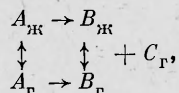


## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА ВНУТРИ ПОРИСТОГО ЗЕРНА ПРИ НАЛИЧИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

В. И. Дробышевич, В. А. Кириллов

(Новосибирск)

**1. Введение.** Рассмотрим общий случай протекания химической реакции, осложненной фазовым переходом, внутри пористого зерна катализатора, брутто-схему которой представим в виде



где  $A_{\text{ж}}$  — многокомпонентная жидкость, которая в результате химической реакции на поверхности катализатора превращается в другую многокомпонентную жидкость  $B_{\text{ж}}$  и многокомпонентный газ  $C_{\text{г}}$ . Кроме этого,  $A_{\text{ж}}$  и  $B_{\text{ж}}$  испаряются с образованием компонентов в паровой фазе  $A_{\text{г}}$  и  $B_{\text{г}}$ , где также происходит химическое превращение с образованием  $B_{\text{г}}$  и  $C_{\text{г}}$ .

При выводе математического описания будем считать жидкую фазу состоящей из  $m$  компонентов, парогазовую — из  $n$ , причем часть из них ( $k = n - m$ ), образовавшаяся в результате химической реакции, нерастворима в жидкой фазе. Также считаем, что температуры каркаса зерна и газожидкостного потока равны, жидкость несжимаема, а парогазовая среда подчиняется законам идеальных газов и смесей. Кроме этих допущений, будем использовать общепринятые предположения многофазной гидродинамики [1], а именно: гомогенность каждой из фаз, их непрерывность, а также возможность усреднения параметров по элементарным объемам.

**2. Математическая модель.** В общем случае перенос вещества (тепла) внутри пористого зерна осуществляется посредством эффективной диффузии (теплопроводности) по каждой из фаз, а также конвективного течения, вызванного градиентом давления по радиусу зерна.

Фазовый переход осуществляется вследствие выделения плохо растворимого газа, образующегося при химической реакции, а также испарения (конденсации) жидкостных компонентов. Расчет последних фазовых переходов представляет довольно трудную задачу. И здесь в принципе возможны следующие подходы.

Один из них основан на представлении молекулярно-кинетической теории [2]. Однако при этом необходимо вводить эмпирические коэффициенты, численные значения которых для такого сложного процесса неизвестны.

Если предположить наличие концентрационного равновесия, что справедливо при малых скоростях химической реакции, то скорости фазовых переходов компонентов могут быть рассчитаны путем численного дифференцирования уравнений материального баланса для парогазовой фазы [3].

Подход, используемый в работе, базируется на представлении, что основной вклад при образовании парогазовой смеси происходит за счет химической реакции, при протекании которой из-за большой интенсивности катализатора равновесной насыщенности пористой структуры не происходит. В такой постановке задача значительно отличается от известных в литературе моделей [4, 5] для описания процессов переноса в пористых средах.

Здесь приведем математическую модель и некоторые результаты численного анализа. Материальный баланс по парогазовой фазе запишем в виде

$$(2.4) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1 y_{1i}) = \frac{\partial}{\partial t} \left( D_{1i} \alpha_1 \frac{\partial}{\partial l} (\rho_1 y_{1i}) \right) - \frac{\partial}{\partial t} (u_1 \alpha_1 \rho_1 y_{1i}) + \\ + v_i W_1 + u_i W_2 + \Phi y_{1i}^*$$

причем при  $i = \overline{1, m}$  отсутствует слагаемое  $\mu_i W_2$ , а при  $i = m + \overline{1, n}$   $\Phi y_{1i}^*$ . Соответственно по жидкой фазе баланс запишется как

$$(2.2) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2 c_{2i}) = \frac{\partial}{\partial l} \left( D_{2i} \alpha_2 \frac{\partial}{\partial l} (\rho_2 c_{2i}) \right) - \frac{\partial}{\partial l} (u_2 \alpha_2 \rho_2 c_{2i}) - \Phi y_{1i}^* + \mu_i W_2, \quad i = \overline{1, m},$$

