

Моделирование непрерывного процесса свободно-радикальной сополимеризации бутадиена со стиролом методом Монте-Карло

Татьяна А. Михайлова, ¹	T.A. Mihailova@yandex.ru
Эльдар Н. Мифтахов, ²	promif@mail.ru
Ильдус Ш. Насыров, ³	nasyrov.ish@skstr.ru
Светлана А. Мустафина ¹	Mustafina_SA@mail.ru

¹ кафедра математического моделирования, Стерл. филиал Баш. гос. ун-та, пр-т Ленина, 49, г. Стерлитамак, Россия

² кафедра физики и математики, Уфимск. гос. авиац. техн. ун-т, филиал в г. Ишимбае, ул. Губкина, 15, г. Ишимбай, Россия

³ ОАО «Синтез-Каучук», ул. Техническая, 14, г. Стерлитамак, Россия

Реферат. В статье предложен алгоритм моделирования непрерывного процесса низкотемпературной свободно-радикальной сополимеризации бутадиена со стиролом в эмульсии, основанный на методе Монте-Карло. Этот процесс лежит в основе промышленного производства бутадиен-стирольного синтетического каучука, который является наиболее распространённым крупнотоннажным каучуком общего назначения. В основе алгоритма моделирования лежит имитация роста каждой макромолекулы образующегося сополимера и отслеживание происходящих с ней процессов. Моделирование осуществляется с учётом распределения по времени пребывания частиц в системе, что даёт возможность исследовать процесс, протекающий в батарее последовательно соединённых полимеризаторов. При этом каждый полимеризатор представляет собой реактор идеального смешения непрерывного действия. Так как процесс является непрерывным, то при моделировании учтено постоянное добавление порции реакционной смеси в первый реактор каскада. Построенная модель позволяет исследовать молекулярно-массовые и вязкостные характеристики образующегося продукта сополимеризации, прогнозировать массовое содержание бутадиена и стирола в сополимере, проводить расчёт молекулярно-массового распределения получаемого продукта в любой момент времени ведения процесса. По результатам проведённых вычислительных экспериментов проведён анализ влияния режима, вводимого во время ведения процесса регулятора на изменение характеристик образующегося бутадиен-стирольного сополимера. Так как рассматриваемый процесс проходит с участием мономеров двух типов, то помимо перечисленного модель позволяет исследовать композиционную неоднородность получаемого продукта, то есть проводить расчёт композиционного распределения и распределения макромолекул по размеру и составу. На основе предложенного алгоритма создано программное средство, позволяющее отслеживать изменение характеристик образующегося продукта в динамике.

Ключевые слова: сополимеризация, бутадиен, стирол, метод Монте-Карло, распределение по времени пребывания, молекулярно-массовое распределение, композиционная неоднородность.

Modeling of continuous free-radical butadiene-styrene copolymerization process by the Monte Carlo method

Tatiana A. Mikhailova, ¹	T.A. Mihailova@yandex.ru
Eldar N. Miftakhov, ²	promif@mail.ru
Ildus Sh. Nasyrov, ³	nasyrov.ish@skstr.ru
Svetlana A. Mustafina ¹	Mustafina_SA@mail.ru

¹ department of mathematical modeling, Sterlitamak branch of Bashkir state university, Lenin av., 49, Sterlitamak, Russia

² department of Physics and Mathematics, Ufa state aviation technical university, Ishimbay branch, Gubkina, 15, Ishimbay, Russia

³ JSC "Sintez-Kauchuk", Tekhnicheskaya, 14, Sterlitamak, Russia

Summary. In the paper the algorithm of modeling of continuous low-temperature free-radical butadiene-styrene copolymerization process in emulsion based on the Monte-Carlo method is offered. This process is the cornerstone of industrial production butadiene – styrene synthetic rubber which is the most widespread large-capacity rubber of general purpose. Imitation of growth of each macromolecule of the formed copolymer and tracking of the processes happening to it is the basis of algorithm of modeling. Modeling is carried out taking into account residence-time distribution of particles in system that gives the chance to research the process proceeding in the battery of consistently connected polymerization reactors. At the same time each polymerization reactor represents the continuous stirred tank reactor. Since the process is continuous, it is considered continuous addition of portions to the reaction mixture in the first reactor of battery. The constructed model allows to research molecular-weight and viscous characteristics of the formed copolymerization product, to predict the mass content of butadiene and styrene in copolymer, to carry out calculation of molecular-weight distribution of the received product at any moment of conducting process. According to the results of computational experiments analyzed the influence of mode of the process of the regulator introduced during the maintaining on change of characteristics of the formed butadiene-styrene copolymer. As the considered process takes place with participation of monomers of two types, besides listed the model allows to research compositional heterogeneity of the received product that is to carry out calculation of composite distribution and distribution of macromolecules for the size and structure. On the basis of the proposed algorithm created the software tool that allows you to keep track of changes in the characteristics of the resulting product in the dynamics.

