ДОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

3 • 2007

МЕХАНІКА

УДК 539.3

Член-кореспондент НАН України **Я. Й. Бурак, В. Ф. Кондрат, О. Р. Грицина**

Математичне моделювання механотермодифузійних процесів у твердих розчинах при врахуванні локального зміщення маси

With the use of the methods of mechanics of solids and nonequilibrium thermodynamics, the mechanothermodiffusion model of isotropic n-component solid solution is proposed taking into account the local displacement of a mass. It is shown that this approach results in expanding the state parameters space, redefining the stress tensor, and the occurrence of additional volume forces.

У класичних моделях механотермодифузії [1–5] зазвичай процеси деформування, тепло- та масоперенесення описують параметрами стану $\widehat{\sigma}-\widehat{e}$, $T-S$, $\{\mu_k'\}-\{c_k\}$, $k=\overline{1,n-1}$, та потоками тепла $\vec{J}_q$ й маси домішок $\{\vec{J}_k\}$. При цьому потоки маси $\vec{J}_k$ трактуються як дифузійні, які пов'язані з перенесенням домішок щодо центра мас. Проте у розчинах можуть реалізуватися також інші фізичні механізми масоперенесення. Наприклад, якщо молекули твердого розчину характеризуються несиметричною структурою, то прискорений рух частинок тіла приведе одночасно до поворотів таких молекул, що відповідатиме деякому потоку маси $\vec{J}_*$ у них. Надалі при розгляді взаємозв'язаних механотермодифузійних процесів у тілі будемо враховувати потоки маси такої природи.

Об'єкт нашого дослідження — ізотропне тіло, яке є n-компонентним твердим розчином, що займає область (V) евклідового простору й обмежене гладкою поверхнею (Σ). Величини, що відповідають підсистемам домішок, позначатимемо індексами $k=\overline{1,n-1}$, а скелета (розчинника) — індексом n. Приймаємо, що компоненти тіла є хімічно-інертними. У тілі під впливом зовнішніх чинників (силових, теплових, масових) протікають взаємозв'язані процеси деформування, структурних змін, тепло- й масоперенесення. При цьому структурні зміни в скелеті будемо пов'язувати із введеним вище потоком маси $\vec{J}_*$.

1. Балансові рівняння. Рівняння балансу маси. Для домішкових компонент $k = \overline{1,n-1}$ рівняння балансу маси за підходом Ейлера в інтегральній формі має вигляд [1]

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)} \rho_k dV = -\int\limits_{(\Sigma)} \rho_k \vec{v}_k \cdot \vec{n}\, d\Sigma, \qquad (1)$$

де ρ_k, $\vec{v}_k$ — густина та вектор швидкості компоненти k; $\vec{n}$ — зовнішня нормаль до поверхні (Σ). Рівняння балансу маси скелета при врахуванні потоку $\vec{J}_*$ є таким:

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)} \rho_n dV = -\int\limits_{(\Sigma)} (\rho_n \vec{v}_n + \vec{J}_*)\cdot \vec{n}\, d\Sigma. \qquad (2)$$

Тут $\vec{v}_n$, ρ_n — вектор швидкості частинок скелета та його густина маси.

Введемо вектор зміщення маси скелета $\vec{\Pi}_m$ за формулою

$$\vec{\Pi}_m(\vec{r},t) = \int\limits_0^t \vec{J}_*(\vec{r},t')\,dt', \qquad (3)$$

де $\vec{r}$ — радіус-вектор. Тоді

$$\vec{J}_* = \frac{\partial \vec{\Pi}_m}{\partial t} \qquad (4)$$

і рівняння (2) набуде вигляду

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)} \rho_n dV = -\int\limits_{(\Sigma)} \left(\rho_n \vec{v}_n + \frac{\partial \vec{\Pi}_m}{\partial t}\right)\cdot \vec{n}\, d\Sigma. \qquad (5)$$

Відзначимо, що такий потік маси вперше введено в роботі [6], а в [7] використано для аналізу приповерхневих явищ.

