

Э. Н. Мифтахов, С. А. Мустафина

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ЭМУЛЬСИОННОЙ СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ НЕПРЕРЫВНЫМ СПОСОБОМ

В работе построена математическая модель процесса сополимеризации бутадиена со стиролом в эмульсии. Решена прямая задача и проведен анализ молекулярно-массового распределения полимера. Разработан алгоритм решения обратной задачи для поиска кинетических параметров путем аппроксимации конверсионной зависимости. Математическая модель позволяет предсказывать размер-состав распределение продуктов сополимеризации в зависимости от конверсии. *Сополимеризация; конверсия; молекулярно-массовое распределение*

Производство полимерных материалов занимает одно из ведущих мест в современной химической промышленности. В основе получения полимерных продуктов лежит процесс многократного присоединения молекул мономера к активным центрам растущей цепи. Когда исходными соединениями являются несколько (2 и более) мономеров, то такой процесс носит название сополимеризации. В частности, по такому механизму производится синтетический каучук. В связи со стремительным развитием ЭВМ, а также широким использованием в промышленности процессов полимеризации вопросы их математического моделирования весьма актуальны. Построение математической модели позволяет не только предсказывать свойства получаемого продукта, но и оптимизировать процесс производства.

ТЕХНОЛОГИЯ ПРОИЗВОДСТВЕННОГО ПРОЦЕССА

Процесс сополимеризации в производстве синтетического каучука производится непрерывным способом в батарее последовательно соединенных между собой полимеризаторов при температуре 5 °С [1]. Схема процесса производства изображена на рис. 1.

Концентрированная водная фаза, включающая раствор основного эмульгатора, электролита, диспергатора, активатора, готовится в аппарате смешением указанных компонентов, дозируемых в соответствии с заданной рецептурой, затем разбавляется водой в потоке. Готовая разбавленная водная фаза через холодильник, охлаждаемый рассолом, подается на смешение с мономерами – углеводородной фазой в диафрагмовый смеситель. Углеводородная фаза

(шихта) готовится непрерывным смешением бутадиена и стирола в диафрагменном смесителе, подаваемых в заданном соотношении, проходит водно-щелочную отмывку, смешивается с водной фазой сначала в диафрагменном смесителе, затем в объемном смесителе, после чего насосом подается в первый по ходу аппарат батареи полимеризаторов, состоящей, как правило, из 12 стандартных полимеризаторов объемом 12 или 20 кубических метров. Регулятор вводится в две точки: в начало процесса в виде 5%-го раствора в количестве 90% от общей дозировки и во вторую точку оставшиеся 10% дозировки в виде 1%-й эмульсии в воде в один из полимеризаторов, расположенных по ходу 5-м, 6-м, 7-м или 8-м.

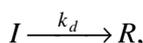
В качестве инициатора процесса сополимеризации используется гидроперекись пинана. Для регулирования молекулярной массы применяется трет-додецилмеркаптан. Процесс сополимеризации прерывают при конверсии мономеров 70% путем ввода специального реагента – стоппера, в качестве которого используется диэтилгидроксилламин.

КИНЕТИЧЕСКАЯ СХЕМА ПРОЦЕССА СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Кинетический метод моделирования полимеризационных процессов заключается в составлении и численном решении кинетических уравнений для концентрации всех типов частиц, участвующих в процессе. При построении модели сополимеризации бутадиена со стиролом в эмульсии будем считать, что реакционная способность активного центра на конце растущей цепи определяется лишь природой концевой звена [2]. Рассмотрим по четыре элементарных реакции роста и обрыва цепи с участием двух мономеров M^1 и M^2 и двух типов растущих

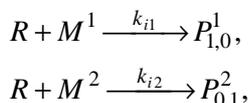
цепей, отличающихся природой конечного звена. Тогда кинетическую схему сополимеризации бутадиена со стиролом можно описать в виде следующих стадий.

Инициирование. На стадии инициирования образуются свободные радикалы. Их образование происходит в два этапа. На первом этапе распадаются молекулы инициатора (I), содержащиеся в исходной смеси:



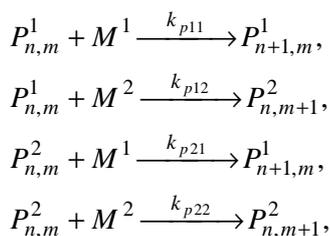
где k_d – константа скорости распада инициатора, R – иницирующий (первичный) радикал.

