УДК 517.9:536.2

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ЦЕПОЧКЕ

А.О. Сыромясов

Мордовский госуниверситет им. Н.П. Огарева

syal1@yandex.ru

Поступила в редакцию 30.11.2012

Изучается влияние, оказываемое периодической цепочкой идентичных сфер на распределение температуры в однородной среде, а также температурные поля внутри самих частиц. Цепочка может быть как бесконечной, так и конечной. Исследован предельный переход при увеличении количества сфер в цепочке.

Ключевые слова: уравнение теплопроводности, периодическая цепочка, мультиполь, термодинамическое взаимодействие, тензорные функции.

Введение

В технологических и природных процессах, как правило, участвуют не чистые вещества, а дисперсные среды. Наличие дисперсной фазы существенно влияет на свойства смеси; в частности, взвеси искажают распределение температуры в среде. Возмущение, создаваемое совокупностью частиц, не сводится к сумме возмущений, создаваемых каждой из них по отдельности, что позволяет говорить о термодинамическом взаимодействии частиц взвеси. Это взаимодействие не является силовым. Его механизм выражается в том, что до каждой частицы «доходит» поле, уже искаженное другими частицами.

Существует достаточно много ситуаций, когда одинаковые по своим свойствам и размерам дисперсные частицы образуют периодическую цепочку [1]. Например, такая структура образуется под влиянием электрического [2] или магнитного поля [3].

Моделирование межчастичных взаимодействий вызывает проблемы, связанные с усложнением геометрии задачи. В [4] решалась задача о термодинамических свойствах бесконечных трехмерных периодических решеток частиц. Одномерные периодические структуры, тем более, конечные, не рассматривались, хотя реальные периодические структуры всегда конечны.

В связи с этим актуально моделирование термодинамического взаимодействия частиц, образующих бесконечную или конечную периодическую цепочку.

Общее решение задачи о температуре в среде с включениями

Рассмотрим неподвижную среду, где введена декартова система координат $Ox_1x_2x_3$ с началом O. Положение произвольной точки пространства в указанной системе координат определяется вектором $\vec{x}=(x_1,x_2,x_3)$. Пусть $\vec{e}_j$ – единичный вектор в направлении оси Ox_j. В этой среде размещены сферические частицы с радиусами a_1, a_2, a_3… Положения центров сфер задаются векторами $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$ и т. д.

Индексом f обозначим величины, относящиеся к исходной среде, а номером N – к N-й частице. Теплопроводность среды обозначим через κ_f, теплопроводность N-й частицы – κ_N.

Вдали от частиц задано некоторое стационарное поле температуры T_∞. Требуется найти возмущенные поля температуры T_f и $T_p(N)$ – вне частиц и внутри каждой из них. Указанные величины удовлетворяют соотношениям:

$$\Delta T_\infty = 0,\ \Delta T_f = 0,\ \Delta T_p(N) = 0\ \forall N, \tag{1}$$

$$T_f = T_p(N),\ |\vec{x}-\vec{r}_N| = a_N, \tag{2}$$

$$\kappa_f \frac{\partial T_f}{\partial n} = \kappa_N \frac{\partial T_p(N)}{\partial n},\ |\vec{x}-\vec{r}_N| = a_N, \tag{3}$$

$$|T_p(N)| < \infty,\ |\vec{x}-\vec{r}_N| \le a_N, \tag{4}$$

$$T_f \to T_\infty,\ |\vec{x}| \to \infty. \tag{5}$$

Соотношение (1) есть стационарное уравнение теплопроводности, которому удовлетворяют все изучаемые температурные поля. Уравнения (2) и (3) отражают непрерывность

Работа выполнена в рамках проекта №14.B37.21.0176 Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг.

температуры и теплового потока на поверхности сфер. Равенство (4) – это условие конечности температуры внутри частиц. Условие (5) означает, что на удаленном расстоянии от частиц возмущения, вызванные ими, затухают. Далее изучается случай, когда

$$T_\infty = T_0 + T_s x_s. \tag{6}$$

Здесь T_0 – температура в точке O, $\vec{\Theta} = (T_1, T_2, T_3)$ – постоянный градиент температуры.

Индексы $i, j, k\ldots$ могут принимать значения от 1 до 3. По повторяющимся индексам производится суммирование в указанных пределах.