Якщо додати рівняння (1) для $k = \overline{1, n-1}$ і (5) та врахувати при цьому, що густина маси ρ тіла

$$\rho = \sum_{k=1}^{n} \rho_k, \qquad (6)$$

то отримаємо

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)} \rho dV = -\int\limits_{(\Sigma)} \left(\sum_{k=1}^{n} \rho_k \vec{v}_k + \frac{\partial \vec{\Pi}_m}{\partial t}\right)\cdot \vec{n}\, d\Sigma. \qquad (7)$$

Швидкість точок континуума центрів мас тіла в рамках модельного опису природно означити як

$$\vec{v} = \frac{1}{\rho}\left(\sum_{k=1}^{n-1} \rho_k \vec{v}_k + \frac{\partial \vec{\Pi}_m}{\partial t}\right). \qquad (8)$$

Тоді рівняння (7) балансу маси твердого розчину набуде вигляду

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)} \rho dV = -\int\limits_{(\Sigma)} \rho \vec{v}\cdot \vec{n}\, d\Sigma. \qquad (9)$$

При використанні теореми Остроградського–Гаусса з рівнянь (1), (5) та (9) отримуємо такі балансові рівняння у локальній формі:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_k \vec{v}_k) \qquad (k = \overline{1, n-1}), \tag{10}$$

$$\frac{\partial \rho_n}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \left(\rho_n \vec{v}_n + \frac{\partial \vec{\Pi}_m}{\partial t}\right), \tag{11}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}). \tag{12}$$

Тут $\vec{\nabla}$ — оператор Гамільтона.

Якщо ввести вектор потоку маси $\vec{J}_k = \rho_k(\vec{v}_k - \vec{v})(k = \overline{1, n})$ та концентрації $C_k = \rho_k/\rho$, то балансові рівняння (10), (11) подамо так:

$$\begin{aligned} &\rho \frac{dC_k}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_k \qquad (k = \overline{1, n-1}), \\ &\rho \frac{dC_n}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{J}_n + \frac{\partial \vec{\Pi}_m}{\partial t}\right), \end{aligned} \tag{13}$$

де $d\ldots/dt = \partial\ldots/\partial t + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}\ldots$ — оператор субстанціональної похідної за часом. Відзначимо також, що

$$\sum_{k=1}^{n} \vec{J}_k = -\frac{\partial \vec{\Pi}_m}{\partial t}. \tag{14}$$

Рівняння балансу ентропії. В інтегральній формі рівняння балансу ентропії має вигляд [1]

$$\frac{d}{dt} \int\limits_{(V)} S dV = -\int\limits_{(\Sigma)} \vec{J}_s \cdot \vec{n}\, d\Sigma - \int\limits_{(\Sigma)} S\vec{v} \cdot \vec{n} d\Sigma + \int\limits_{(V)} \sigma_s dV + \int\limits_{(V)} \rho \frac{\Re}{T} dV, \tag{15}$$

де S, σ_s — густина ентропії та її виробництво; $\vec{J}_s$ — потік ентропії; T — абсолютна температура; $\Re$ — питома потужність теплових джерел.

Рівнянню (15) відповідає така локальна форма:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \sigma_s + \rho \frac{\Re}{T}. \tag{16}$$

Співвідношенням $\vec{J}_q = T\vec{J}_s$ введемо у розгляд потік тепла $\vec{J}_q$. Тоді рівняння (16) балансу ентропії можна записати так:

$$\rho T \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_q + \frac{1}{T} \vec{J}_q \cdot \vec{\nabla} T + T\sigma_s + \rho \Re, \tag{17}$$

($s = S/\rho$ — питома ентропія).

