II. főtétel: általános elvtől a mérnöki alkalmazásig

Ván Péter
MTA, RMKI, Elméleti Főosztály

– II. főtétel általánosan és egységesen?
– Stabilitás és folyamatok
– Ginzburg-Landau-egyenlet
– Mezo-termo – Fokker-Planck-egyenlet
  - Membránok, hártyák, vékonyrétegek
– Összegzés

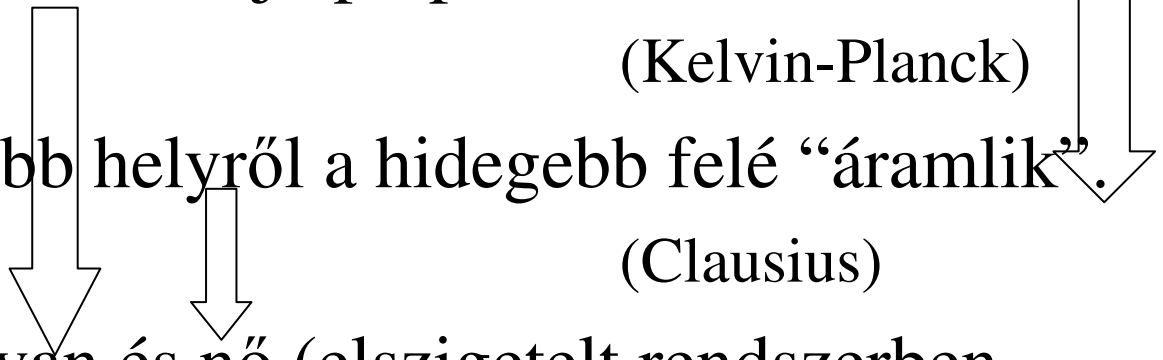
II. főtétel

– Nem létezik másodfajú perpetuum mobile.

(Kelvin-Planck)

– Hő a melegebb helyről a hidegebb felé “áramlik”.

(Clausius)



– Az entrópia van és nő (elszigetelt rendszerben lezajló spontán folyamatok esetén).

– $dS = d_rS + d_iS$ és $d_iS \geq 0$

– Az entrópiaprodukció nem negatív.

– Az entrópia a rendezetlenség mértéke.

– ….

– Ugyanarról van szó egyáltalán? (statisztikus fizika, sztochasztikus folyamatok, stb…)

– Van egy [illegible] mögötte?

– Használható ez valamire praktikusan?

Nemegyensúlyi termodinamika

Termodinamika $\neq$ hőmérséklet tudománya

Termodinamika $\neq$ makroszkópikus energiaváltozások tudománya

Termodinamika (?) $=$ makroszkópikus kontínuumok általános keretelmélete

Általános elvek:

– objektivitás
– II. főtétel
– szimmetriák

mechanika reverzibilis törvényei – speciális határeset

Mechanika:

Statika — Dinamika

Tömegpont — Kontínuum

Termodinamika:

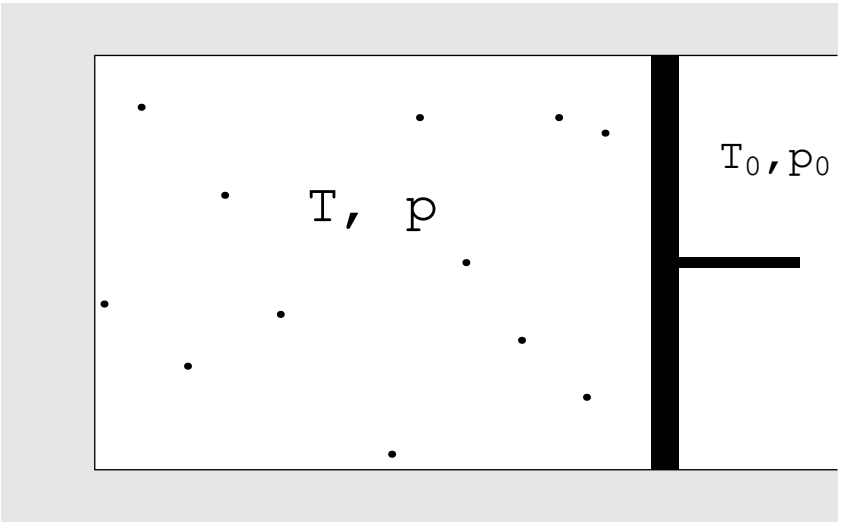
Egyensúlyi — Nem-egyensúlyi

Fenomenologikus — Statisztikus

Homogén — Kontínuum

Az egyensúlyi termodinamika (termosztatika)
is dinamikai elmélet, csak nincs mozgásegyenlete.