где  $\alpha$  — доля фазы;  $\rho$  — плотность;  $D$  — коэффициент эффективной диффузии;  $y$  — относительная весовая концентрация компонента в парогазовой фазе, а  $c$  — жидкой;  $u$  — скорость конвективного течения внутри пористого зерна;  $W$  — скорость химической реакции;  $\nu$ ,  $\mu$  — стехиометрические коэффициенты реакций;  $\Phi$  — полная скорость фазового перехода жидкость — парогаз;  $t$  — время;  $l$  — координата. Индекс 1 соответствует парогазу, 2 — жидкости;  $i$  — компонент в фазе, \* — равновесное значение параметра на границе раздела фаз.

Проведем суммирование (2.1) по всем парогазовым компонентам и (2.2) по компонентам жидкостной фазы. С учетом того, что

$$\sum_{i=1}^n y_{1i} = 1, \quad \sum_{i=1}^m c_{2i} = 1, \quad \sum_{i=1}^n \nu_i = 0, \quad \sum_{i=1}^n \mu_i = 0, \\ \sum_{i=1}^m \frac{\partial}{\partial l} \left( D_{2i} \alpha_2 \frac{\partial \rho_2 c_{2i}}{\partial l} \right) = 0, \quad \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial l} \left( D_{1i} \alpha_1 \frac{\partial \rho_1 y_{1i}}{\partial l} \right) = 0,$$

получим

$$(2.3) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_1 \rho_1) = - \frac{\partial}{\partial l} (u_1 \alpha_1 \rho_1) + \Phi;$$

$$(2.4) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2) = - \frac{\partial}{\partial l} (u_2 \alpha_2 \rho_2) - \Phi \sum_{i=1}^m y_{1i}^* + W_2 \sum_{i=1}^m \mu_i.$$

Естественно, что должно выполняться соотношение

$$\Phi = \Phi \sum_{i=1}^m y_{1i}^* - W_2 \sum_{i=1}^m \mu_i,$$

откуда находим, что полная скорость фазового перехода равна

$$(2.5) \quad \Phi = - W_2 \sum_{i=1}^m \mu_i / \left( 1 - \sum_{i=1}^m y_{1i}^* \right).$$

Уравнение теплового баланса, записанное через энтальпии компонентов, после соответствующих преобразований переходит в уравнение для температуры

$$(2.6) \quad \left( c_K \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} + \alpha_2 \rho_2 \sum_{i=1}^m c_{2i} c_{p2i} + \alpha_1 \rho_1 \sum_{i=1}^n y_{1i} c_{p1i} \right) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial l} \left( \lambda_{эф} \frac{\partial T}{\partial l} \right) - \\ - \left( u_1 \alpha_1 \rho_1 \sum_{i=1}^n y_{1i} c_{p1i} + u_2 \alpha_2 \rho_2 \sum_{i=1}^m c_{2i} c_{p2i} \right) \frac{\partial T}{\partial l} + \sum_{j=1}^2 W_j Q_j - \Phi \sum_{i=1}^m y_{1i}^* h_i,$$

где  $T$  — температура;  $\lambda_{эф}$  — эффективная теплопроводность пористого зерна;  $c_K$  — теплоемкость катализатора;  $\varepsilon$  — доля пор внутри зерна;  $c_p$  — теплоемкость фазы;  $h$  — теплота фазового перехода;  $Q$  — тепловой эффект химической реакции. Остальные обозначения аналогичны описанным для уравнения материального баланса.

Систему уравнений (2.1)–(2.6) необходимо дополнить уравнением состояния парогазовой фазы

$$p = \rho_1 RT \sum_{i=1}^n \frac{y_{1i}}{M_i},$$

где  $p$  — давление;  $R$  — газовая постоянная;  $M$  — молекулярный вес компонента.

Для замыкания системы необходимо определить значения равновесных концентраций на границе фаз  $y_{1i}^*$  и величины скоростей  $u_1, u_2$ .

