Таким образом, исследование каталитических свойств катализаторов КТЖ-15 и КТЖ-17 показывает, что с ростом концентрации платины от 0,1 до 0,4% происходит существенное увеличение активности (рис. 3), выхода изо-алканов C_5–C_9 (рис. 4) и снижение процесса глубокого гидрокрекинга с образованием н-алканов C_1–C_4 во всем изученном интервале температур. Наблюдаемые изменения каталитических свойств с ростом содержания платины связаны с перестройкой структуры и химического состава катализатора. Увеличение концентрации платины приводит к его эффективному взаимодействию с железом и молибденом с образованием наноразмерных гетероядерных Pt–Fe и Pt–Mo-кластеров, обладающих высокой активностью и избирательностью.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Закумбаева Г.Д., ГазизоваА.Д., Жумабекова А.К., Бродский А.Р., Яскевич В.И.* // Материалы VII Российской конференции «Механизмы каталитических реакций». СПб., 2006. С. 200-203.

2. *Закумбаева Г.Д., ГазизоваА.Д., Жумабекова А.К., Бродский А.Р.* // Известия НАН РК. Сер. химическая. 2005. № 6. С. 35-40.

3. *Лапидус А.Л., Ментюков Д.А., Дергачев А.А., Мишин И.В., Силакова А.А.* // Нефтепереработка и нефтехимия. 2005. № 7. С. 9-12.

4. *Лапидус А.Л., Ментюков Д.А., Дергачев А.А., Мишин И.В., Силакова А.А.* // Нефтепереработка и нефтехимия. 2006. № 6. С. 42-47.

5. *Закарина Н.А., Акулов А.Г., Акулова Г.В., Григорьева В.П.* // Известия НАН РК. Сер. химическая. 2004. № 3. С. 23-28.

6. *Лопаткин С.В., Ионе К.Г.* // Нефтехимия. 2002. Т. 42, № 3. С. 214-221.

7. *Закумбаева Г.Д., Жумабекова А.К., ГазизоваА.Д., Бродский А.Р.* // Нефтепереработка и нефтехимия. 2006. № 10. С. 12-14.

Резюме

Платина мөлшерін (0,1–0,4%) түрлендіру кезінде әртүрлі қоспалармен модифицирленген цеолитқұрамды Pt–Fe/Al_2O_3 катализаторларының каталитикалық қасиеттері және құрылымы зерттелген. Синтезделген катализаторлардың каталитикалық қасиеттері тетрадеканды гидроайналдыру реакцияларында байқалды. Белсенділігі жоғары катализаторлардың наноөлшемді көпфункционалды жүйелер болып табылатындығы көрсетілді.

Summary

The structure and catalytic properties of zeolite-containing Pt–Fe/Al_2O_3 catalysts with content of Pt (0,1–0,4%) and modified by various additives have been studied. The catalytic properties of synthesized catalysts were tested in hydrotreating of tetradecane. It has been shown that the catalysts are polyfunctional systems having a high activity.

УДК 541.128.13

Институт органического катализа и электрохимии им. Д. В. Сокольского

Поступила 3.04.07г.

Б. Т. ЖУМАГУЛОВ, Ш. Н. КУТТЫКОЖАЕВА

ПРИБЛИЖЕННЫЙ МЕТОД ДЛЯ ОДНОЙ МОДЕЛИ ФИЛЬТРАЦИИ ЖИДКОСТИ С НЕЛОКАЛЬНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

1. Постановка задачи нестационарной фильтрации. При математическом моделировании процесса отбора жидкости через скважину с заданным расходом приходится решать задачу для параболического уравнения с нелокальным граничным условием [1].

Будем рассматривать процесс притока однородной жидкости к скважине Ω_0 в замкнутой системе. Пусть система вначале находится под давлением u_0, а с момента $t = 0$ начинается отбор жидкости через Ω_0. При этом задача сводится к решению параболического уравнения [1]:

$$\beta \frac{\partial u}{\partial t} = div(K(x)\nabla u), \quad x \in \Omega, \quad t \in [0,T], \qquad (1)$$

при условии

$$u\big|_{t=0} = u_0(x), \quad x \in \Omega, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\Gamma} = 0, \quad t \in [0,T], \qquad (3)$$

$$u\big|_{S} = P(t), \quad \int_S K(x)\frac{\partial u}{\partial n} dS = Q(t). \qquad (4)$$

Здесь S – граница области Ω_0, Ω_0 – скважина, Ω_0 – строго содержащаяся в Ω, $S \cap \Gamma = \varnothing$, β – коэффициент совместной упругоемкости фильтрующейся жидкости и пористой среды. $K = K_* / \mu$, K_* – проницаемость пласта, μ – коэффициенты динамической вязкости жидкости, $P(t)$ – неизвестная функция, зависимая только от времени. Условие (4) означает, что на S поддерживается давление, которое определяется по заданному дебиту Q. Задача (1)–(4) – нелокальная. Непосредственное применение классических приближенных методов затруднительно. Здесь область Ω имеет две границы – внешнюю границу Γ и внутреннюю границу S. В настоящей работе предлагается приближенный метод, который эффективно решает задачу (1)–(4) на компьютере. Дальнейшие обозначения взяты из работы [2].