$$dE = TdS - pdV$$



A) $\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}, \quad \frac{\partial S}{\partial V} = \frac{p}{T}.$

B) $\dot{E} = Q - p\dot{V}$

$\dot{V} = g \quad ?$

‘mozgásegyenlet’

$$Q = -\lambda(T - T_0)$$

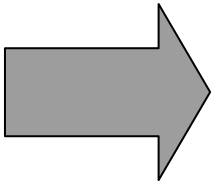
Termodinamikai elmélet általában

Dinamikai törvény: $\dot{a} = f(a)$

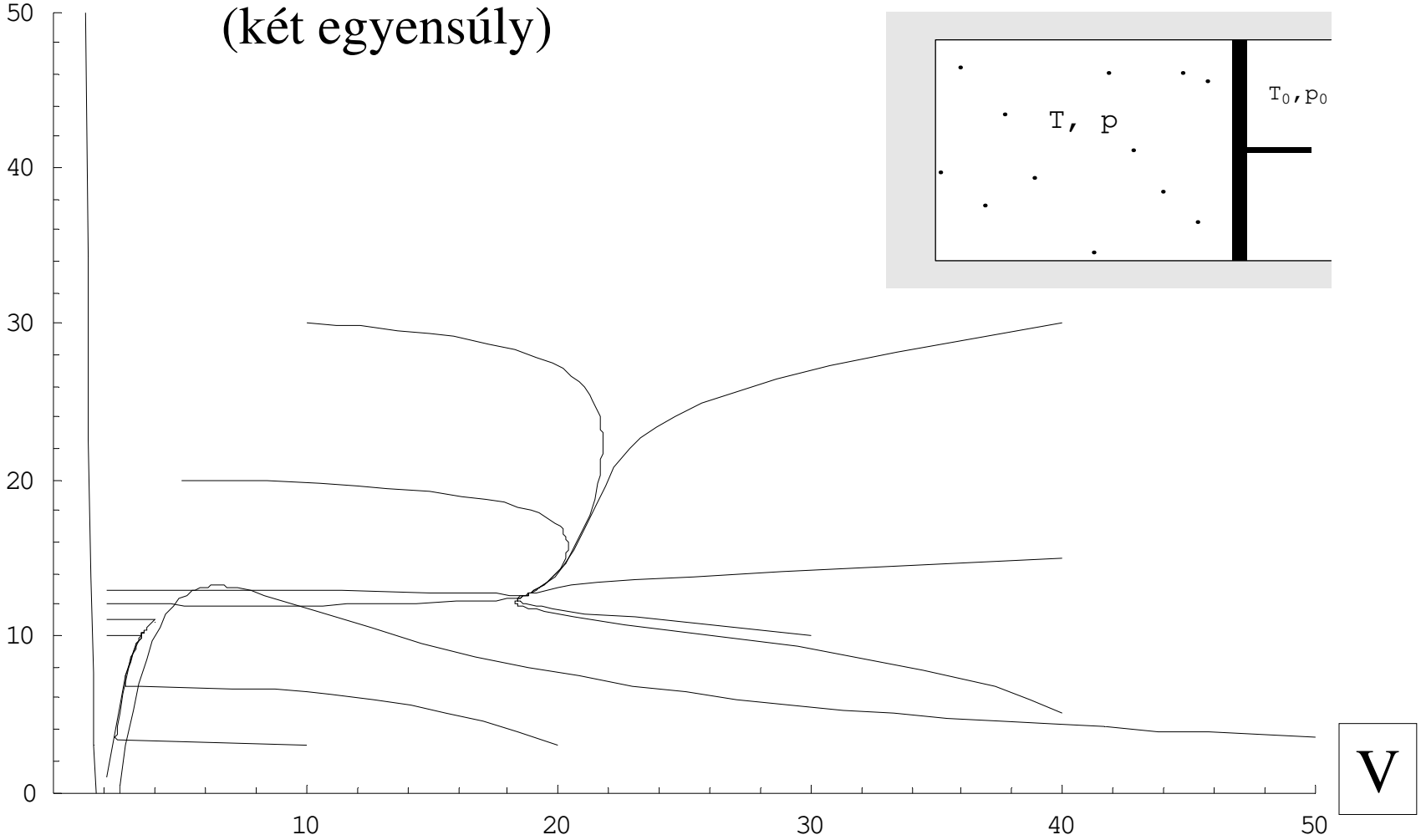
1 Sztatika (egyensúlyi tulajdonságok)