На втором этапе инициирования в результате взаимодействия первичного радикала и мономеров M^1 и M^2 образуются мономерные радикалы, отличающиеся природой конечного звена:



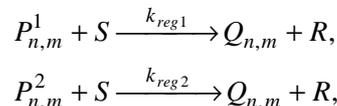
где k_i – константа скорости реакции иницирования.

Рост цепи:



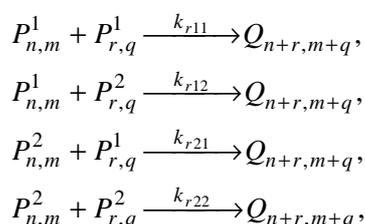
где k_p – константа скорости реакции роста цепи, $P_{n,m}$ – активная («растущая») цепь сополимера длиной $n + m$, содержащая n звеньев мономера M^1 и m звеньев мономера M^2 .

Передача цепи в результате взаимодействия с регулятором S :

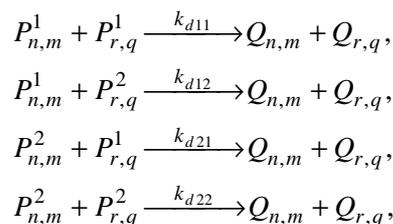


где k_{reg} – константа скорости реакции передачи цепи, $Q_{n,m}$ – неактивная («мертвая») цепь сополимера длиной $n + m$, содержащая n звеньев мономера M^1 и m звеньев мономера M^2 .

Обрыв цепи в результате рекомбинации:



и диспропорционирования:



где k_r, k_d – константы скоростей реакций рекомбинации и диспропорционирования.

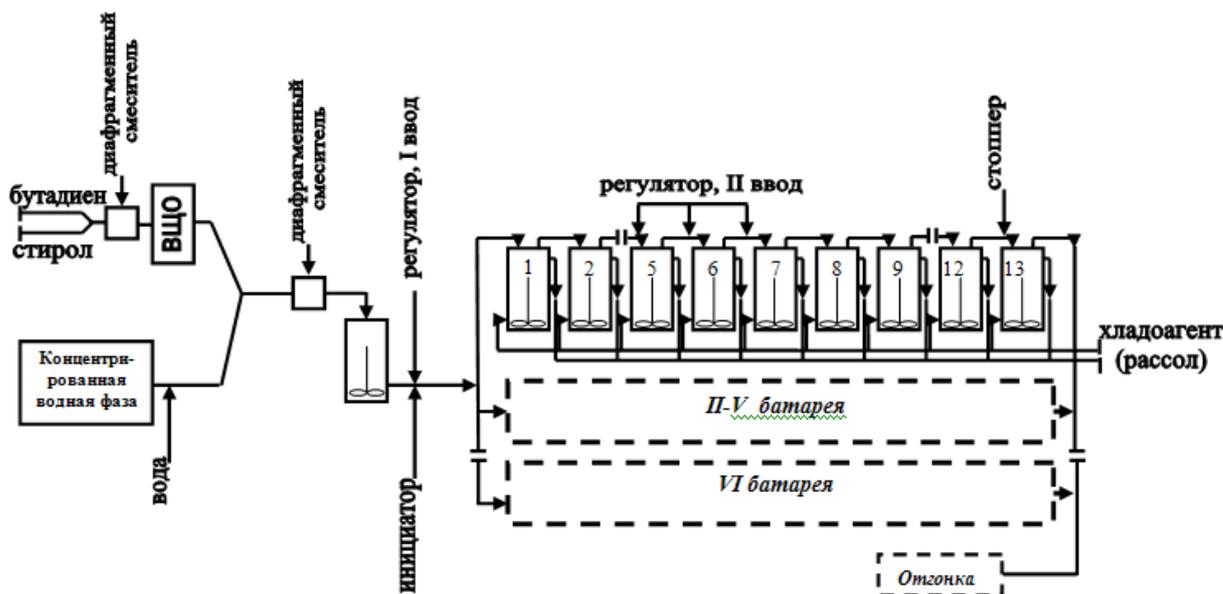


Рис. 1. Схема непрерывного производства синтетического каучука путем эмульсионной сополимеризации бутадиена со стиролом