Задача (1)–(6) для одиночной сферы с центром в точке O решена в [5]:

$$T_f = T_0 + T_s x_s + a_1^3 \frac{\kappa_1 - \kappa_f}{\kappa_1 + 2\kappa_f} T_s \frac{\partial}{\partial x_s}\left(\frac{1}{|\vec{x}|}\right),$$
$$T_p(1) = \frac{3\kappa_1}{\kappa_1 + 2\kappa_f} T_s x_s. \tag{7}$$

В [6] приводится решение аналогичной задачи о диэлектрической сфере в однородном поле.

При решении задачи о произвольной совокупности сфер представим T_f в виде

$$T_f = T_\infty + T_{\text{part}},$$

где T_{part} – возмущение, вызванное присутствием частиц. В силу (1), оно должно быть гармоническим. Поэтому разложим его по частным производным фундаментального решения уравнения Лапласа $1/|\vec{x}|$:

$$\begin{aligned} T_{\text{part}} = \sum_N \Big[& H_j^{\text{ext}}(N) L_j(\vec{x} - \vec{r}_N) + \\ & + F_{jk}^{\text{ext}}(N) L_{jk}(\vec{x} - \vec{r}_N) + \\ & + G_{jkl}^{\text{ext}}(N) L_{jkl}(\vec{x} - \vec{r}_N) + \\ & + D_{jklm}^{\text{ext}}(N) L_{jklm}(\vec{x} - \vec{r}_N) + \\ & + T_{jklms}^{\text{ext}}(N) L_{jklms}(\vec{x} - \vec{r}_N) + \\ & + P_{jklmst}^{\text{ext}}(N) L_{jklmst}(\vec{x} - \vec{r}_N) + \ldots \Big]. \end{aligned} \tag{8}$$

Здесь $L_{j\ldots k}$ – мультиполи, которые находим по правилам:

$$L_0(\vec{x}) = \frac{1}{|\vec{x}|},\ L_{j\ldots k}(\vec{x}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \ldots \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{1}{|\vec{x}|}\right).$$

Тензоры $H_j(N)$, $F_{jk}(N)$,… не зависят от $\vec{x}$, однако зависят от радиусов частиц, положения частиц друг относительно друга и начала координат, величины и ориентации внешнего градиента температуры. Они должны быть найдены из условий (2), (3). Требование (5) выполнено автоматически, так как мультиполи стремятся к нулю при $|\vec{x}| \to \infty$.

Суммирование производится по всем частицам взвеси, помещенным в среду; это позволяет учесть вклад каждой частицы в итоговое возмущение поля T_∞. С другой стороны, в отличие от (7), в сумме (8) присутствуют мультиполи не только 1-го, но и высших рангов. Это значит, что искомое суммарное возмущение не сводится к сумме возмущений, «приходящих» от каждой частицы по отдельности.

Внутри каждой из частиц температура также гармонична. Чтобы выполнялось условие (4), функция $T_p(N)$ должна иметь общий вид

$$\begin{aligned} T_p(N, \vec{y}) &= T_s r_{Ns} + A_0^{\text{int}}(N) + \\ &+ H_j^{\text{int}}(N) L_j(\vec{y}) |\vec{y}|^3 + F_{jk}^{\text{int}}(N) L_{jk}(\vec{y}) |\vec{y}|^5 + \\ &+ G_{jkl}^{\text{int}}(N) L_{jkl}(\vec{y}) |\vec{y}|^7 + D_{jklm}^{\text{int}}(N) L_{jklm}(\vec{y}) |\vec{y}|^9 + \\ &+ T_{jklms}^{\text{int}}(N) L_{jklms}(\vec{y}) |\vec{y}|^{11} + \\ &+ P_{jklmst}^{\text{int}}(N) L_{jklmst}(\vec{y}) |\vec{y}|^{13} + \ldots \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь для краткости обозначено $\vec{y} = \vec{x} - \vec{r}_N$.

Чтобы найти $H_j(N)$, $F_{jk}(N)$,…, требуется подставить (8) и (9) в граничные условия (2) и (3) на поверхности каждой из сфер. Для этого мультиполи $L_j \ldots k(\vec{x} - \vec{r}_N)$ раскладываются в ряды Тейлора по координатам $\vec{y}$ в окрестности центров частиц. Сами тензорные коэффициенты представляются в виде асимптотических разложений по параметру $\varepsilon = a/r$, где a – радиус одной из сфер, r – расстояние между центрами двух ближайших частиц.

