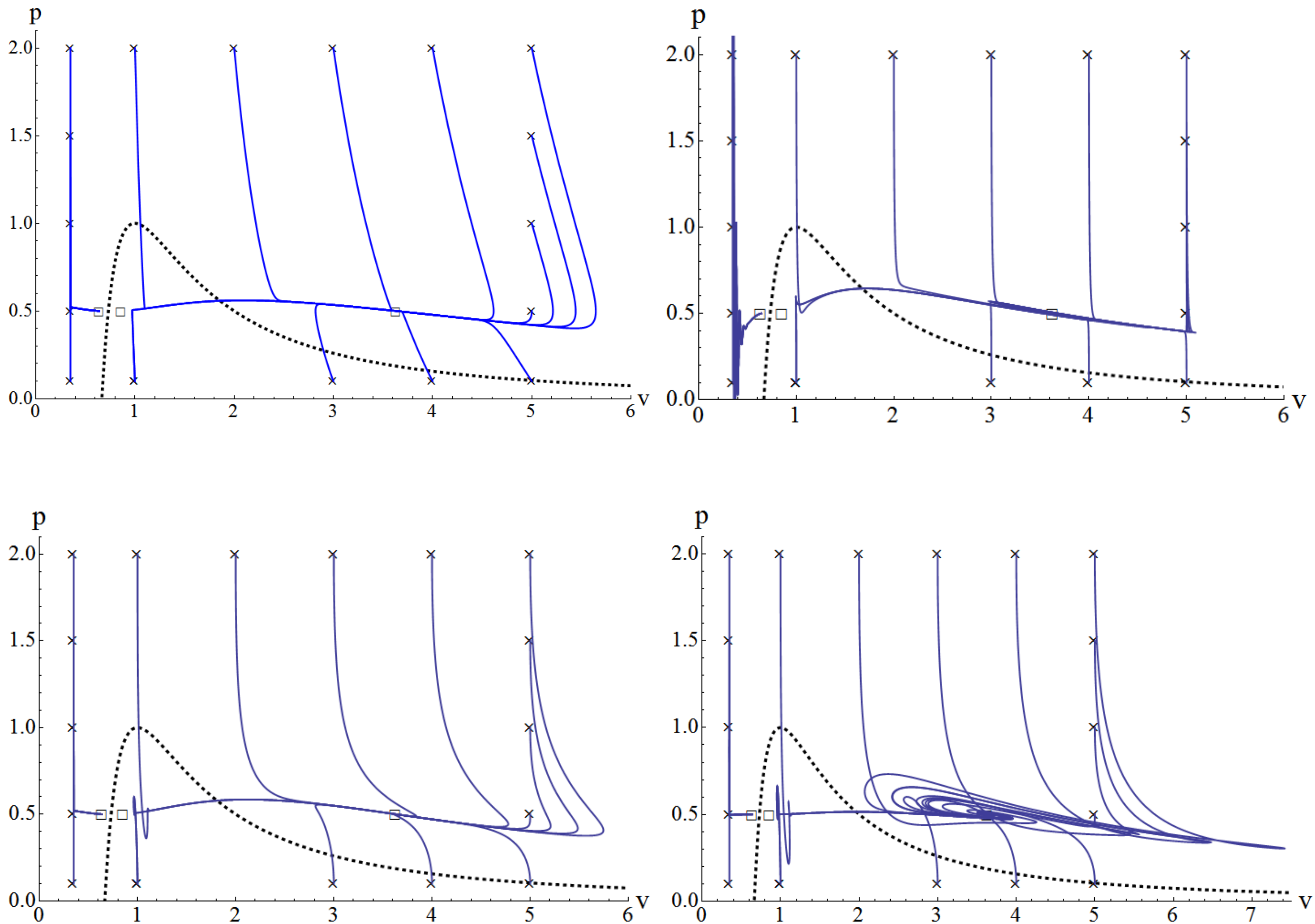
- Második főtétel – mozgásegyenletek konstrukciója és korrekciója
- Anyag - jellemzők
- Prediktív
- Univerzális:

Termodinamika

Statisztikus fizika

Mikro leírás


p,T
p_k,T_k


p
v
0
1
2
3
4
5
6
7
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0

4 MaxEnt calculations – the interaction of the two terms (1D ideal gas)

$$extr. = -\int f\left(k_1 \frac{(Df)^2}{f^2} - k\ln f\right)dp$$

$$-\beta\left(\int f\frac{p^2}{2m}dx - E\right) - \alpha\left(\int fdx - 1\right)$$

$$R := \sqrt{f}$$

$$R'' - \frac{k}{2k_1}R\ln R - \frac{\beta}{8mk_1}p^2 R - \frac{\alpha + k}{4k_1}R = 0$$

$$J_s = R'\delta R\,|_{boundary}$$

$$R'' - \frac{k}{2k_1} R \ln R - \frac{\beta}{8mk_1} p^2 R - \frac{\alpha + k}{4k_1} R = 0$$

$$R'(0) = 0$$ symmetry

$$R(0) = C \quad \Rightarrow \quad \alpha$$

There is no analitic solution in general

There is no partition function formalism

⇒ Numerical normalization

One free parameter: J_s

$$s(f_1 f_2) = s(f_1) + s(f_2)$$

$$\frac{\partial}{\partial f_1} s(f_1 f_2) = f_2 s'(f_1 f_2) = s'(f_1)$$

$$\frac{\partial}{\partial f_2} s(f_1 f_2) = f_1 s'(f_1 f_2) = s'(f_2)$$

$$s'(f_1 f_2) = \frac{s'(f_1)}{f_2} = \frac{s'(f_2)}{f_1}$$

$$f\, s'(f) = const. = -\kappa$$

$$s(f) = -\int \frac{\kappa}{f} df = -\kappa \ln f + \cancel{C}$$

$$s(f) = -\kappa \ln f$$