**ПОСТРОЕНИЕ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ
И РЕШЕНИЕ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ**

Принципиальное отличие полимеризационных процессов от всех других химических процессов состоит в том, что вместо продукта с фиксированной молекулярной массой получают некоторое молекулярно-массовое распределение полимера (ММР). Статическая теория полимеризации исходит из возможности анализа ММР по особому рода средним молекулярным массам \overline{M}_w , \overline{M}_n , называемым среднemasовой и среднечисленной [3]. Для анализа вводятся понятия моментов активных цепей:

$$\Psi_k^{M^1} = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nw_a + mw_b)^k P_{n,m}^1,$$

$$\Psi_k^{M^2} = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nw_a + mw_b)^k P_{n,m}^2,$$

и неактивных цепей:

$$\Psi_k^Q = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nw_a + mw_b)^k Q_{n,m},$$

где $k = 0, 1, \dots, \infty$.

Составляя матрицу стехиометрических коэффициентов и умножая ее на вектор-столбец скоростей реакции, получим бесконечную (порядка 10^6) систему нелинейных дифференциальных уравнений, описывающую процесс сополимеризации бутадиена со стиролом:

$$\frac{dI}{dt} = -k_i I,$$

$$\frac{dM^1}{dt} = -k_{p11} M^1 \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^1 - k_{p21} M^1 \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^2,$$

$$\frac{dM^2}{dt} = -k_{p12} M^2 \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^1 - k_{p22} M^2 \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^2,$$

$$\frac{dS}{dt} = -k_{reg1} S \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^1 - k_{reg2} S \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^2,$$

$$\frac{dP_{n,m}^1}{dt} = (k_{p11} M^1 + k_{p12} M^2) P_{n,m}^1 -$$

$$- (k_{p11} P_{n-1,m}^1 + k_{p21} P_{n-1,m}^2) M^1 +$$

$$+ (k_{r11} P_{n,m}^1 + k_{d11} P_{n,m}^1) \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^1 +$$

$$+ (k_{r12} P_{n,m}^1 + k_{d12} P_{n,m}^1) \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^2 + k_{reg1} S P_{n,m}^1,$$

$$\begin{aligned} \frac{dP_{n,m}^2}{dt} &= (k_{p22} M^2 + k_{p21} M^1) P_{n,m}^2 - \\ &- (k_{p12} P_{n,m-1}^1 + k_{p22} P_{n,m-1}^2) M^2 + \\ &+ (k_{r22} P_{n,m}^2 + k_{d22} P_{n,m}^2) \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^2 + \\ &+ (k_{r21} P_{n,m}^2 + k_{d21} P_{n,m}^2) \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^1 + k_{reg2} S P_{n,m}^2, \\ \frac{dQ_{n,m}}{dt} &= (k_{d11} P_{n,m}^1 + k_{d21} P_{n,m}^2) \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 + \\ &+ (k_{d12} P_{n,m}^1 + k_{d22} P_{n,m}^2) \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 + \\ &+ \frac{k_{r11}}{2} \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 P_{n-r,m-q}^1 + \frac{k_{r12}}{2} \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^1 P_{n-r,m-q}^2 + \\ &+ \frac{k_{r21}}{2} \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 P_{n-r,m-q}^1 + \frac{k_{r22}}{2} \sum_{r,q=0}^{\infty} P_{r,q}^2 P_{n-r,m-q}^2 + \\ &+ k_{reg1} S P_{n,m}^1 + k_{reg2} S P_{n,m}^2. \end{aligned} \quad (1)$$

Упростим систему за счет использования следующих допущений: 1) скорость изменения концентраций радикалов в системе много меньше скорости их образования и гибели, т. е. в полимеризационной системе устанавливается квазистационарность по радикалам [4]; 2) реакционная способность макрорадикала не зависит от его длины.