2. Обобщенные решения задач (1)–(4). Некоторые априорные оценки. Умножим уравнение (1) на и проинтегрируем по области Ω. Используя формулу Грина, имеем

$$\frac{\beta}{2}\frac{d}{dt}\|u\|^2 + K_0\|\nabla u\|^2 = \int_S K\frac{\partial u}{\partial n}udS. \qquad (5)$$

Далее, преобразуем правую часть уравнения

$$\int_S K\frac{\partial u}{\partial n}udS = P(t)\int_S \frac{\partial u}{\partial n}KdS = P(t)Q = \frac{Q}{mesS}\int_S PdS\,.$$

Из последнего тождества, используя теорему вложения и ε-неравенство Коши [2], имеем

$$\frac{Q}{mess}\int_S pdS \le \frac{Q}{mesS}\|p\|_{L_{11(S)}} \le$$

$$\le \frac{Q}{mesS}\left(\|u\|^{1/2}_{L_2(\Omega)}\|\nabla u\|^{1/2}_{L_2(\Omega)} + \|u\|_{L_2(\Omega)}\right) \le$$

$$\le \varepsilon\|\nabla u\|^2 + \frac{Q}{mesS}C_\varepsilon\left(\|u\|^2_{L_2(\Omega)} + \|u\|_{L_2(\Omega)}\right). \qquad (6)$$

Из (5), используя (6) и подбирая ε малым, получим

$$\max_{0\le t\le T}\|u\|^2_{L_2(\Omega)} + \int_0^T \|\nabla u\|^2 dt \le C\|u_0\|^2. \qquad (7)$$

Умножим (1) на $di\upsilon(K(x)\nabla u)$ в $L_2(\Omega)$, в результате получим

$$\frac{1}{2}\beta\frac{d}{dt}\|\nabla u\|^2_{L_2(\Omega)} + \|di\upsilon K(x)\nabla u\|^2 = \int_S \frac{\partial u}{\partial n}\frac{\partial u}{\partial t}dS = 0. \quad (8)$$

Преобразуем интеграл правой части (8)

$$\int_S K(x)\frac{\partial u}{\partial n}\frac{\partial u}{\partial t} = \int_S K(x)\frac{\partial u}{\partial n}\frac{\partial P}{\partial t}dS = \frac{\partial P(t)}{\partial t}Q(t) =$$

$$= \frac{\partial}{\partial t}(u_* QH) - u_*(t)\frac{\partial Q}{\partial t}. \qquad (9)$$

Используя (9), проинтегрируем (8) по t, рассуждая также, как и при получении оценки (7), имеем

$$\|\nabla u\|_{L_\infty(0,T;L_2(\Omega))} + \|di\upsilon K(x)\nabla u\|_{L_2(0,T;L_2(\Omega))} \le C < \infty. \quad (10)$$

Обращаясь к уравнению (1), в силу (10), выводим

$$\left\|\frac{\partial u}{\partial t}\right\|_{L_2(0,T;L_2(\Omega))} \le C < \infty. \qquad (11)$$

Вводим пространство

$$m(\Omega) = \left\{\varphi \in C^2(\Omega),\quad \frac{\partial \varphi}{\partial n}\Big|_\Gamma = 0,\quad \varphi\big|_S = const\right\}.$$

Замыкание $m(\Omega)$ в норме $W_2^1(\Omega)$ обозначим через $\hat{W}_2^1(\Omega)$.

Определение. *Обобщенным решением задач (1)–(4) называется функция* $u \in L_2(0,T;\hat{W}_2^1(\Omega))$, *удовлетворяющая следующему интегральному тождеству*

$$\int_0^T\left[\beta(u,\varphi_t)_\Omega - (K\nabla u,\ \nabla\varphi)_\Omega + \frac{Q(t)}{mesS}\int_S \varphi dS\right]dt +$$

$$+(u_0,\varphi)_\Omega,$$

$$\forall\varphi \in C^2(0,T:\hat{W}_2^1(\Omega)),\ \varphi(T) = 0. \qquad (12)$$

Справедлива следующая

Теорема 1. Пусть $Q(t) \in L_2(0,T)$, $u_0 \in L_2(\Omega)$, $K(x) \in C^1(\overline{\Omega})$. **Тогда существует единственное обобщенное решение задач (1)–(4) и для решения имеет место оценка (7).**

Теорема доказывается методом Галеркина с использованием оценки (7).