Значение  $y_{1i}^*$  зависит от концентрации компонента в жидкой фазе и температуры среды. Для его определения следует воспользоваться законами Рауля — Дальтона, а также уравнением Клаузиуса — Клапейрона:

$$y_{1i}^M = \frac{p_{1i}}{p} c_{2i}^M,$$

где  $y_{1i}^M, c_{2i}^M$  — мольные концентрации соответствующих компонентов;  $p_{1i}$  — давление насыщенного пара компонента. Переход от мольных концентраций к весовым может быть осуществлен на основании общепринятых соотношений.

При расчете скоростей движения фаз  $u_1$  и  $u_2$  будем предполагать, что внутри пористой структуры выполняется закон Дарси:

$$u_j = -\gamma_j \partial p_j / \partial l, \quad j = 1, 2,$$

где  $\gamma$  — коэффициент проницаемости зерна по  $j$ -й фазе. Учитывая, что между давлением в жидкой и парогазовой фазах существует связь через капиллярное давление, можно получить выражения

$$u_2 = -\gamma_2 \partial p / \partial l - B \partial \alpha_2 / \partial l, \quad u_1 = -\gamma_1 \partial p / \partial l,$$

где  $p$  — давление в системе газонаполненных пор внутри зерна;  $B$  — коэффициент, характеризующий скорость капиллярного переноса жидкости. В зависимости от вида капиллярно-пористой структуры среды в [6] приведены расчетные формулы для оценки этого параметра.

3. Граничные условия и разностная схема. В качестве граничных условий на боковой поверхности зерна принимались естественные условия равенства потоков тепла и вещества

$$(3.1) \quad D_{1i} \alpha_1 \frac{\partial}{\partial l} (\rho_1 y_{1i}) = D_{1i}^* \alpha_1^* \frac{\partial}{\partial l} (\rho_1^* y_{1i}^*) = \beta_1 \alpha_1^* (y_{1i}^* - y_{1i}),$$

$$D_{2i} \alpha_2 \frac{\partial}{\partial l} (\rho_2 c_{2i}) = D_{2i}^* \alpha_2^* \frac{\partial}{\partial l} (\rho_2^* c_{2i}^*) = \beta_2 \alpha_2^* (c_{2i}^* - c_{2i}),$$

$$\lambda_{эф} \frac{\partial T}{\partial l} = \lambda_{эф}^* \frac{\partial T^*}{\partial l} = \alpha (T^* - T),$$

где  $\beta_j$  — коэффициент массообмена  $j$ -й фазы с поверхностью зерна ( $j = 1$  — парогаз,  $j = 2$  — жидкость);  $\alpha$  — коэффициент теплообмена между зерном и газожидкостной средой. Индекс \* относится к величинам вне пористого зерна. Однако естественная трудность в использовании соотношений (3.1) заключается в определении потоков тепла и массы к наружной поверхности зерна.

Рассмотрим два случая.

1. Температура поверхности зерна ниже температуры кипения любого из компонентов жидкой фазы при давлении окружающей среды.

Предполагаем, что вокруг зерна существует двухфазная зона, толщина которой  $\delta$  численно равна капиллярной константе, рассчитываемой из неустойчивости Тейлора [7]:

$$\delta = \sqrt{\sigma / g(\rho_2 - \rho_1)},$$

где  $\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения жидкости;  $g$  — ускорение свободного падения.

С другой стороны, размер двухфазной зоны можно определить из баланса количеств вещества, образовавшегося вследствие реакции и фазового перехода и унесенного непрерывно всплывающими пузырями:

$$-\frac{4}{3} \pi \frac{d}{dt} (R_3 + R^*)^3 = -u_1^{(*)} \alpha_1^{(*)} \varepsilon 4\pi (R_3 + R^*)^2 - u^* \pi (R_3 + R^*)^2,$$

где  $u_1^{(*)}$ ,  $\alpha_1^{(*)}$  — скорость парогазовой фазы и ее доля при  $l = L$ ;  $R_3$  — радиус зерна;  $R^*$  — толщина газовой полости вокруг зерна;  $u^*$  — скорость всплывания пузырей.