Излагаемый подход ранее применялся, например, при описании термодинамического взаимодействия двух частиц [7]. В частности, было показано, что $A_0^{\text{int}}(N)$ есть средний (по объему или поверхности) нагрев взвешенной сферы относительно окружающей среды.

Взаимодействие частиц в бесконечной цепочке

Пусть идентичные сферы радиуса a и теплопроводности κ_p образуют периодическую цепочку, в которой расстояние между центрами соседних частиц равно r, $r \geq 2a$. Можно считать, что цепочка расположена вдоль оси Ox_1, а начало координат расположено в центре одной из сфер. В этом случае радиус-вектор центра N-й сферы $\vec{r}_N = r(N, 0, 0)$, где N – целое число (необязательно натуральное). Без ограничения общности можно считать, что градиент $\vec{\Theta}$ лежит в плоскости Ox_1x_2: $\vec{\Theta} = (T_1, T_2, 0)$.

Введем периодические мультиполи

$$L^{\infty}_{j...k}(\vec{x}) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} L_{j...k}(\vec{x}-\vec{r}_N). \qquad (10)$$

Если тензорные коэффициенты не зависят от N, то T_{part} и T_p будут периодическими:

$$\begin{gathered} T_{\text{part}}(\vec{x}) = H^{\text{ext}}_j L^{\infty}_j(\vec{x}) + \\ +F^{\text{ext}}_{jk} L^{\infty}_{jk}(\vec{x}) + G^{\text{ext}}_{jkl} L^{\infty}_{jkl}(\vec{x}) + \\ +D^{\text{ext}}_{jklm} L^{\infty}_{jklm}(\vec{x}) + T^{\text{ext}}_{jklms} L^{\infty}_{jklms}(\vec{x}) + \\ +P^{\text{ext}}_{jklmst} L^{\infty}_{jklmst}(\vec{x}) + W^{\text{ext}}_{jklmstq} L^{\infty}_{jklmstq}(\vec{x}) + ... \end{gathered} \qquad (11)$$

В [6] выполнялась периодизация мультиполей по трем переменным. Поэтому ряды для мультиполей низкого ранга расходились, и в них требовалось вводить поправки. В настоящей работе ряды (10) сходятся без внесения поправок.

Периодичность T_{part} и T_p позволяет учитывать граничные условия (2) и (3) лишь на поверхности частицы с центром в точке O. Вместо (5) следует рассматривать затухание возмущений на удалении от оси цепочки: $T_f \to T_\infty$, $\rho \to \infty$. Здесь и далее $\rho = \sqrt{x_2^2 + x_3^2}$.

При больших $|\vec{x}|$ мультиполь M-го ранга имеет порядок малости $|\vec{x}|^{-(M+1)}$. Отсюда, заменяя суммирование по N интегрированием в бесконечных пределах, можно вывести, что при $\rho \to \infty$ периодический мультиполь M-го ранга имеет порядок малости ρ^{-M}.

Для подстановки в условия (2), (3) перепишем функции в виде

$$L^{\infty}_{j...k}(\vec{x}) = L_{j...k}(\vec{x}) + L'_{j...k}(\vec{x}),$$
$$L'_{j...k}(\vec{x}) = \sum_{N\neq 0} L_{j...k}(\vec{x}-\vec{r}_N),$$

и разложим суммы по всем ненулевым N в ряды Тейлора в окрестности нуля:

$$L'_{i_1...i_M}(\vec{x}) = \sum_K \frac{1}{K!} L'_{i_1...i_M j_1...j_K}(\vec{0}) x_{j_1}...x_{j_K}.$$

Легко показать, что $L'_{i...j}(\vec{0})$ обращаются в нуль, если их ранг нечетен.

Для установления структуры $L'_{i...j}(\vec{0})$ применим теорию нелинейных тензорных функций тензорного аргумента [8]. Для рассматриваемой конфигурации Ox_1 есть поворотная ось бесконечного порядка, через которую проходят зеркальные плоскости Ox_1x_2 и Ox_1x_3. Перпендикулярно оси проходит зеркальная плоскость Ox_2x_3. Эти элементы симметрии задают текстуру $m\cdot\infty{:}m$ с базисом из тензоров $\vec{\delta}$ и $\vec{b} = \vec{e}_1$, поэтому

$$L'_{ij}(\vec{0}) = \frac{A_2}{r^3}(\delta_{ij} - 3b_ib_j),$$

$$\begin{gathered} L'_{ijkl}(\vec{0}) = \frac{A_4}{r^5}(\delta_{(ij}\delta_{kl)} - 5\delta_{(ij}b_kb_{l)} \\ +35b_ib_jb_kb_l),... \end{gathered} \qquad (12)$$