Рівняння балансу енергії. Рівняння балансу енергії в інтегральній формі має вигляд

$$\frac{d}{dt}\int\limits_{(V)}\rho\left(u+\frac{1}{2}\vec{v}^2\right)dV=-\int\limits_{(\Sigma)}\left[\rho\left(u+\frac{1}{2}\vec{v}^2\right)\vec{v}+\vec{J}_q+\sum_{k=1}^{n}\mu_k\vec{J}_k+\right.$$
$$\left.+\mu_\pi\frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t}-\widehat{\sigma}\cdot\vec{v}\right]\cdot\vec{n}d\Sigma+\int\limits_{(V)}(\rho\vec{F}\cdot\vec{v}+\rho\Re)\,dV. \tag{18}$$

Тут u — питома внутрішня енергія; μ_k $(k=\overline{1,n})$ — хімічний потенціал компоненти k; μ_π — ефективний хімічний потенціал скелета, пов'язаний з потоком $\partial\vec{\Pi}_m/\partial t$; $\widehat{\sigma}$ — тензор напружень Коші; $\vec{F}$ — вектор масових сил.

Локальна форма рівняння (18) при врахуванні співвідношення (14), рівнянь балансу маси (12), (13) та ентропії (17) є такою:

$$\rho\frac{du}{dt}=\rho T\frac{ds}{dt}+\widehat{\sigma}:\frac{d\widehat{e}}{dt}+\sum_{k=1}^{n-1}\rho\mu'_k\frac{dC_k}{dt}-\mu'_\pi\frac{\partial\vec{\nabla}\cdot\vec{\Pi}_m}{\partial t}-\vec{\nabla}\mu'_\pi\cdot\frac{\partial\vec{\Pi}_m}{\partial t}-$$
$$-\sum_{k=1}^{n-1}\vec{J}_k\cdot\vec{\nabla}\mu'_k-\frac{1}{T}\vec{J}_q\cdot\vec{\nabla}T-T\sigma_s-\vec{v}\cdot\left(\rho\frac{d\vec{v}}{dt}-\vec{\nabla}\cdot\widehat{\sigma}-\rho\vec{F}\right). \tag{19}$$

Тут $\mu'_k=\mu_k-\mu_n$, $\mu'_\pi=\mu_\pi-\mu_n$.

Введемо питомі величини $\vec{\pi}_m=\vec{\Pi}_m/\rho$, $\rho_m=P_\pi/\rho$, де $P_\pi=\vec{\nabla}\cdot\vec{\Pi}_m$. Тоді рівняння (19) при використанні рівняння балансу маси (12) набуде вигляду

$$\rho\frac{du}{dt}=\rho T\frac{ds}{dt}+\widehat{\sigma}_*:\frac{d\widehat{e}}{dt}+\sum_{k=1}^{n-1}\rho\mu'_k\frac{dC_k}{dt}-\rho\mu'_\pi\frac{d\rho_\pi}{dt}-\rho\vec{\nabla}\mu'_\pi\cdot\frac{d\vec{\pi}_m}{dt}-$$
$$-\left(T\sigma_s+\sum_{k=1}^{n-1}\vec{J}_k\cdot\vec{\nabla}\mu'_k+\frac{1}{T}\vec{J}_q\cdot\vec{\nabla}T\right)-\vec{v}\cdot\left(\rho\frac{d\vec{v}}{dt}-\vec{\nabla}\cdot\widehat{\sigma}_*-\rho\vec{F}_*\right), \tag{20}$$

де

$$\widehat{\sigma}_*=\widehat{\sigma}+\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{\pi}_m\mu'_\pi)\widehat{I},\qquad \rho\vec{F}_*=\rho\vec{F}-\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{\pi}_m\vec{\nabla}\mu'_\pi), \tag{21}$$

$\widehat{I}$ — одиничний тензор. При умові інваріантності рівняння балансу енергії щодо просторових трансляцій з рівняння (20) одержуємо рівняння руху

$$\rho\frac{d\vec{v}}{dt}=\vec{\nabla}\cdot\widehat{\sigma}_*+\rho\vec{F}_*, \tag{22}$$

вираз для виробництва ентропії

$$\sigma_s=-\frac{1}{T^2}\vec{J}_q\cdot\vec{\nabla}T-\frac{1}{T}\sum_{k=1}^{n-1}\vec{J}_k\cdot\vec{\nabla}\mu'_k\geqslant 0 \tag{23}$$