Выпишем из системы (1) скорости изменения концентраций радикалов $\frac{dP_{n,m}^1}{dt}$ и $\frac{dP_{n,m}^2}{dt}$, которые согласно первому допущению равны нулю. Тогда с учетом обозначений:

$$C_{M^1} = \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^1, \quad C_{M^2} = \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^2, \quad (2)$$

получим систему:

$$\begin{aligned} &(k_{p11} M^1 + k_{p12} M^2 + k_{reg1} S + \\ &+ (k_{r11} + k_{d11}) C_{M^1} + (k_{r12} + k_{d12}) C_{M^2}) P_{n,m}^1 = \\ &= M^1 (k_{p11} P_{n-1,m}^1 + k_{p21} P_{n-1,m}^2), \\ &(k_{p22} M^2 + k_{p21} M^1 + k_{reg2} S + \\ &+ (k_{r21} + k_{d21}) C_{M^1} + (k_{r22} + k_{d22}) C_{M^2}) P_{n,m}^2 = \\ &= M^2 (k_{p12} P_{n,m-1}^1 + k_{p22} P_{n,m-1}^2), \quad n, m > 1, \end{aligned} \quad (3)$$

которую будем решать с использованием производящих функций вида:

$$G(s, u) = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} s^{n+m} u^{nw_a + mw_b} P_{n,m}^1, \quad (4)$$

$$F(s, u) = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} s^{n+m} u^{nw_a + mw_b} P_{n,m}^2.$$

Домножив левую и правую части (2) на $s^{n+m} u^{nw_a + mw_b}$ и просуммировав получившиеся выражения по n, m , получим систему уравнений, из которой выразим $G(s, u)$ и $F(s, u)$.

Полученные выражения для $G(s, u)$ и $F(s, u)$ будем использовать для расчета моментов ММР активных цепей сополимера [5]:

$$\begin{aligned} \Psi_k^{M^1} &= \left. \frac{d^k G(s, u)}{du^k} \right|_{s=u=1}, \\ \Psi_k^{M^2} &= \left. \frac{d^k F(s, u)}{du^k} \right|_{s=u=1}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\Psi_k^{M^1}, \Psi_k^{M^2}$ – моменты k -го порядка активных цепей сополимера, отличающихся природой концевой звена; w_a, w_b – молекулярная масса мономеров M^1 и M^2 соответственно.

Формулы для расчета моментов ММР неактивных цепей сополимера получим, домножая выражение для $dQ_{n,m}/dt$ из системы (1) на $(nw_a + nw_b)^k$ и суммируя получившиеся выражения по n, m .

Для расчета средних молекулярных масс сополимера необходимо знание моментов до 2-го порядка включительно, тогда система дифференциальных уравнений относительно моментов ММР сополимера примет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} &= -k_i I, \\ \frac{dM^1}{dt} &= -k_{p11} M^1 C_{M^1} - k_{p21} M^1 C_{M^2}, \\ \frac{dM^2}{dt} &= -k_{p12} M^2 C_{M^1} - k_{p22} M^2 C_{M^2}, \\ \frac{dS}{dt} &= -k_{reg1} S \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^1 - k_{reg2} S \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^2, \\ \frac{d\Psi_0^Q}{dt} &= \frac{k_{r11}}{2} \left(\Psi_0^{M^1} \right)^2 + k_{r12} \Psi_0^{M^1} \Psi_0^{M^2} + \\ &+ \frac{k_{r22}}{2} \left(\Psi_0^{M^2} \right)^2 + \\ &+ \left(k_{reg1} S + k_{d11} C_{M^1} + k_{d12} C_{M^2} \right) \Psi_0^{M^1} + \\ &+ \left(k_{reg2} S + k_{d21} C_{M^1} + k_{d22} C_{M^2} \right) \Psi_0^{M^2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_1^Q}{dt} &= k_{r11} \Psi_0^{M^1} \Psi_1^{M^1} + k_{r22} \Psi_0^{M^2} \Psi_1^{M^2} + \\ &+ k_{r12} \left(\Psi_0^{M^1} \Psi_1^{M^2} + \Psi_1^{M^1} \Psi_0^{M^2} \right) + \\ &+ \left(k_{reg1} S + k_{d11} C_{M^1} + k_{d12} C_{M^2} \right) \Psi_1^{M^1} + \\ &+ \left(k_{reg2} S + k_{d21} C_{M^1} + k_{d22} C_{M^2} \right) \Psi_1^{M^2}, \\ \frac{d\Psi_2^Q}{dt} &= k_{r11} \left(\left(\Psi_1^{M^1} \right)^2 + \Psi_0^{M^1} \Psi_2^{M^1} \right) + \\ &+ k_{r22} \left(\left(\Psi_1^{M^2} \right)^2 + \Psi_0^{M^2} \Psi_2^{M^2} \right) + \\ &+ k_{r12} \left(\Psi_0^{M^1} \Psi_2^{M^2} + 2\Psi_1^{M^1} \Psi_1^{M^2} + \Psi_2^{M^1} \Psi_0^{M^2} \right) + \\ &+ \left(k_{reg1} S + k_{d11} C_{M^1} + k_{d12} C_{M^2} \right) \Psi_2^{M^1} + \\ &+ \left(k_{reg2} S + k_{d21} C_{M^1} + k_{d22} C_{M^2} \right) \Psi_2^{M^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Начальные условия для системы (6) имеют вид:

$$\begin{aligned} I(0) &= I_0, \quad M^1(0) = M_0^1, \quad M^2(0) = M_0^2, \\ S(0) &= S_0, \quad \Psi_i^Q(0) = \Psi_i^{M^1}(0) = \Psi_i^{M^2}(0) = 0, \quad (7) \\ i &= 0, 1, 2. \end{aligned}$$

Найденные значения моментов молекулярно-массового распределения сополимера подставим в формулы для нахождения среднечисленной (M_n^Q) и среднемассовой (M_w^Q) молекулярных масс:

$$M_n^Q = \frac{\Psi_1^Q}{\Psi_0^Q}, \quad M_w^Q = \frac{\Psi_2^Q}{\Psi_1^Q}. \quad (8)$$

Не менее важным показателем качества продукта сополимеризации является значение характеристической вязкости $[\eta]$, для расчета которой будем использовать зависимость, описанную в работе [6]:

$$[\eta] = 5,4 \times 10^{-4} M_n^{Q,0.66}. \quad (9)$$

Применяя неявный метод Адамса – Мулттона 4-го порядка для численного решения жесткой системы дифференциальных уравнений (6)–(7) и подставляя значения моментов в (8)–(9), определим зависимости M_w^Q, M_n^Q и $[\eta]$ от времени сополимеризации (рис. 2). Из приведенных зависимостей видно, что значения усредненных молекулярных масс, вычисленных по формулам (8), а также значение характеристической вязкости, вычисленной по формуле (9), удовлетворительно описывают данные результатов эксперимента, проведенного в центральной заводской

лаборатории ОАО «Синтез-Каучук» (г. Стерлитамак), что подтверждает адекватность используемой нами модели.