Здесь учтены порядки мультиполей по r, их симметрия по индексам, равенство нулю их сверток. Параметры A_2, A_4 и т.д. находятся подстановкой в (12) конкретных наборов индексов i, j,… и выражаются через дзета-функцию Римана: $A_2 = -2\zeta(3)$, $A_4 = 6\zeta(5)$,…

С использованием теории [8] задача о бесконечной цепочке была решена с точностью до ε^{10}, $\varepsilon = a/r$. Вне зависимости от ориентации внешнего градиента температуры точка O – центр симметрии граничных условий. Это значит, что T_{part} и T_p – нечетные функции $\vec{x}$. Поэтому в разложениях (9) и (11) тензорные коэффициенты четного ранга равны нулю.

При $\vec{\Theta} = (0, T_2, 0)$ плоскость Ox_2x_3 является зеркальной для граничных условий задачи. Перпендикулярная ей Ox_1x_2 также есть плоскость симметрии. Указанные элементы симметрии определяют ромбическую сингонию; в качестве ее тензорного базиса можно выбрать

$$\vec{e}_2 = \vec{c},\ \vec{e}_1^{\,2} = \vec{b}^2,\ \vec{\delta} = \vec{e}_1^{\,2} + \vec{e}_2^{\,2} + \vec{e}_3^{\,2}.$$

Нет смысла включать в представление коэффициентов $\vec{H}, \vec{G}$ и т.д. символ Кронекера: его свертка с любым мультиполем равна нулю. Далее, граничные условия линейны по вектору $\vec{\Theta} = T_2\vec{c}$, поэтому в разложения $\vec{H}, \vec{G},...$ вектор $\vec{c}$ входит в первой степени. С учетом симметрии коэффициентов по индексам получим:

$$\begin{gathered} \vec{H} = T_2 HB\cdot\vec{c},\ \ \vec{G} = T_2 GB\left(\vec{c}\vec{b}^2 + \vec{b}\vec{c}\vec{b} + \vec{b}^2\vec{c}\right), \\ \vec{T} = T_2 TB\left(\vec{c}\vec{b}^4 + \vec{b}\vec{c}\vec{b}^3 + \vec{b}^2\vec{c}\vec{b}^2 + \vec{b}^3\vec{c}\vec{b} + \vec{b}^4\vec{c}\right),... \end{gathered} \qquad (13)$$

Коэффициенты разложения HB^{ext}, GB^{ext}, …, WB^{int} по степеням ε были найдены с помощью следующего алгоритма:

1. Выражения (9), (11), (12) и (13) подставляются в граничные условия на поверхности сферы с центром в начале координат.

2. В полученных выражениях приводятся подобные слагаемые по степеням ε.

3. Приводятся подобные слагаемые по выражениям вида $x_1^{n_1}x_2^{n_2}x_3^{n_3}$; множитель при каждом из таких выражений приравнивается к нулю. Тем самым, для каждой степени ε получается система линейных уравнений, решив которую, можно найти коэффициенты разло-

жения.

4. Решения систем уравнений для низших степеней ε подставляются в системы, отвечающие старшим степеням параметра.

Для реализации алгоритма был разработан пакет применения в системе Mathematica. Преимуществом данной системы является то, что она позволяет находить решение в аналитическом виде, удобном для дальнейшего анализа. Кроме того, аналитическое решение в Mathematica корректно учитывает условие затухания возмущений (5). При численном решении, например, в конечно-элементном пакете ANSYS, задать бесконечную расчетную область невозможно.

Приведем первые слагаемые в разложениях HB^{ext}, GB^{ext},…:

$$HB^{\text{ext}} = a^3 \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f}\left[1 + A_2 \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f}\varepsilon^3 + \left(A_2 \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f}\varepsilon^3\right)^2 + \ldots\right],$$

$$HB^{\text{int}} = -\frac{3\kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f}\left[1 + A_2 \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f}\varepsilon^3 + \left(A_2 \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f}\varepsilon^3\right)^2 + \ldots\right], \tag{14}$$

$$GB^{\text{ext}} = -\frac{1}{6}a^5 A_4 \frac{\left(\kappa_p - \kappa_f\right)^2 \varepsilon^5}{\left(\kappa_p + 2\kappa_f\right)\left(3\kappa_p + 4\kappa_f\right)},$$

$$GB^{\text{int}} = \frac{7}{18a^2} A_4 \frac{\kappa_f\left(\kappa_p - \kappa_f\right)\varepsilon^5}{\left(\kappa_p + 2\kappa_f\right)\left(3\kappa_p + 4\kappa_f\right)},\ldots$$

При $\varepsilon \to 0$ эти выражения переходят в решение задачи об одиночной сфере (7).