Keywords: copolymerization, butadiene, styrene, Monte Carlo method, residence-time distribution, molecular-weight distribution, compositional heterogeneity.

Для цитирования

Михайлова Т. А., Мифтахов Э. Н., Насыров И. Ш., Мустафина С. А. Моделирование непрерывного процесса свободно-радикальной сополимеризации бутадиена со стиролом методом Монте-Карло // Вестник ВГУИТ. 2016. № 2. С 210–217. doi:10.20914/2310-1202-2016-2-210-217

For citation

Mikhailova T. A., Miftakhov E. N., Nasyrov I. Sh., Mustafina S. A. Modeling of continuous free-radical butadiene-styrene copolymerization process by the Monte Carlo method. *Vestnik VSUET* [Proceedings of VSUET]. 2016. no. 2. pp. 210–217 (in Russ.). doi:10.20914/2310-1202-2016-2-210-217

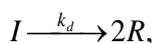
Введение

Обширную группу нефтехимической продукции составляют синтетические каучуки, которые представляют собой полимеры, способные перерабатываться в процессе вулканизации в резину. В настоящее время производится широкий ассортимент синтетических каучуков, отличающихся потребительскими свойствами, что напрямую зависит от используемых мономеров: бутадиен, стирол, изопрен и др. Их сочетание и способ полимеризации определяет конечные свойства получаемого продукта и его назначение.

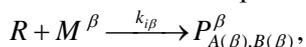
Бутадиен-стирольные синтетические каучуки являются одними из самых распространённых крупнотоннажных каучуков общего назначения. В основе промышленного производства лежит процесс низкотемпературной свободно-радикальной сополимеризации бутадиена со стиролом в эмульсии. Изучение этого процесса становится возможным при построении математической модели. В свою очередь, моделирование позволит прогнозировать свойства и модифицировать качественные показатели получаемого продукта, что является актуальной задачей на сегодняшний день.

1.1 Материалы и методы исследований

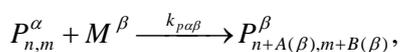
Предварительно необходимо выписать кинетическую схему процесса сополимеризации, при этом будем полагать, что реакционная способность активного центра растущей цепи определяется природой концевой звена. Кинетическую схему процесса составляют следующие стадии: распад инициатора



иницирование активных центров



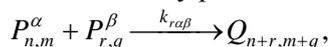
рост цепи



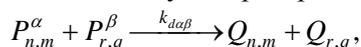
передача цепи на регулятор



обрыв цепи по механизму рекомбинации



обрыв цепи по механизму диспропорционирования



где $\alpha, \beta = 1, 2$; M^1, M^2 – мономеры первого и второго типа (бутадиен и стирол); $P_{n,m}^\alpha$ и $Q_{n,m}$ – активные и неактивные цепи полимера длиной $m + n$, состоящие из m звеньев мономера M^1 и

n звеньев мономера M^2 , оканчивающиеся мономером M^α ; $k_i, k_p, k_{reg}, k_d, k_r$ – константы элементарных стадий иницирования, роста, передачи цепи, диспропорционирования и рекомбинации соответственно; $A(\beta) = \{1, \text{если } \beta = 1; \text{иначе } 0\}$; $B(\beta) = \{1, \text{если } \beta = 2; \text{иначе } 0\}$.

Ранее в работе [1] был рассмотрен алгоритм моделирования периодического процесса сополимеризации бутадиена со стиролом, основанный на методе Монте-Карло. Но производство бутадиен-стирольного каучука представляет собой непрерывный процесс, протекающий одновременно в нескольких аппаратах, объединённых в каскад. Это связано с повышением производительности, стабильными показателями получаемого продукта и экономической эффективностью.