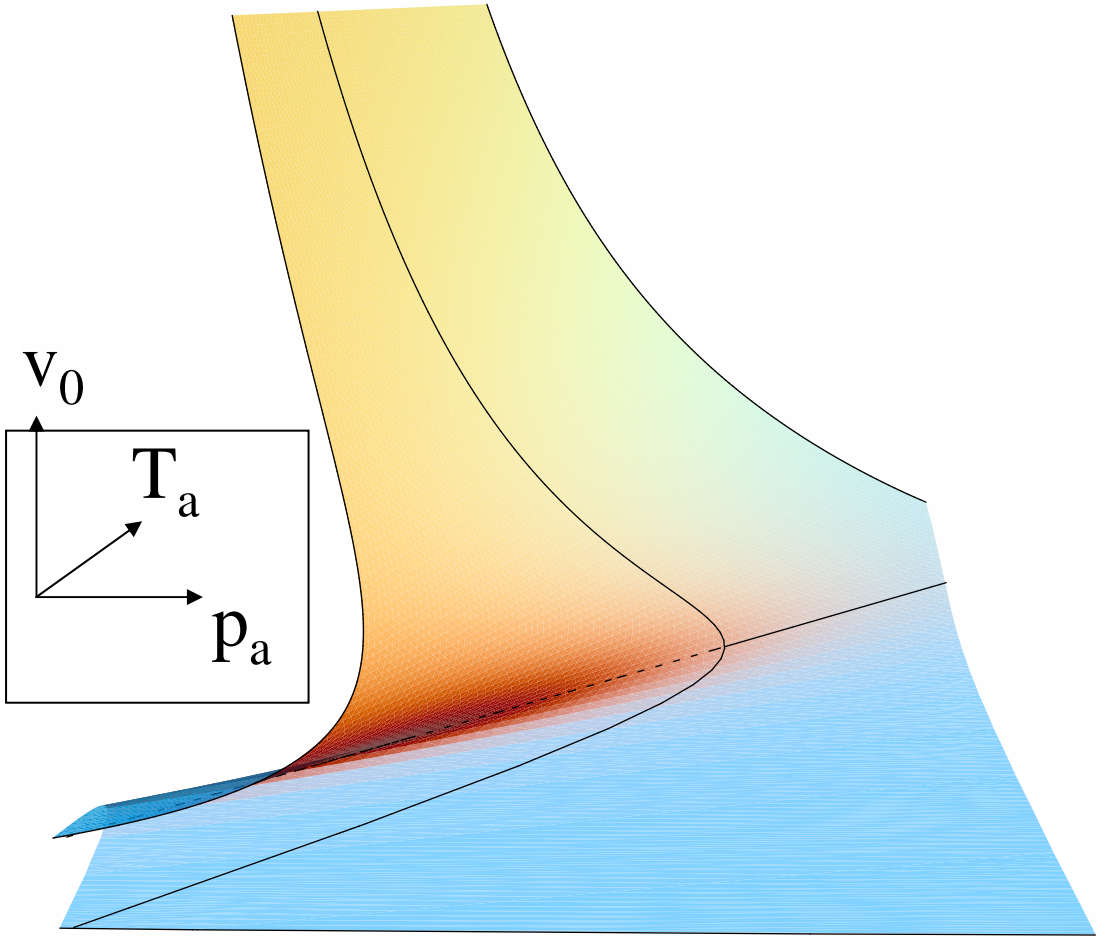
2 Dinamika

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

Stabilitási szerkezet  Dinamikai szerkezet

Egy Van der Waals gáz folyamatai (két egyensúly)





Van der Waals gáz
egy bifurkációs
diagrammja
(vasvilla)

Kontinuumok (klasszikus térelméletek), túl a lokális egyensúlyon:

	Tér	Idő
Erősen nemlokális	Térintegrálok	Memória funkcionálok
Gyengén nemlokális	Gradiensfüggő anyagfüggvények	Időderivált függő anyagfüggvények
Újra lokalizált	Áramszorzók	Dinamikai (belső) változók

II. főtétel - erős megszorítások

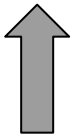
Általánosabban:

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

– állapottér: $\mathbf{a}$

– konstitutív tér: $C = (\mathbf{a}, \dot{\mathbf{a}}, \nabla\mathbf{a}, \ldots, \xi)$