Аналогично была изучена цепочка в среде с продольным градиентом. В этом случае плоскости Ox_1x_2 и Ox_1x_3 – зеркальные, а Ox_1 – поворотная ось бесконечного порядка. Эти элементы симметрии задают текстуру $\infty\cdot m$ с базисом

$$\vec{b} = \vec{e}_1,\ \vec{\delta}.$$

В итоге, тензорные коэффициенты имеют следующую структуру:

$$\vec{H} = T_1 HA\cdot\vec{b},\ \vec{G} = T_1 GA\cdot\vec{b}^3,\ \vec{T} = T_1 TA\cdot\vec{b}^5,\ldots \tag{15}$$

Скалярные функции HA^{ext},…,WA^{int} также были найдены с точностью до ε^{10}.

При $\vec{\Theta}\perp Ox_1$ в силу симметрии относительно плоскости Ox_2x_3 функции T_{part} и T_p четны по x_1. Поэтому их производные нечетны по данной переменной. Следовательно,

$$\left.\frac{\partial T_{\text{part}}}{\partial x_1}\right|_{x_1=-r/2} = -\left.\frac{\partial T_{\text{part}}}{\partial x_1}\right|_{x_1=r/2}.$$

Но при $x_1 = \pm\, r/2$ они должны быть равны вследствие периодичности T_{part}. Значит, обе они равны нулю. Поэтому на границе ячейки периодичности изотермы T_f и T_{part} параллельны Ox_1.

Нормаль к поверхности ячейки с точностью до знака совпадает с $\vec{e}_1$, поэтому на границе ячейки и $\partial T_{\text{part}}/\partial n = 0$. Отсюда следует, что в среде с перпендикулярным градиентом температуры ячейка периодичности не обменивается теплом с остальным пространством.

При $\vec{\Theta}\parallel Ox_1$ ячейка периодичности не адиабатична, ибо T_f нечетна по x_1.

Сравним распределение температуры вокруг бесконечной цепочки и цилиндра с той же осью симметрии, теплопроводностью и при таком же внешнем градиенте температуры $\vec{\Theta} = \left(T_1, T_2, 0\right)$. Рассуждая аналогично [5], найдем, что в среде с перпендикулярным градиентом температуры возмущение, вызванное присутствием цилиндра радиуса R, равно

$$T_{\text{part}} = T_2 \cos\theta \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + \kappa_f}\frac{R^2}{\rho}. \tag{16}$$

Здесь $x_2 = \rho\cos\theta$, $x_3 = \rho\sin\theta$.

В случае цепочки частиц наиболее медленно затухающим слагаемым (11) является $H_j^{\text{ext}} L_j^{\infty}\left(\vec{x}\right)$. В разложении (14) величины HB^{ext} возьмем лишь слагаемое нулевого порядка по малому параметру ε и учтем скорость затухания $L_j^{\infty}\left(\vec{x}\right)$. В итоге получим, что при $\rho \to \infty$

$$T_{\text{part}} \approx C\varepsilon T_2 \cos\theta \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f}\frac{a^2}{\rho},\ C = \text{const}.$$

Сравнивая это соотношение с формулой (16), можно сделать вывод: при $\rho \to \infty$ цепочка вызывает в температурном поле такое же возмущение, как и цилиндр радиуса

$$R = a\sqrt{C\varepsilon \frac{\kappa_p + \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f}}.$$

При $\varepsilon \to 0$, когда частицы отдаляются друг от друга, R обращается в нуль.

Можно показать, что у задачи о бесконечном цилиндре в среде с продольным градиентом температуры нет нетривиального решения. В то же время такое решение, заданное формулами (15), есть у задачи о бесконечной цепочке сфер.

Суммирование рядов с мультиполями

При вычислении температуры в каждой конкретной точке и построении изотерм приходится суммировать ряды (10). В силу того, что скорость сходимости рядов низка, прямое суммирование рядов неэффективно. Поэтому предлагается метод быстрого суммирования.