При моделировании периодического полимеризационного процесса все частицы системы на протяжении всего времени находятся в одном реакторе. В этом случае каждая реакция характеризуется временем моделирования, которое рассчитывается по формуле:

$$\Delta t = \frac{1}{R_{sum}} \ln\left(\frac{1}{r_p}\right), \quad (1)$$

где R_{sum} – сумма скоростей возможных элементарных реакций кинетической схемы процесса, r_p – случайное число, сгенерированное на отрезке $[0, 1]$. Но в случае непрерывного процесса стоит говорить о некотором среднем времени пребывания как о некоторой случайной величине, которая характеризуется вероятностной функцией распределения [2].

Согласно [3], вероятность того, что частица проводит время от t до $t + dt$ в текущем реакторе, равна $p(t)dt$, но так как рассматриваемые полимеризаторы представляют собой реакторы идеального смешения непрерывного действия, то для них величина $p(t)$ рассчитывается по формуле:

$$p(t) = \left(\frac{n}{\tau}\right)^n \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} e^{-\frac{nt}{\tau}}, \quad (2)$$

где n – количество реакторов в системе, τ – среднее время пребывания реакционной смеси в одном реакторе (ч).

На рисунке 1 изображено распределение частиц реакционной смеси по времени пребывания для батареи из 12 полимеризаторов объёмом $V = 10.8 \text{ м}^3$ с объёмной скоростью потока $C_f = 9.5982 \text{ м}^3/\text{ч}$. В этом случае среднее время пребывания реакционной смеси в одном полимеризаторе равно 1.125 ч.

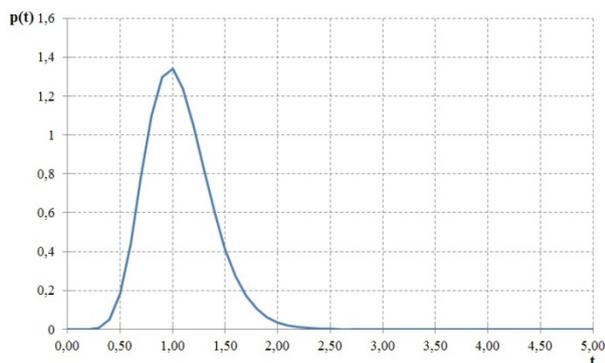


Рисунок 1. Распределение по времени пребывания в каскаде из 12 реакторов

Figure 1. Residence time distribution in the cascade of 12 reactors.

Таким образом, для моделирования непрерывного процесса полимеризации, проводящегося в каскаде реакторов идеального смешения, необходимо каждую частицу системы (молекулу, макромолекулу) дополнительно характеризовать временем пребывания в реакторе, которое определяется с использованием распределения (2). Для этого отрезку времени от 0 до t_{max} подбирали шаг разбиения dt , чтобы сумма вероятностей для каждого варианта времени пребывания была равна единице.

После этого необходимо сгенерировать случайное число $r_p \in [0,1]$ и подобрать такое значение порядкового номера f , чтобы существовало неравенство:

$$\sum_{i=1}^{f-1} p((f-1) \cdot dt) < r_p < \sum_{i=1}^f p(f \cdot dt). \quad (3)$$

Следовательно, в результате розыгрыша выбранной частице соответствует время пребывания $f \cdot dt$ [4].

Тогда для процесса, которому соответствует среднее время пребывания реакционной смеси 1.125 ч, таким отрезком времени является отрезок от 0 до 5 ч с шагом 0.1 ч.

Алгоритм моделирования непрерывного процесса сополимеризации бутадиена со стиролом можно представить в виде последовательности шагов, при этом учитывается, что каждый час в первый реактор добавляется порция реакционной смеси, соответствующая производственной рецептуре процесса.

Шаг 1. Зададим объём и характеристики подаваемой порции реакционной смеси, предварительно рассчитав количество молекул каждой составляющей смеси: бутадиен M^1 , стирол M^2 , инициатор I и регулятор S . Также необходимо задать технологические параметры процесса:

объём реактора V , количество реакторов m , объёмную скорость потока C_f и порядковые номера полимеризаторов, в которые подаётся регулятор.