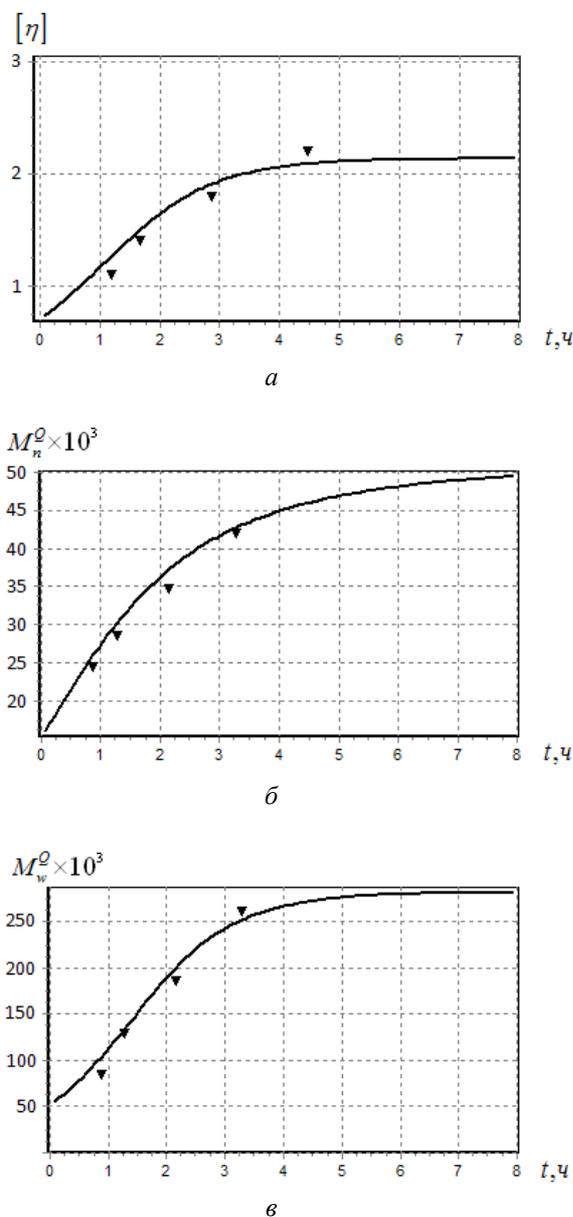


Рис. 2. Зависимость экспериментальных (точки) и расчетных (сплошная линия) значений характеристической вязкости (а), среднечисленных (б) и среднемассовых (в) молекулярных масс от времени

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

В ходе расчетов использовались кинетические параметры сополимеризации бутадиена со стиролом, взятые из работы [7]. Однако не все найденные значения соответствуют условиям и механизму процесса эмульсионной сополимеризации, потому для уточнения некоторых кинетических параметров (констант скоростей реакций рекомбинации и диспропорционирова-

ния) проводилось решение обратной задачи путем аппроксимации конверсионной зависимости.

Стратегия поиска кинетических параметров сополимеризации заключается в поиске минимума функции соответствия экспериментально определяемых параметров и вычисленных на основе математической модели, описывающей процесс сополимеризации (6)–(7):

$$H(z) = \sum_{i=1}^p \left(K_i^{\text{эксп.}} - K_i^{\text{расч.}} \right)^2, \quad \bar{z} = (k_d, k_r), \quad (10)$$

где $K_j^{\text{эксп.}}$ – значения конверсии, определенные в ходе эксперимента, $K_j^{\text{расч.}}$ – расчетные значения конверсии, определяемые по формуле:

$$K_j^{\text{расч.}} = 1 - \frac{F_j^{M^1} + F_j^{M^2}}{M^1 + M^2}, \quad (11)$$

где $F_j^{M^1}$ и $F_j^{M^2}$ – значения концентрации мономеров M^1 и M^2 :

$$F_j^{M^1} = M^1 \cdot e^{(-k_{p11} \cdot C_{M^1} - k_{p22} \cdot C_{M^2} / r_2) t_j}, \quad (12)$$

$$F_j^{M^2} = M^2 \cdot e^{(-k_{p11} \cdot C_{M^1} / r_1 - k_{p22} \cdot C_{M^2}) t_j}.$$

Для уточнения кинетических параметров путем минимизации функционала (10) использовался численный алгоритм метода конфигураций (Хука – Дживса).

ХИМИЧЕСКИЙ РАЗМЕР И СОСТАВ МАКРОМОЛЕКУЛ

Поскольку рассматриваемый процесс является сополимеризационным с участием двух мономеров (бутадиен, стирол), то необходимо, чтобы модель также предсказывала состав сополимера, распределение звеньев в цепи. Это обусловлено тем, что свойства сополимеров в большей степени определяются именно составом и распределением звеньев того или иного мономера, т.е. композиционной неоднородностью (КН). На КН существенное влияние оказывают активности мономеров и различные физические факторы.