3. Экономичный приближенный метод для задач (1)–(4). Рассмотрим вспомогательную задачу (метод фиктивных областей)

$$\beta\frac{\partial u^\varepsilon}{\partial t} = di\upsilon(K^\varepsilon\nabla u^\varepsilon) + \frac{Q(t)}{mesS}mes\Omega_0\xi(x),$$

$$x \in Đ \quad \overline{\Omega} \cup \Omega_0 \qquad (13)$$

с начально-краевым условием

$$u^{\varepsilon}\big|_{t=0} = u_0(x), \qquad (14)$$

$$\frac{\partial u^{\varepsilon}}{\partial n}\Big|_{\Gamma} = 0, \qquad (15)$$

где

$$\xi_1(x) = \begin{cases} 0, & x \in \Omega, \\ 1, & x \in \Omega_0, \end{cases} \quad K^{\varepsilon}(x) = \begin{cases} K(x), & x \in \Omega, \\ \dfrac{1}{\varepsilon}, & x \in \Omega_0, \end{cases} \qquad (16)$$

и с условиями согласования

$$\left[u^{\varepsilon}\right]_S = 0, \quad \left[K^{\varepsilon}\frac{\partial u^{\varepsilon}}{\partial n}\right]\Big|_S = 0, \qquad (17)$$

где [,] означает скачок значения функции через границу S; $u_0(x)$ – продолжим в Ω_0 с сохранением нормы.

Далее, определим обобщенное решение задач (13)–(17). Обозначим $W(D)$ – пространство, определяемое нормой

$$\|u\|_{W(D)} = \|u\|_{L_\infty(0,T;L_2(\Omega))} + \int_0^T\int_D K^{\varepsilon}(x)|\nabla u|^2 dxdt.^2$$

Определение. *Обобщенным решением задач (13)–(17) называется функция $u^{\varepsilon} \in L_2(0,T;W(D))$, удовлетворяющая следующему интегральному тождеству:*

$$\int_0^T\int_D (\beta u^{\varepsilon}, \varphi_t)dxdt - \int_0^T\int_D K^{\varepsilon}(x)(\nabla u^{\varepsilon}\nabla\varphi)dxdt + \qquad (18)$$

$$+\int_0^T\int_D \left(\frac{Q(t)mes\Omega_0}{mesS}\xi_1(x)\varphi\right)dxdt + \int_D u_0\varphi(x)dx = 0.$$

Для каждого $\varphi_t \in L_2(0,T;L_2(D))$, $\varphi \in L_2(0,T;W_2^1(D))$, $\varphi(T) = 0$.

Априорные оценки. Умножим (12) на u^{ε} и, интегрируя по частям, получаем

$$\frac{\beta}{2}\frac{d}{dt}\|u^{\varepsilon}\|^2_{L_2(D)} + \int_D K^{\varepsilon}|\nabla u^{\varepsilon}|^2 dx = \frac{Q(t)}{mesS}mes\Omega_0\int_{\Omega_0} udx. \qquad (19)$$

Отсюда следует оценка

$$\|u^{\varepsilon}\|_{L_\infty(0,T;L_2(\Omega))} + \int_0^T\int_D K^{\varepsilon}|\nabla u^{\varepsilon}|^2 dx \le$$

$$\le C\int_0^T\left(\frac{Q(t)mes\Omega_0}{mesS}\right)^2 dt + \|u_0\|^2 \le C < \infty. \qquad (20)$$

Теорема 2. Пусть $Q(t) \in L_2(0,T)$; $u_0 \in L_2(D)$, $K(x) \in C^1(\Omega)$. **Тогда существует единственное обобщенное решение задач (13)–(17) и для решения справедлива равномерная по ε оценка (20).**

Теорема 2 доказывается методом Галеркина с использованием (20).

В силу оценки (20) из последовательности можно выделить подпоследовательности, для которых справедливы соотношения:

$$\begin{aligned} &u^{\varepsilon}(t) \to u(t) \ \text{ слабо в } \ L_2(0,T;W_2^1(D)), \\ &u^{\varepsilon}(t) \to u(t) \ \text{ *слабо в } \ L_\infty(0,T;L_2(D)) \end{aligned} \qquad (21)$$

при $\varepsilon \to 0$. Соотношение (21) позволяет перейти к пределу $\varepsilon \to 0$ в интегральном тождестве (18). В пределе получим интегральное тождество для $u(t)$, которое является обобщенным решением задач (1)–(4).