Теперь, если толщина газовой полости меньше размера отрывного пузыря  $R^* < \delta$ , то

$$(3.2) \quad \delta_0 = \delta, \quad \alpha_1^* = \frac{R^*}{\delta}, \quad T^* = T_3 - \frac{T_3 - T_\infty}{L_\infty} \delta,$$

при  $R^* > \delta$

$$\delta_0 = R^*, \quad \alpha_1^* = 1, \quad T^* = T_3 - \frac{T_3 - T_\infty}{L_\infty} R^*,$$

где  $T_3$  — температура поверхности зерна;  $T_\infty$  — температура объема на удалении  $L_\infty$  от поверхности зерна;  $\delta_0$  — толщина двухфазной зоны;  $T^*$  — температура парожидкостной среды в зоне  $\delta_0$  вокруг зерна. При этом коэффициенты тепло- и массообмена рассчитываются по формулам, приведенным в [8].

2. Температура поверхности зерна выше температуры окружающей жидкости ( $T_{\text{кип}}$ ). Тогда рассчитывается толщина парового пузыря

$$R^* = \frac{T_3 - T_{\text{кип}}}{T_3 - T_\infty} L_\infty.$$

И снова если толщина парового пузыря меньше отрывного размера пузыря ( $R^* < \delta$ ), то

$$(3.3) \quad \delta_0 = \delta, \quad \alpha_1^* = \frac{R^*}{\delta}, \quad T^* = T_3 - \frac{T_3 - T_\infty}{L_\infty} \delta,$$

при  $R^* > \delta$

$$\delta_0 = R^*, \quad \alpha_1^* = 1, \quad T^* = T_{\text{кип}},$$

при этом коэффициенты тепло- и массообмена рассчитываются по формулам пленочного кипения [8].

В центре зерна заданы естественные условия симметрии

$$(3.4) \quad \frac{\partial \alpha_1}{\partial l} = \frac{\partial y_{1i}}{\partial l} = \frac{\partial c_{2i}}{\partial l} = \frac{\partial p}{\partial l} = 0.$$

Зафиксируем следующую последовательность решения системы уравнений (2.1)—(2.6) с граничными условиями (3.2)—(3.4). Подставив в (2.4) выражение для  $u_2$  (2.7), определим  $\alpha_2$  из уравнения

$$(3.5) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_2 \rho_2) = \frac{\partial}{\partial l} (B \alpha_2 \rho_2 \frac{\partial \alpha_2}{\partial l}) + \frac{\partial}{\partial l} (\alpha_2 \rho_2 \gamma_2 \frac{\partial p}{\partial l}) - \Phi \sum_{i=1}^m y_{1i}^* + W_2 \sum_{i=1}^m \mu_i.$$

Затем из уравнений (2.1), (2.2) определим  $n$  концентраций  $y_{1i}$  и  $m - 1$   $c_{2i}$ , а из уравнения (2.6) —  $T$ . Теперь можем вычислить  $\rho_1$ ,  $p$ ,  $u_1$ ,  $u_2$ .

При построении разностных схем для уравнений (3.5), (2.1), (2.2) воспользуемся так называемой схемой с донорскими ячейками [9], которая обладает свойством консервативности, т. е. любое возмущение она переносит за счет конвекции только в направлении скорости. Для уравнения вида

$$\frac{\partial}{\partial t} (\dot{\alpha} u) = \frac{\partial}{\partial l} \left( D \frac{\partial u}{\partial l} \right) - \frac{\partial}{\partial l} (vu) + f$$

эта схема запишется как

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_i^{n+1} - \alpha_i^n}{\tau} &= \frac{1}{h} \left( D_{i+1/2} \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}}{h} - D_{i-1/2} \frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{h} \right) + \\ &+ f - \frac{1}{h} \left( \frac{v_{i+1/2} + |v_{i+1/2}|}{2} u_i^{n+1} + \frac{v_{i+1/2} - |v_{i+1/2}|}{2} u_{i+1}^{n+1} - \right. \\ &\left. - \frac{v_{i-1/2} + |v_{i-1/2}|}{2} u_{i-1}^{n+1} - \frac{v_{i-1/2} - |v_{i-1/2}|}{2} u_i^{n+1} \right). \end{aligned}$$

Для уравнения (2.6) воспользуемся обычной разностной схемой с разностями против потока [9].