Шаг 2. Преобразуем константы скоростей элементарных реакций:

$\tilde{k} = k$ для реакций первого порядка;

$\tilde{k} = \frac{k}{V \cdot N_A}$ для реакций второго порядка (V – объём реактора, N_A – постоянная Авогадро).

Шаг 3. Вычислим скорость каждой реакции кинетической схемы R_i для реактора с порядковым номером j :

$$R_i = \tilde{k}_i \cdot X_A \cdot X_B,$$

где \tilde{k}_i – константа скорости i -й реакции, в которой участвуют реагенты A и B ; X_A , X_B – концентрации реагентов (количество молекул). Посредством их суммирования получим общую скорость реакции:

$$R_{sum} = R_1 + R_2 + \dots + R_n,$$

где n – число элементарных реакций кинетической схемы процесса.

Шаг 4. Вычислим вероятность p_i осуществления каждой реакции в данный момент времени:

$$p_i = \frac{R_i}{R_{sum}}, \quad i = 1..n.$$

Очевидно, что $p_1 + p_2 + \dots + p_n = 1$

Шаг 5. Сгенерируем равномерно распределённое случайное число r_p на отрезке от 0 до 1 и подберём такое значение порядкового номера реакции в кинетической схеме процесса f , чтобы существовало неравенство:

$$\sum_{i=1}^{k-1} p_i < r < \sum_{i=1}^k p_i.$$

Следовательно, в результате имитационного выбора в реакторе с порядковым номером j должна произойти реакция под индексом f ($f = 1, n$).

Шаг 6. Для выбранной реакции рассчитаем время её моделирования Δt_j согласно формуле (1), а для каждой образованной или оборванной в результате шага 5 частицы определим время её выхода из текущего реактора t_{ex} :

$$t_{ex} = t + t_{dm},$$

где t – текущее время моделирования процесса с его начала, t_{dm} – время пребывания молекулы в текущем реакторе, вычисленное согласно распределению (2).

Шаг 7. Повторим последовательность действий с шага 3 по шаг 6 для каждого реактора каскада ($j = \overline{1, m}$)

Шаг 8. Изменим общее время моделирования, увеличив его на минимальное время моделирования реакции во всех полимеризаторах:

$$t = t + \min_{j=1, m} \Delta t_j.$$

Шаг 9. Для каждого реактора каскада переведём в следующий реактор всё молекулы, время выхода которых меньше общего времени протекания процесса. После этого возвратимся к шагу 3.

Шаг 10. Продолжая рассуждения и повторяя последовательность действий с шага 3 по шаг 9, выстроим всю схему моделирования процесса.

Построенная модель даёт возможности для исследования характеристик бутадиен-стирольного сополимера. При этом информация о состоянии образующегося продукта может быть получена как на выходе из каждого реактора, так и при достижении необходимых значений конверсии.

1.2 Результаты и обсуждение

На основе разработанного алгоритма создан программный комплекс в среде программирования Visual Studio на языках C# и Visual C++. Он позволяет проводить вычислительные эксперименты по моделированию непрерывного процесса сополимеризации бутадиена со стиролом в каскаде реакторов идеального смешения. Программный комплекс даёт возможность решать прямую задачу определения молекулярно-массовых и вязкостных характеристик получаемого продукта, а также исследовать композиционное распределение образующегося сополимера.

При проведении вычислительного эксперимента был исследован процесс сополимеризации бутадиена со стиролом при следующих технологических параметрах ведения процесса и производственной рецептурой порции реакционной смеси:

- нагрузка на батарею по мономерам: 3,0 т/ч (бутадиен 70 мас. ч., стирол – 30 мас. ч.);
- дозировка инициатора (гидроперекись пинана): 0,048 мас. ч.;
- дозировка регулятора (трет-додецил меркаптан): 0,26 мас. ч. – первая точка (1 полимеризатор), 0,02 мас. ч. – вторая точка (7 полимеризатор);
- соотношение вода/мономеры = 220,8 / 100;
- рабочий объём полимеризатора $V = 10,8 \text{ м}^3$;
- число полимеризаторов: 12;
- объёмная скорость потока $C_f = 10,1432 \text{ м}^3/\text{ч}$.
- время нахождения реакционной смеси в одном полимеризаторе $\theta = V / C_f = 1,065 \text{ ч}$.