Справедлива следующая

Теорема 3. Пусть выполнены все условия теоремы 2 и $u_0(x) \in W_2^1(D)$. Тогда обобщенное решение задач (13)–(17) сходится к обобщенному решению задач (1)-(4) при $\varepsilon \to 0$ со скоростью

$$\|u^{\varepsilon} - u\|_{L_\infty(0,T;L_2(\Omega))} \le C\varepsilon. \qquad \mathbf{(22)}$$

Оценка (22) неулучшаемая.

Аппроксимируем задачу (13)–(17)

$$\beta\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = div(K^{\varepsilon}\nabla u^{n+1}) +$$

$$+\frac{Q^{n+1}(t)mes\Omega_0}{mesS}\xi(x), \quad x \in D, \qquad (23)$$

$$u^0 = u_0(x), \qquad (24)$$

$$\frac{\partial u^{n+1}}{\partial n}\Big|_{\Gamma} = 0. \qquad (25)$$

Заметим: относительно получим эллиптическое уравнение с быстро меняющимися коэффициентами $K^{\varepsilon}(x)$. Для численного решения задач (23)–(25) можно использовать экономичный итерационный метод [3], скорость сходимости которого не зависит от ε, или модифицировать по переменно-треугольному методу [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Баренблатт Г.И., Ентов В.Н., Рыжик В.М.* Движения жидкости и газов в природных пластах. М.: Недра, 1984. 221 с.

2. *Ладыженская О.А.* Краевые задачи математической физики. М.: Наука, 1973. 407 с.

3. *Бугров А.Н.* Метод фиктивных областей для уравнений с частными производными эллиптического типа // Численные методы решения задач теории упругости и пластичности. Новосибирск, 1978. С. 24-35.

4. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1970.

Резюме

Локальді емес шектік шарты бар фильтрацияның бір моделінің жуықталған әдісі ұсынылады. Есептің жалпы шешімінің бар боллу теоремасы дәлелденді. Жалған облыстар әдісі негізделді.

Summary

In this article there are presented approximate method for one filtration model with non-local marginal conditions. The theorem of existence of the generalized solution of problems is being proved. It is given substantiations of a method of fictitious areas.

Поступила 4.03.07г.

Н. ДОЛЯ, Б. Х. МУСАБАЕВА, М. Г. ЯШКАРОВА, Л. А. БИМЕНДИНА, С. Е. КУДАЙБЕРГЕНОВ

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ПОЛУВЗАИМОПРОНИКАЮЩИХ СЕТОК НА ОСНОВЕ АКРИЛАМИДНЫХ ГЕЛЕЙ И ЛИНЕЙНЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ

Синтез и исследование полувзаимопроникающих сеток (ПВПС) – трехмерных структур, в матрицу которых иммобилизованы макромолекулы линейного строения, представляет большой интерес с точки зрения создания композиционных материалов, обладающих не только высокой чувствительностью к изменению температуры, pH среды, ионной силы раствора и термодинамического качества растворителя, но и достаточно высокой гибкостью и механической прочностью [1–6]. Структурную модель ПВПС можно представить в виде трехмерной сетки, объем которой заполнен линейными макромолекулами в развернутой или клубкообразной конформации. ПВПС могут быть получены либо путем иммобилизации в объем геля линейных макромолекул в процессе гомо- или сополимеризации мономеров в присутствии сшивающего агента, или интерполимерных реакций, протекающих на границе раздела фаз гель–раствор за счет медленной реакции комплексообразования по «эстафетному механизму» [7–9]. Авторы [10] сравнивали свойства амфотерной сетки на основе терполимера N-изопропилакриламида, акриловой кислоты и 1-винилимидазола, а также ПВПС на основе гидрогеля N-изопропилакриламида и 1-винилимидазола, в объем которого иммобилизована линейная полиакриловая кислота. Сшитый терполимер и ПВПС проявляют амфотерный характер и в окрестности изоэлектрической точки коллапсируют. Стимулчувствительные ПВПС на основе гидрогеля акриламид-акриловая кислота и линейного полиаллиламина в зависимости от pH среды также проявляют амфотерный характер [11]. Показана возможность использования ПВПС в качестве pH-контролируемой доставки лекарственного препарата – теофиллина. Ряд ПВПС получен путем иммобилизации в матрицу геля акриламид-акрилат натрия 5, 10 и 15%-го раствора натриевой соли поливинилсульфоновой кислоты [12]. Поведение ПВПС изучено в воде, физиологических и буферных растворах, а также в растворах солей. Степень набухания ПВПС значительно возрастает с увеличением содержания линейного полиэлектролита в сетке. Определены степень набухания и диффузионные характеристики ПВПС в дистиллированной воде и физиологических растворах. В литературе известен пример изучения механических свойств взаимопроникающих суперпористых гидрогелей, полученных на основе поли(акриламид-со-акриловая кислота)/полиэтиленимин [13]. Кинетика набухания суперпористых гелей уменьшается с увеличением содержания полиэтиленимина и полиакриловой