Его идея состоит в том, что все узлы цепочки разделяются на две группы – «ближнюю», при $|N| \le N_0$, и «дальнюю». По узлам «ближней» группы происходит непосредственное суммирование мультиполей; по узлам «дальней» группы суммируются не сами мультиполи, а их тейлоровские разложения (до некоторой степени D) вблизи $\vec{x}=\vec{0}$:

$$L^{\infty}_{i_1\ldots i_M}\left(\vec{x}\right) \approx \sum_{N=-N_0}^{N_0} L_{i_1\ldots i_M}\left(\vec{x}-\vec{r}_N\right)+$$

$$+\sum_{|N|>N_0}\sum_{K=0}^{D}\frac{1}{K!}L_{i_1\ldots i_M j_1\ldots j_K}\left(-\vec{r}_N\right)x_{j_1}\ldots x_{j_K}.$$

Преимущества этого подхода раскрываются, если переписать указанное равенство в виде

$$L^{\infty}_{i_1\ldots i_M}\left(\vec{x}\right) \approx \sum_{N=-N_0}^{N_0} L_{i_1\ldots i_M}\left(\vec{x}-\vec{r}_N\right)+$$

$$+\sum_{K=0}^{D}\frac{1}{K!}\Big[L'_{i_1\ldots i_M j_1\ldots j_K}\left(\vec{0}\right)-$$

$$-\sum_{|N|\le N_0,N\ne 0}L_{i_1\ldots i_M j_1\ldots j_K}\left(-\vec{r}_N\right)\Big]x_{j_1}\ldots x_{j_K}.$$

Суммирование теперь осуществляется в пределах от $-N_0$ до N_0, а это число предполагается сравнительно небольшим. Входящие сюда мультиполи $L'_{i_1\ldots i_M j_1\ldots j_K}(\vec{0})$ выражаются через дзета-функцию Римана согласно формулам (12), а алгоритмы ее вычисления хорошо известны. Необходимый набор значений $\zeta(q)$ можно вычислить заранее и затем использовать.

Метод показал достаточно высокое быстродействие. Так, чтобы найти сумму (10) для мультиполя 1-го ранга с точностью 10^{-14}, оказалось достаточно взять $D = 3$ и $N_0 = 1708$. Для достижения такой же точности без модификации ряда потребовалось взять $N_0 = 20480000$.

Конечная цепочка частиц

Если цепочка конечна, то при разных N тензорные коэффициенты будут различны. Для удовлетворения условий нечетности T_f требуется, чтобы выполнялись соотношения:

$$\begin{gathered}H_j(-N)=H_j(N), F_{jk}(-N)=-F_{jk}(N),\\ G_{jkl}(-N)=G_{jkl}(N), D_{jklm}(-N)=-D_{jklm}(N),\ldots\end{gathered}\tag{17}$$

При внешнем градиенте, перпендикулярном и параллельном оси цепочки, тензорные коэффициенты имеют соответственно вид (13) и (15). Метод нахождения скалярных функций HB^{ext}, FB^{ext},… также остается прежним.

Отличие состоит в том, что вычислительная сложность задачи при увеличении длины цепочки резко возрастает. Во-первых, тензоры четного ранга теперь не равны нулю. Во-вторых, в цепочке из N_p частиц с учетом (17) необходимо рассматривать не одно, как ранее, а $\lceil N_p/2\rceil$ граничных условий (2) и (3). В-третьих, в силу конечности сумм усложняется выражение для T_{part}. Поэтому при решении задачи для цепочек большой, но конечной (N_p порядка десятков или сотен) длины были использованы возможности вычислительного кластера факультета математики и информационных технологий МГУ им. Н.П. Огарева. Кластер работает под управлением Windows 2008 Server и имеет 4 узла с характеристиками: 2 4-ядерных процессора Xeon E5410, 16GB RAM. Использование кластера позволило решить задачу о цепочке из 50–100 частиц в течение 5-6 часов.

При дальнейшем анализе полученных решений выяснилось, что вне зависимости от длины цепочки и номера частицы в ней справедливы равенства

$$\frac{HB^{\text{ext}}(N)}{HB^{\text{int}}(N)}=-\frac{1}{3}a^3\frac{\kappa_p-\kappa_f}{\kappa_f},$$

$$\frac{FB^{\text{ext}}(N)}{FB^{\text{int}}(N)}=-\frac{2}{5}a^5\frac{\kappa_p-\kappa_f}{\kappa_f},$$

$$\frac{GB^{\text{ext}}(N)}{GB^{\text{int}}(N)}=-\frac{3}{7}a^7\frac{\kappa_p-\kappa_f}{\kappa_f},\ldots$$

Такие же соотношения верны для HA^{ext}, HA^{int} и т.д. Они позволяют при более подробном анализе дополнительно сократить число неизвестных.

