

УДК 519.60

О выводе нелинейных параметрических функций для процессов радикальной полимеризации

Гиззатов Д.Р., Гиззатова Э.Р.

Уфимский университет науки и технологий

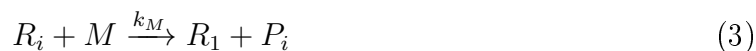
Аннотация: В данной работе применяется метод поиска нелинейных параметрических базисных функций для процесса радикальной полимеризации диеновых углеводородов, позволяющий получать набор функций-векторов, характеризующих процесс. В свою очередь, функции-вектора показывают принципиальные взаимосвязи компонентов химического процесса и могут быть интерпретированы как ограничительные условия для поиска решений обратных кинетических задач.

Ключевые слова: радикальная полимеризация, конверсия, математическая модель, базис реакций, базисные функции.

1. Введение. Схема процесса.

Процессы полимеризации позволяют исследователям проводить качественный эмпирический [1] и аналитический анализ [2]. Последние позволяют получать зависимости некоторого рода, характеризующие процесс таким образом, что предугадывается поведение некоторых компонентов смеси и их взаимосвязь друг с другом [3]. При этом в аналитических зависимостях участвуют константы скоростей элементарных стадий, что показывает вклад этих стадий на значения получаемых количественных характеристик готового полимерного продукта.

Исследуется кинетическая схема процесса радикальной полимеризации, проходящая в пять стадий: стадии иницирования (1), стадии роста полимерной цепи (2), стадии передачи цепи на мономер (3), стадий бимолекулярного обрыва – рекомбинации (4) и диспропорционирования (5):



Взаимосвязь стадий друг с другом показывает математическая модель процесса, которая выписывается согласно законам химической кинетики и представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений, каждое из которых характеризует скорость изменения отдельного компонента смеси во времени.

2. Результаты применения подхода.

Применение подхода, позволяющего определить базис нелинейных параметрически функций, изложен в работе [3]. Согласно ему, требуется найти матрицу, характеризующую исследуемый процесс и вычленив из нее пары линейно зависимых столбцов. Именно такие столбцы и позволяют определять нелинейные параметрические функции.

Так, для рассматриваемого процесса можно определить следующие функции:

$$\rho_1 = k_i (1 + \varepsilon_I) \quad (6)$$

$$\rho_2 = (k_p + k_M) (1 + \varepsilon_M) \quad (7)$$

$$\rho_3 = 2 (k_{rec} + k_{disp})^2 (k_p + k_M) \quad (8)$$

Таким образом, полученные базисные функции дают возможность характеризовать процесс как совокупность факторов влияния стадий на изменение ряда параметров процесса, в том числе средние молекулярные характеристик полимера. В дальнейшем, динамика процесса может быть проанализирована в базисном пространстве, построенном на функциях ρ_1 , ρ_2 , ρ_3 , как векторах.

Литература

1. Улитин Н.В., Терещенко К.А., Фризен А.К., Буракова А.О., Колесов С.В., Шиян Д.А., Темникова Н.Е. Кинетическая схема и кинетические константы процесса синтеза полиметилметакрилата, протекающего по радикально-координационному механизму // Кинетика и катализ. 2017. Т. 58, № 2. С. 133–144.
2. Гиззатова Э.Р., Спивак С.И., Колесов С.В. Математическое моделирование кинетической неоднородности констант скоростей бимолекулярного обрыва радикальной полимеризации // Системы управления и информационные технологии. 2015. № 1-1(59). С.126–129.
3. Гиззатова Э.Р., Исмагилова А.С. Спивак С.И., Подвальный С.Л. О методе поиска базиса нелинейных параметрических функций для полимеризационных процессов // Химическая физика. 2018. Т. 37, №12. С. 58–62.

MSC 54B99

On the derivation of nonlinear parametric functions for radical polymerization processes

D.R. Gizzatov, E.R. Gizzatova

Ufa University of Science and Technology

Abstract: In this work, a method of searching for nonlinear parametric basis functions for the process of radical polymerization of diene hydrocarbons is applied, which allows us to obtain a set of function-vectors characterizing the process. In turn, the function-vectors show the principal interrelationships of the components of the chemical process and can be interpreted as limiting conditions for finding solutions to inverse kinetic problems.

Keywords: Radical polymerization, conversion, mathematical model, reaction basis, basic functions.

References

1. Ulitin N.V., Tereshchenko K.A., Friesen A.K., Burakova A.O., Kolesov S.V., Shiyan D.A., Temnikova N.E. Kinetic scheme and kinetic constants of the process of synthesis of polymethyl methacrylate proceeding by radical-coordination mechanism // *Kinetics and Catalysis*. 2017. Vol. 58, № 2. P. 133–144.
2. Gizzatova E.R., Spivak S.I., Kolesov S.V. Mathematical modeling of kinetic inhomogeneity of bimolecular breakage rate constants of radical polymerization // *Control Systems and Information Technologies*. 2015. №1-1(59). P.126–129.
3. Gizzatova E.R., Ismagilova A.S., Spivak S.I., Podvalnyi S.L. On the method of searching the basis of nonlinear parametric functions for polymerization processes // *Chemical Physics*. 2018. Vol. 37, № 12. P. 58–62.