Полученная система разностных уравнений из-за нелинейности интегрируется на каждом временном шаге. При этом можно показать, что при достаточно малых шагах по времени  $\tau$  итерации сходятся и решение разностной задачи приближает решение дифференциальной с порядком  $O(\tau, h)$ .

Поэтому вычислительный процесс построен следующим образом. Если число итераций на временном шаге превышает  $k_{\max} = 6$ , то временной шаг уменьшается в 4 раза, а при числе итераций меньше  $k_{\min} = 2$  временной шаг увеличивается вдвое.

**4. Численный анализ и его результаты.** Численный анализ уравнений модели удобно проводить после приведения (2.1)–(2.6) к безразмерному виду. Выберем в качестве безразмерных переменных

$$\xi = l/L, \quad \tau = at/L^2, \quad \tilde{p} = p/p_0, \quad \tilde{\rho} = \rho_1/\rho_2, \quad \theta = \frac{T - T_0}{RT_0^2} E,$$

где  $T_0$  — опорная температура;  $E$  — энергия активации химической реакции;  $a$  — коэффициент температуропроводности зерна. Исследуем процесс в зависимости от безразмерных параметров

$$\tilde{\gamma}_1 = \frac{\gamma_1 p_0}{D_1}, \quad \tilde{\gamma}_2 = \frac{\gamma_2 p_0}{D_2}, \quad \tilde{B} = \frac{B}{D_2}, \quad \psi_i^2 = \frac{k_i L^2}{D_i},$$

где  $k_i$  — константа скорости реакции ( $i = 1, 2$ );  $p_0$  — давление вне зерна. Смысл этих параметров ясен из анализа входящих в них размерных величин.

В настоящее время авторам неизвестны экспериментальные данные по исследованию полей температур, давлений и концентраций внутри пористого зерна. Поэтому представляется затруднительным оценить достоверность математической модели.

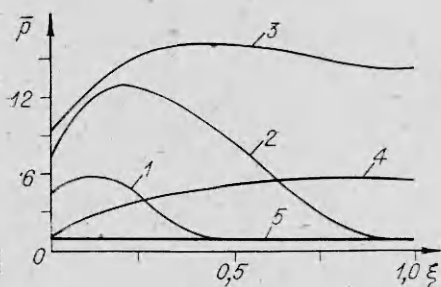
В связи с этим приведем здесь результаты численного анализа, которые качественно правильно описывают протекание процесса и дают количественные совпадения с экспериментальными характеристиками, наблюдаемыми в экспериментах, например период пульсаций средних температур.

В результате проведенных расчетов было выявлено несколько наиболее типичных режимов протекания процесса.

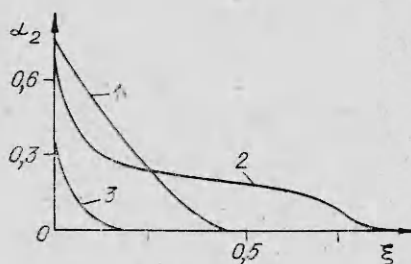
Один из них соответствует режиму заполнения пористой структуры реагирующей жидкости. Под ним будем понимать интервал времени от начала заполнения зерна жидкостью до установления внутри него монотонно возрастающего к центру профиля давления. Для этого режима характерны последовательное увеличение доли жидкой фазы внутри пористого зерна, значительный рост давления и температуры. Типичные примеры таких решений приведены на фиг. 1–3.