та рівняння

$$\rho\frac{du}{dt}=\rho T\frac{ds}{dt}+\widehat{\sigma}_*:\frac{d\widehat{e}}{dt}+\sum_{k=1}^{n-1}\rho\mu'_k\frac{dC_k}{dt}-\rho\mu'_\pi\frac{d\rho_\pi}{dt}-\rho\vec{\nabla}\mu'_\pi\cdot\frac{d\vec{\pi}_m}{dt}, \tag{24}$$

яке можна трактувати, як узагальнене рівняння Гіббса. З нього випливає, що для розглядуваної системи внутрішня енергія визначається параметрами s, $\widehat{e}$, $\{C_k\}$, ρ_π, $\vec{\pi}_m$, які приймаємо незалежними. З виразу (23) для виробництва ентропії та узагальненого рівняння Гіббса (24) бачимо, що врахований потік маси $\partial\vec{\Pi}_m/\partial t$ пов'язаний тут лише з оборотними змінами в системі. Відзначимо також, що врахування цього потоку маси приводить до розширення простору параметрів стану (виникають нові параметри стану ρ_π та $\vec{\pi}_m$) та до виникнення додаткового тиску $p = -\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{\pi}_m\mu'_\pi)$ і масової сили $\vec{F}_m = -\vec{\nabla}\cdot(\rho\vec{\pi}_m\vec{\nabla}\mu'_\pi)$.

2. Визначальні співвідношення. Перейдемо до узагальненої питомої вільної енергії Гельмгольца f

$$f = u - Ts + \vec{\pi}_m\cdot\vec{\nabla}\mu'_\pi. \tag{25}$$

Тоді з рівнянь (24), (25) одержуємо

$$\rho\frac{df}{dt} = -\rho s\frac{dT}{dt} + \widehat{\sigma}_* : \frac{d\widehat{e}}{dt} + \sum_{k=1}^{n-1}\rho\mu'_k\frac{dC_k}{dt} - \rho\mu'_\pi\frac{d\rho_\pi}{dt} + \rho\vec{\pi}_m\cdot\frac{d\vec{\nabla}\mu'_\pi}{dt}. \tag{26}$$

Обираючи вільну енергію f як функцію незалежних параметрів $\widehat{e}$, T, $\{C_k\}$, ρ_π, $\vec{\nabla}\mu'_\pi$, тобто $f = f(\widehat{e}, T, \{C_k\}, \rho_\pi, \vec{\nabla}\mu'_\pi)$, отримуємо такі рівняння стану:

$$\begin{aligned}
&s = -\frac{\partial f}{\partial T}\bigg|_{\widehat{e},\{C_k\},\rho_\pi,\vec{\nabla}\mu'_\pi}, \qquad \widehat{\sigma}_* = \rho\frac{\partial f}{\partial\widehat{e}}\bigg|_{T,\{C_k\},\rho_\pi,\vec{\nabla}\mu'_\pi},\\
&\mu'_k = \frac{\partial f}{\partial C_k}\bigg|_{\widehat{e},T,\rho_\pi,\vec{\nabla}\mu'_\pi} \qquad (k = \overline{1, n-1}), \qquad \mu'_\pi = -\frac{\partial f}{\partial\rho_\pi}\bigg|_{\widehat{e},T,\{C_k\},\vec{\nabla}\mu'_\pi},\\
&\vec{\pi}_m = \frac{\partial f}{\partial\vec{\nabla}\mu'_\pi}\bigg|_{\widehat{e},T,\{C_k\},\rho_\pi}.
\end{aligned} \tag{27}$$

Кінетичні рівняння випливають із виразу для виробництва ентропії (23) і у лінійному наближенні запишемо [1]

$$\vec{J}_q = L_{qq}\frac{1}{T^2}\vec{\nabla}T + \sum_{k=1}^{n-1}L_{qk}\frac{1}{T}\vec{\nabla}\mu'_k, \qquad \vec{J}_k = \sum_{l=1}^{n-1}L_{kl}\frac{1}{T}\vec{\nabla}\mu'_l + L_{kq}\frac{1}{T^2}\vec{\nabla}T \tag{28}$$

$$(k = \overline{1, n-1}).$$

Тут L_{qq}, L_{qk}, L_{kq}, L_{kl} — кінетичні коефіцієнти і для ізотропного середовища, яке розглядаємо, $L_{qk} = L_{kq}$.