Если взять произвольную молекулу сополимера, то охарактеризовать ее можно заданием чисел m и n , входящих в нее мономерных звеньев M^1 и M^2 . Эти числа рассматривают как компоненты некоторого вектора I , характеризующего химический размер $l = m + n$ и состав

$$\zeta_1 = \frac{m}{l}, \quad \zeta_2 = \frac{n}{l} \text{ молекулы.}$$

Помимо рассмотренного выше ММР, для сополимеров важное значение приобретает раз-

мер-состав распределение (PCP) [8], числовое или весовое. Числовое PCP $f_N(I)$ равно доле молекул в образце полимера, характеризуемого вектором I . Весовое PCP $f_W(I)$ равно доле всех звеньев в этих молекулах. Последнее определяется соотношением:

$$f_W(I) = f_W(l)W(l | \zeta), \quad (13)$$

где $f_W(l)$ – распределение по размеру, $W(l | \zeta)$ – фракционное композиционное распределение.

Для получения PCP продуктов сополимеризации, имеющих в реакционной среде при заданной конверсии p , следует усреднить мгновенное PCP по p :

$$\langle f_W(l, \zeta) \rangle = \frac{1}{p} \int_0^p f_W(l; p')W(l | \zeta; p')dp'. \quad (14)$$

В силу того, что продукт сополимеризации имеет достаточно высокий молекулярный вес, основная часть мономерных звеньев будет входить в состав достаточно длинных цепей. В рамках этого приближения пренебрегают мгновенной составляющей композиционного распределения по сравнению с его конверсионной составляющей, PCP факторизуется на произведение распределений по размеру и составу:

$$\langle f_W(l, \zeta) \rangle = f_W(l; p')\langle f_W(\zeta; p') \rangle. \quad (15)$$

Первое из них описывается выражением:

$$f_W(l) = \left[\frac{(1-\lambda)l}{2} \theta + \lambda \right] \theta^2 l e^{-\theta l}, \quad (16)$$

где λ – доля радикалов, гибнущих по механизму диспропорционирования,

$$\theta = \frac{k_i I}{k_{p11} C_{M1} M^1 + k_{p12} C_{M1} M^2 + k_{p21} C_{M2} M^1 + k_{p22} C_{M2} M^2},$$

а параметры берутся при том значении конверсии, где мгновенный состав сополимера X равен ζ . Второе распределение имеет вид:

$$\langle f_W(\zeta; p') \rangle = \frac{1}{p} \left| \frac{dX}{dp} \right|_{X=\zeta}^{-1}. \quad (17)$$

Для построения последнего распределения используется зависимость мгновенного состава сополимера X от конверсии p в параметрическом виде:

$$X = X(x), \quad x = x(p), \quad (18)$$

где x представляет собой мольную долю мономеров.

Для получения PCP продуктов сополимеризации использовался программный комплекс,

применяемый для решения прямой и обратной задачи, но расширенный возможностями численного расчета указанных распределений. Найденное распределение (17) при конверсии 70% имеет вид, изображенный на рис. 3.

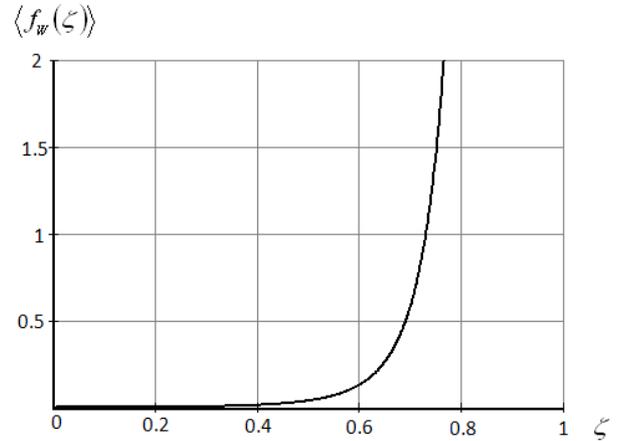


Рис. 3. Кривая композиционного распределения продуктов бинарной сополимеризации бутадиена со стиролом, полученных при конверсии 70%

Распределение продуктов сополимеризации по размеру и составу изображено на рис. 4, причем для этого состояния состав сополимерной смеси следующий: содержание бутадиена 68,8%, стирола 31,2%.