Как следует из фиг. 1, где кривые 1–4 соответствуют  $\tau = 0,632 \cdot 10^{-3}$ ;  $1,27 \cdot 10^{-3}$ ;  $2 \cdot 10^{-3}$ ;  $8,5 \cdot 10^{-3}$ , 5 — стационарный режим, при малых  $\tau$  у боковой поверхности наблюдается локальное повышение давления, связанное с химическим превращением поступающей в зерно жидкости. Величина этого максимума и скорость повышения давления лежат в широких пределах и зависят от  $\gamma_1$  и скорости фазового перехода.

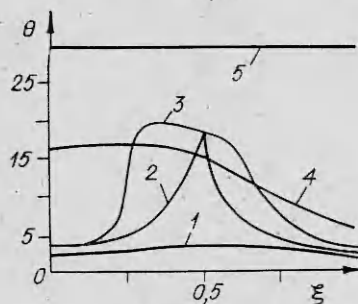
По мере развития процесса координата расположения максимума давления смещается в центр зерна, доля жидкой фазы при этом уменьшается (фиг. 2, кривые 1–3 соответствуют  $\tau = 0,632 \cdot 10^{-3}$ ;  $1,27 \cdot 10^{-3}$ ;  $2 \cdot 10^{-3}$ ). После достижения центра начинается интенсивное удаление жидкости, приводящее или к полному осушению зерна, если силы капиллярного впитывания недостаточно велики, или к его частичному заполнению. Величина давления в центре зерна кратковременно может значительно превышать его значение с наружной поверхности и служит, оче-



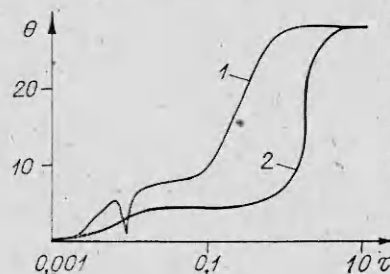
Ф и г. 1



Ф и г. 2



Ф и г. 3



Ф и г. 4

видно, одной из причин разрушения гранул катализатора при их пропитке.

Температура фаз при заполнении изменяется в широких пределах и может иметь немонотонный характер, особенно при больших  $\bar{B}$  и  $\psi_2$  (фиг. 3, кривые 1—4 соответствуют  $\tau = 0,61 \cdot 10^{-3}$ ;  $0,611 \cdot 10^{-3}$ ;  $0,612 \cdot 10^{-3}$ ;  $11,6 \cdot 10^{-3}$ , 5 — стационарный режим).

Наряду с нестационарными процессами было проведено численное исследование стационарного протекания химической реакции внутри зерна. При этом в зависимости от соотношения безразмерных параметров получилось три различных стационарных состояния.

Первое из них соответствует низкотемпературному зерну, заполненному жидкостью, второе — высокотемпературной области процесса. В этом случае пористое зерно окружено паровой оболочкой и химическая реакция протекает только в паровой фазе. Динамика выхода на этот режим приведена на фиг. 4, где кривые 1, 2 соответствуют  $\gamma_1 = 2 \cdot 10^2$  и  $2 \cdot 10^5$ .

Численно был получен также установившийся третий пульсационный режим, который характеризуется периодическими пульсациями температуры зерна, давления и доли жидкой фазы в нем. Такой режим устанавливается в случае, если тепла химической реакции недостаточно для испарения жидкости и создания устойчивой паровой пленки. При этом период пульсации зависит не только от соотношения безразмерных параметров, но и от температуры окружающей зерно жидкости. Следует отметить, что все эти стационарные режимы наблюдаются в экспериментах.