Пусть $KA_M(N)$ и $KB_M(N)$ – скалярные функций в тензорных коэффициентах M-го ранга, описывающих распределение температуры при $\vec{\Theta}\,\|\,Ox_1$ и $\vec{\Theta}\perp Ox_1$ соответственно. Если ограничиться только их главными по степени ε приближениями, то независимо от N

$$KA^{\text{int}}_M(N)=-(M+1)KB^{\text{int}}_M(N),\tag{18}$$

$$\begin{gathered}KB^{\text{int}}_M(N)=\frac{2M+1}{M!}\frac{\varepsilon^{M+2}}{a^{M-1}}\times\\ \times\frac{\kappa_f\left(\kappa_p-\kappa_f\right)}{\left(\kappa_p+2\kappa_f\right)\left[M\kappa_p+(M+1)\kappa_f\right]}S_{M+2}\left(N,N_p\right).\end{gathered}\tag{19}$$

Здесь введено обозначение

$$S_{M+2}\left(N, N_p\right) = \sum_{n \neq N} \frac{\operatorname{sgn}\left(n-N\right)}{\left(n-N\right)^M},$$

суммирование ведется по N_p частицам, составляющим цепочку.

Для A_0 аналогичная формула имеет вид:

$$AA_M^{\text{int}}\left(N\right) = -a\varepsilon^2 \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f} S_2\left(N, N_p\right). \quad (20)$$

Соотношения (18), (19) и (20) позволяют выяснить поведение решения при изменении ε, изменении позиции сферы в цепочке и при изменении длины самой цепочки. В частности, поскольку $A_0 \neq 0$, то в конечной периодической структуре (в отличие от бесконечной) частица может нагреваться или охлаждаться относительно окружающей среды при внешнем градиенте, параллельном оси цепочки.

Изучим зависимость $A_0^{\text{int}}\left(N\right)$. Для простоты возьмем число частиц нечетным: $N_p = 2K+1$, $|N| \leq K$. Без ограничения общности считаем $N > 0$. Тогда из (20) следует, что

$$A_0^{\text{int}}\left(N\right) \approx -T_1 a\varepsilon^2 \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f} \sum_{m=K-N+1}^{K+N} \frac{1}{m^2}. \quad (21)$$

Если номер N фиксирован, а $K \to \infty$, то сумма по m (а вместе с ней и $A_0^{\text{int}}\left(N\right)$) стремится к нулю. Это обусловлено тем, что ряд, составленный из $1/m^2$, сходится, а значит, последовательность его частичных сумм фундаментальна. Таким же образом будут обращаться в нуль главные приближения других коэффициентов четного ранга.

Это означает, что при удлинении цепочки сфера с фиксированным номером смещается ближе к центру симметрии, и «краевые эффекты» для нее имеют меньшее значение. Вблизи центра симметрии распределение температуры практически такое же, как и в случае бесконечной цепочки. В частности, частица почти не нагревается.

Пусть $N = \nu K$ и $K \to \infty$. Используя асимптотику

$$\sum_{m=1}^{K} \frac{1}{m^2} = \frac{\pi^2}{6} - \frac{1}{K} + O\left(\frac{1}{K^2}\right), \; K >> 1,$$

выведем из (21), что

$$A_0^{\text{int}}\left(N\right) \approx -T_1 a\varepsilon^2 \frac{\kappa_p - \kappa_f}{\kappa_p + 2\kappa_f} \frac{2\nu}{1-\nu^2} \frac{1}{K}.$$

Таким образом, при фиксированном относительном удалении ν частицы от центра цепочки ее средний нагрев с удлинением цепочки убывает со скоростью $1/K$. Зная N_p, можно найти такое удаление ν, что для частиц с заданными ν эффект присутствия границ цепочки будет пренебрежимо мал. Например, при $K = 50$, $\nu = 0.9$, $\varepsilon = 0.3$, $\kappa_p = 2\kappa_f$ и $T_1 a = 1$°C (падение температуры на радиусе сферы) $A_0^{\text{int}}\left(N\right) \approx -4.26 \cdot 10^{-3}$ °C. На 90% длины цепочки нагрев частиц относительно среды не превышает 0.005 °C.