Таким чином, рівняння балансу маси (12), (13) та ентропії (17), рівняння руху (22), визначальні співвідношення (27) і (28) за означеності вільної енергії як функції параметрів $\widehat{e}$, T, $\{C_k\}$, ρ_π, $\vec{\pi}_m$ та кінетичних коефіцієнтів у формулах (28) разом із співвідношенням Коші $\widehat{e} = (\vec{\nabla}\vec{u} + \vec{u}\vec{\nabla})/2$ складають повну систему рівнянь для визначення взаємозв'язаних механічних, теплових та концентраційних полів у твердих розчинах при урахуванні потоку маси $\partial\vec{\Pi}_m/\partial t$.

1. *Де Грот С., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. – Москва: Мир, 1964. – 456 с.
2. *Підстригач Я. С.* Диференціальні рівняння задачі термодифузії в твердому деформівному ізотропному тілі // Доп. АН УРСР. Сер. А. – 1961. – № 2. – С. 169–172.

3. *Подстригач Я. С., Павлина В. С.* Дифференциальные уравнения термодинамических процессов в n-компонентном растворе // Физ.-хим. механика материалов. – 1965. – № 4. – С. 383–389.
4. *Бурак Я. Й., Чапля Є. Я.* Континуальні моделі термомеханіки бінарних систем // Там же. – 1995. – № 4. – С. 7–15.
5. *Бурак Я., Чапля Є.* Термодинамічні моделі механіки бінарних систем // Мат. пробл. механіки неоднорідних структур. – Львів: Вид. Ін-ту прикл. пробл. мех. і математики, 2000. – Т. 1. – С. 11–15.
6. *Бурак Я. Й.* Визначальні співвідношення локально-градієнтної термомеханіки // Доп. НАН України. Сер. А. – 1987. – № 12. – С. 19–23.
7. *Бурак Я. Й., Нагірний Т. С., Грицина О. Р.* Про один підхід до врахування приповерхневої неоднорідності в термомеханіці твердих розчинів // Там же. – 1991. – № 11. – С. 47–51.

Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки
і математики ім. Я. С. Підстригача
НАН України, Львів

Надійшло до редакції 17.07.2006

УДК 539.3

В. І. Гуляєв, П. З. Луговий, І. В. Горбунович

Вільні коливання бурильних колон, що обертаються

(Представлено академіком НАН України В. Д. Кубенком)

The mathematical models are proposed for the simulation of vibrations of rotating deep drill columns. The factors of their prestressing by gravity forces and torques, the gyroscopic interaction of rotary and linear motions, and a destabilizing effect of the internal flow of a washing liquid are taken into consideration. The essential "numerical rigidity" of the constructed equations is found. A technique for their solution in large segments of the column length is elaborated, and a software is created. The phenomena and effects accompanying the processes of drilling in large depths are discussed.

1. Освоєння техніки та технології буріння глибоких нафтових і газових свердловин є однією з найбільш важливих задач сучасного гірського виробництва. Домінуюче положення в цій технології займає роторний спосіб. Підвищення ефективності буріння глибоких свердловин таким способом тісно пов'язано з проблемою виявлення критичних режимів функціонування бурильних колон (БК) і з розробкою заходів для зниження їх негативного впливу на технологічний процес. Такі режими можуть супроводжуватися ефектами біфуркаційного випинання колон і інтенсифікацією їх вібрацій у випадках рівності частот власних коливань колони та кутової швидкості її обертання. При цьому важливим виявляється не тільки встановлення критичних швидкостей обертання колони, але також і визначення форм її згинання, що дозволяє знаходити зони контактної взаємодії труби колони зі стінкою свердловини й обчислювати реакції цих взаємодій.

У той же час виявлення параметрів процесу буріння, при яких реалізуються критичні стани, може бути здійснено методами математичного моделювання, хоча спроби практичного проведення математичних експериментів з моделювання критичних станів БК пов'язані зі значними обчислювальними труднощами. Вони зумовлені особливостями співвідношень