Таким образом, численные расчеты показывают, что предложенная нами модель качественно правильно описывает поведение многофазного процесса на пористом зерне катализатора и может быть использована для расчета ряда промышленно важных процессов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
2. Павлокевич Н. В., Горелик Г. Е., Левданский В. В. и др. Физическая кинетика и процессы переноса при фазовых превращениях. Минск: Наука и техника, 1980.
3. Пацков В. П., Черкашин В. В., Кириллов В. А. Математическая модель тепло-

- массообмена с химической реакцией в пористом зерне катализатора.— В кн.: Материалы конф. «Тепломассообмен-VI». Минск: ИТМО, 1980, т. 3.
4. Лыков А. В., Михайлов Ю. А. Теория тепло- и массопереноса. М.: Госэнергоиздат, 1963.
  5. Обливин А. Н., Купцова В. С. Численное решение задачи тепломассообмена во влажном пористом теле.— ИФЖ, 1976, т. 30, № 3.
  6. Лыков А. В. Тепломассообмен (справочник). М.: Энергия, 1971.
  7. Уоллис Г. Одномерные двухфазные течения. М.: Мир, 1972.
  8. Кутателадзе С. С. Основные формулы термодинамики пузырькового кипения.— В кн.: Теплопередача при кипении и конденсации. Новосибирск: Наука, 1978.
  9. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980.

Поступила 27/XII 1983 г.

УДК 532.517.4 : 541.12 : 536.24

## НЕСТАЦИОНАРНОЕ ТЕЧЕНИЕ И ТЕПЛОБМЕН ПОЛИМЕРИЗУЮЩИХСЯ ЖИДКОСТЕЙ В ДЛИННОМ ТРУБЧАТОМ РЕАКТОРЕ

А. М. Гришин, В. Б. Немировский

(Томск)

Низкотемпературные режимы полимеризации при ламинарном течении реагентов в трубе численно исследовались в двумерной постановке в [1].

Требования высокой производительности и малая вязкость исходного вещества (мономера) приводят к реализации в ряде реакторов турбулентного режима течения. Интенсивное перемешивание при турбулентном течении реагентов дает основание вводить допущение о полном выравнивании параметров реагирующей среды по сечению реактора и использовать для анализа работы реактора одномерную модель «идеального вытеснения», как это сделано в [2] при моделировании полимеризации этилена в трубчатом реакторе высокого давления. Однако в условиях, приводящих к образованию достаточно большого количества полимера, сильное возрастание вязкости реагирующей среды может привести к изменению характера течения и теплообмена. При этом допущения, лежащие в основе модели «идеального вытеснения», могут не выполняться, а анализ работы реактора необходимо проводить в рамках двумерной постановки.

В [3] в двумерной постановке численно исследовалось стационарное турбулентное течение полимеризующейся жидкости. Установлено, что при достаточном содержании полимера в смеси может происходить переход турбулентного течения в ламинарное.

В данной работе, являющейся развитием работы [3], численно исследовано нестационарное высокотемпературное течение полимеризующихся жидкостей при высокой степени превращения мономера в полимер. Показано, что при образовании большой концентрации полимера в реагирующей среде влияние сильного изменения вязкости на гидродинамику и теплообмен приводит к образованию нескольких областей течения по длине реактора, а также к немонотонному изменению скорости течения и температуры в ходе реакции в удаленных от входа сечениях реактора. Установлено, что при небольшой глубине превращения мономера в полимер через определенный промежуток времени формируется стационарное течение, причем время установления убывает с ростом расхода реагирующей жидкости.

**1. Постановка задачи.** Рассматривается турбулентное течение несжимаемой маловязкой вначале жидкости, в которой проходит термическая или инициированная полимеризация, в длинном трубчатом реакторе с некаталитическими стенками при постоянном расходе жидкости. Жидкость (мономер) с температурой  $T_n$  движется под действием перепада давления со скоростью, соответствующей заданному расходу. В начальный момент времени в рубашку реактора мгновенно подается теплоноситель с температурой  $T_0 > T_n$ , что вызывает прогрев реагирующей жидкости и начало реакции полимеризации (в случае инициированной полимеризации в начальный момент времени подается, кроме того, смесь мономера и инициатора реакции). Термическая полимеризация моделируется итоговой реакцией нулевого или первого порядка, а при инициированной полимеризации рассматривается кинетическая модель полимеризации этилена при высоком давлении, предложенная в [2]. Температура поступающей в трубу жидкости равна  $T_n$ , на входе в трубу профиль скорости