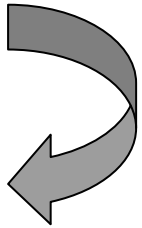
– anyagfüggvények: $\mathbf{j}_a(C)$



gyengén nemlokális

<u>Második főtétel:</u>

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



Anyagelmélet

Módszer: Liu eljárás - Farkas lemma - Lagrange szorzók

De: konstruktívan

Ginzburg-Landau (variációs)

$$F(\xi)=\int\left(f(\xi)+\frac{\lambda}{2}(\nabla\xi)^2\right)dV \quad \Longrightarrow \quad \delta_\xi F = f'(\xi)-\lambda\Delta\xi$$

$$\dot{\xi}=-l\,\delta_\xi F$$

$$\dot{\xi}=-l(f'(\xi)-\lambda\Delta\xi)$$

– II. főtétel
– variációs (!)
– $+\,k\Delta\dot{\xi}$

Ginzburg-Landau (termodinamikai, nem lokalizálható)

$$\partial_t \xi + F = 0$$

$$\partial_t \nabla \xi + \nabla F = 0$$

$$\partial_t s + \nabla \cdot \mathbf{j}_s \geq 0$$

$(\xi, \nabla\xi, \nabla^2\xi)$ konstitutív állapot

$(F, s, \mathbf{j_s})$ konstitutív függvények

Liu-eljárás (Farkas-lemma)

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

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

$$\partial_t \xi = -L(\partial_\xi s - \nabla \cdot \partial_{\nabla\xi} s)$$

Mezo-termo – eloszlás változók

"folytonos index"

$$d\phi = \sum_{i=1}^{n} A_i dn_i \quad \rightarrow \quad d\phi = \alpha\, df, \qquad f(\nu)$$

- $f(\nu)$ eloszlás: $\int f(\nu) d\nu = 1$
- Fizikai jelentés:
  - tömeg $\longrightarrow$ QGP
  - sebesség:

$$\phi = e - mf(\nu)\frac{\nu^2}{2}$$

Hiperkontínuumok: $f(t,x,\nu)$

$$\partial_t f + \nabla \cdot \mathbf{j} = \partial_t f + \nabla_x \cdot j_x + \nabla_\nu \cdot j_\nu = 0$$

$$\partial_t s + \nabla \cdot \mathbf{J} = \partial_t s + \nabla_x \cdot J_x + \nabla_\nu \cdot J_\nu \geq 0$$

Liu eljárás (Farkas lemma):

$$s(f), \qquad \mathbf{J} = s' \mathbf{j} = \alpha \mathbf{j}$$

$$\sigma_s = \mathbf{j} \cdot \nabla \alpha \geq 0 \longrightarrow \mathbf{j} = \mathbf{L} \nabla \alpha$$

Onsageri-vezetés

$$\mathbf{j} = \mathbf{L} \cdot \nabla \alpha \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} j_x &= L_{xx} \nabla_x \alpha + L_{x\nu} \nabla_\nu \alpha, \\ j_x &= L_{\nu x} \nabla_x \alpha + L_{\nu\nu} \nabla_\nu \alpha. \end{aligned}$$

$$\partial_t f + \nabla \cdot (\mathbf{L} \cdot \nabla \alpha) =$$

$$\boxed{\partial_t f + \nabla_x \cdot (L_{xx} \nabla_x \alpha + L_{x\nu} \nabla_\nu \alpha) + \nabla_\nu \cdot (L_{\nu x} \nabla_x \alpha + L_{\nu\nu} \nabla_\nu \alpha) = 0}$$

Spec.: $\hat{\alpha} = D \log f + m \dfrac{\nu^2}{2}$

$$L_{xx} = 0, \quad L_{x\nu} = L_{\nu x} = 0, \quad L_{\nu\nu} = f \, D_d(f)$$

$$\boxed{\partial_t f + \partial_\nu (m D_d \nu f) + \partial_\nu (D D_d \partial_\nu f) = 0}$$

Fokker-Planck-egyenlet

Rétegek és hártyák (2D+):

Jelenségek:

felület durvulás

transzport

Anyagi szimmetria – köbös, vagy felületes

- Vezetési együtthatók – extra csatolások!
- Szabadenergia

Pl. $$\Phi_A(P) = a_1(P_x^2 + P_y^2) + a_{11}(P_x^4 + P_y^4) + a_3 P_z^2 + a_{33} P_z^4 +$$
$$a_{13} P_z^2 (P_x^2 + P_y^2) + \alpha_{33}\left(\partial_z P_z\right)^2 + \alpha_{11}\left(\left(\partial_x P_x\right)^2 + \left(\partial_y P_y\right)^2\right) +$$
$$\alpha_{44}\left(\left(\partial_z P_x\right)^2 + \left(\partial_z P_y\right)^2\right) + \ldots.$$

Összefoglalás

- Második főtétel
  - Mozgásegyenletek konstrukciója és korrekciója
  - Anyag - jellemzők
  - Prediktív
- Mezo szint
  - Eloszlások: Fokker-Planck
- Mikro szint?
- Mérnökség – fizika
  - Alapok - alkalmazások