Заключение

В настоящей работе были получены такие результаты.

Возмущения, вносимые в линейное поле температуры бесконечной периодической цепочкой сфер, представлены равномерно сходящимися рядами по гармоническим мультиполям, при этом использована теория тензорных функций.

Разработан и протестирован численный метод суммирования таких рядов.

В системе Mathematica разработан пакет применения для решения задачи о бесконечной цепочке. Это позволило корректно учесть условия затухания возмущений на бесконечности и найти коэффициенты рядов в аналитическом виде, удобном для исследования.

Выявлены основные свойства распределения температуры вокруг бесконечной цепочки. В частности, если внешний градиент температуры перпендикулярен цепочке, то ячейка периодичности адиабатична. На больших удалениях от оси цепочка в среде с перпендикулярным градиентом создает такое же поле, как и цилиндр некоторого радиуса.

Решена задача о конечной цепочке сфер в среде с постоянным градиентом температуры. Разработанный пакет применения модифицирован для решения задачи о конечной цепочке. При больших, но конечных размерах цепочки для решения потребовалось привлечь вычислительный кластер НИУ МГУ им. Н.П. Огарева.

Найдена зависимость коэффициентов мультипольного разложения температуры от геометрических параметров задачи. Получена зависимость среднего нагрева частицы от ее положения в цепочке и от длины самой цепочки.

Исследован предельный переход при увеличении числа сфер в цепочке. Показано, что если цепочка достаточно длинна, то конечность ее размеров заметно влияет лишь на распределение температуры вблизи сравнительно немногих «концевых» частиц.

Работа выполнена в рамках проекта № 14.B37.21.0176 Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. Выполнение работ по проекту соответствует выполняемым в последнее время научно-образовательным программ по развитию суперкомпьютерного образования в стране [9–12]

Список литературы

1. Ефремов И.Ф. Периодические коллоидные структуры – Л.: Химия, 1971. 192 с.
2. Structure and dynamics of electrorheological fluids / J.E. Martin, J. Odinek, T.C. Halsey, R. Kamien // Physical Review E. 1998. V. 57, № 1. P. 756–775.
3. Direct observation of dipolar chains in iron ferrofluids by cryogenic electron microscopy / K. Butter, P.H.H. Bomans, P.M. Frederic, G.J. Vroege, A.P. Philipse // Nature materials. 2003. V. 2. P. 88–91.
4. Бердичевский В.Л. Вариационные принципы механики сплошной среды. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1983. 448 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. – 5-е изд. М.: Физматлит. 2001. 736 с.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры. 1959. 532 с.
7. Сыромясов А.О. Термодинамическое взаимодействие сферических частиц в среде с постоянным градиентом температуры // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2011. № 4, Ч. 3. С. 1158–1160.
8. Лохин В.В., Седов Л.И. Нелинейные тензорные функции от нескольких тензорных аргументов // Прикладная математика и механика. 1963. Т. 27. № 3. С. 393–417.
9. Гергель В.П., Стронгин Р.Г. Опыт Нижегородского университета по подготовке специалистов в области суперкомпьютерных технологий // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2010. № 3–1. С. 191–199.
10. Воеводин В.В., Гергель В.П. Суперкомпьютерное образование: третья составляющая суперкомпьютерных технологий // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2010. Т. 11. № 2. С.117–122.
11. Об опыте проведения программ повышения квалификации профессорско-преподавательского состава по направлению «Высокопроизводительные вычисления» / В.П. Гергель, А.В. Линев, И.Б. Мееров, А.В. Сысоев // Открытое и дистанционное образование. 2010. № 3. С.15–20.
12. Развитие системы суперкомпьютерного образования в России: текущие результаты и перспективы / В.В. Воеводин, В.П. Гергель, Л.Б. Соколинский, В.П. Демкин, Н.Н. Попова, А.В. Бухановский // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2012. № 4. С.268–274.

MATHEMATICALLY MODELING THERMODYNAMIC INTERACTION OF PARTICLES IN A PERIODIC CHAIN

A.O. Syromyasov

The effect of a periodic chain of identical spheres on the distribution of the temperature in a homogeneous medium, as well as the temperature fields inside the particles is studied. The chain can be infinite or finite. The limiting transition for the increasing number of the spheres in the chain is investigated.

Keywords: heat transfer equation, periodic chain, multipole, thermodynamic interaction, tensor functions.