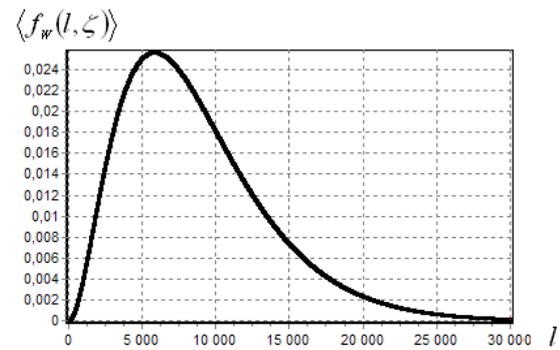


Рис. 4. Распределение продуктов сополимеризации по размеру и составу при конверсии 70%.

В целях повышения качества продукта сополимеризации важно знать условия сополимеризации, при которых могут образовываться неоднородные по составу продукты, чтобы избежать нежелательной композиционной неоднородности продуктов сополимеризации. Количественной характеристикой этой неоднородности служит дисперсия композиционного распределения (КР):

$$\langle \sigma^2 \rangle = \frac{1}{p} \int_0^p \sigma^2(p') dp' = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2, \quad (19)$$

где $\langle X \rangle$ представляет собой средний состав, полученный путем усреднения его мгновенного значения X по всем степеням превращения p' , меньшим p :

$$\langle X \rangle = \frac{1}{p} \int_0^p X dp'. \quad (20)$$

Для нахождения значений дисперсии КР, выражаемой в виде разности двух интегралов, был применен численный метод Рунге-Кутты. Полученная конверсионная зависимость приведена на рис. 5.

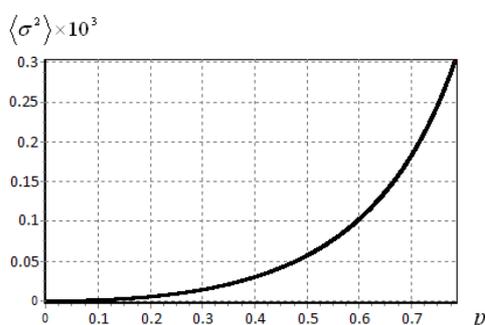


Рис. 5. Конверсионная зависимость дисперсии композиционного распределения продуктов сополимеризации бутадиена со стиролом

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Построена математическая модель сополимеризационного процесса бутадиена со стиролом, которая позволяет производить расчеты молекулярно-массового распределения, получать зависимость расхода реагентов, конверсионной зависимости и полидисперсности от времени, анализировать химический размер и состав макромолекул, а также композиционную неоднородность. Проведен вычислительный эксперимент для промышленно значимого про-

цесса сополимеризации, который показывает удовлетворительное согласование с экспериментальными данными, полученным в ЦЗЛ ОАО «Синтез-каучук» (г. Стерлитамак).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Кирпичников П. А., Береснев В. В., Попова Л. М.** Альбом технологических схем основных производств промышленности синтетического каучука. Л.: Химия, 1986. 224 с.
2. **Семчиков Ю. Д.** Высокомолекулярные соединения. М.: Академия, 2003. 368 с.
3. **Кафаров В. В., Дорохов И. Н., Дранишников Л. В.** Системный анализ процессов химической технологии. М.: Наука, 1991. 350 с.
4. **Подвальный С. Л.** Моделирование промышленных процессов полимеризации. М.: Химия, 1979. 256 с.
5. **Ray W. H., Douglas T. I., Godsalve E. W.** Macromolecules. 1971. № 4(2). P. 166.
6. **Booth C., Beason L. R., Bailey J. T.** Journal of applied polymer science. 1961. № 13. P. 116.
7. **Brandrup J., Immergut E. H., Grulke E. A.** Polymer Handbook. Wiley, 1998. 2317 p.
8. **Хохлов А. Р., Кучанов С. И.** Лекции по физической химии полимеров. М.: Мир, 2000. 192 с.

ОБ АВТОРАХ

Мифтахов Эльдар Наилевич, асс. каф. физики и математики филиала УГАТУ в г. Ишимбае. Дипл. мат., сист. программист (СГПА, 2008). Готовит дисс. в обл. моделирования сополимеризационного процесса.

Мустафина Светлана Анатольевна, проф. той же каф. Дипл. преп. математики (БГУ, 1989). Д-р физ.-мат. наук по математическ. моделям (2007). Иссл. в обл. оптимизационного управл-я, экстрем. свойств физ.-хим. процессов.