Таблица 1.

Данные производственного эксперимента

Table 2.

Data of production experiment

Номер реактора Number of reactor	Конверсия мономеров, % Conversion of monomers, %	Характ. вязкость, дл/г Intrinsic viscosity, dl/g	Содержание связанного стирола, % Content of bound styrene, %
4	42,0	1,13	20,8
5	60,5	1,23	21,5
9	76,6	1,52	23,3
12	82,0	1,74	24,7

На рисунке 2–4 изображено поведение конверсионной кривой и зависимостей характеристической вязкости от порядкового номера реакторов и конверсии мономеров. Результаты были получены по итогам моделирования 15 и 30 часов ведения процесса и удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Поведение кривой характеристической вязкости связано с расходом регулятора (рис. 5). Основная часть регулятора (более половины порции) расходуется в первом и втором реакторах, что существенно замедляет рост характеристической вязкости. Дополнительная подача регулятора во вторую точку в седьмой реактор способствует повторному замедлению бурного роста характеристик продукта. В дальнейшем регулятор расходуется полностью, чему и соответствует резкий рост молекулярной массы, а соответственно и характеристической вязкости получаемого сополимера.

Характер изменения молекулярной массы образующегося бутадиен-стирольного сополимера отображает зависимость коэффициента полидисперсности от номера полимеризатора в каскаде (рис. 6). По итогам моделирования 30 часов ведения процесса значения коэффициента полидисперсности меняются от 2 ед. в первом реактора до 5.5 ед. в последнем реакторе каскада, что соответствует стандартным показателям бутадиен-стирольного каучука. Точка перегиба кривой зависимости коэффициента полидисперсности от номера реактора связана с дробной подачей регулятора.

Изменение массового состава образующегося бутадиен-стирольного сополимера изображено на рис. 7: содержание бутадиена меняется с 80% в первом реакторе до 72% в последнем реакторе каскада, стирола – с 20% до 28% соответственно.

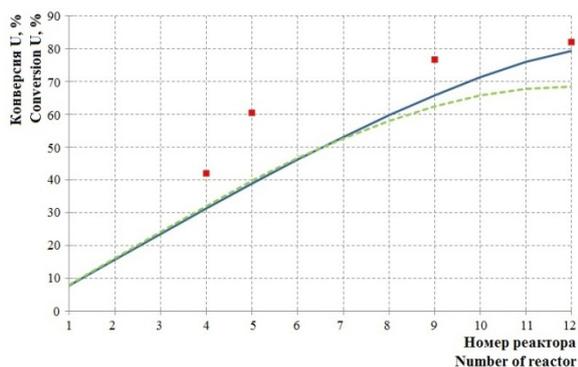


Рисунок 2. Зависимость расчётных (линия) и экспериментальных (точки) значений конверсии от номера реактора в каскаде: пунктир – 15 ч, сплошная линия – 30 ч ведения процесса

Figure 2. The dependence of the calculated (lines) and experimental (points) conversion's values from reactor's number in the cascade: the dotted line – 15 hours, the solid line – 30 hours conducting of the process

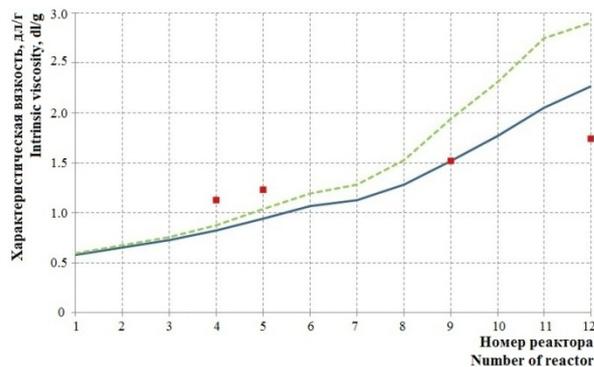


Рисунок 3. Зависимость расчётных (линия) и экспериментальных (точки) значений характеристической вязкости от номера реактора в каскаде: пунктир – 15 ч, сплошная линия – 30 ч ведения процесса

Figure 3. The dependence of the calculated (lines) and experimental (points) intrinsic viscosity's values from reactor's number in the cascade: the dotted line – 15 hours, the solid line – 30 hours conducting of the process

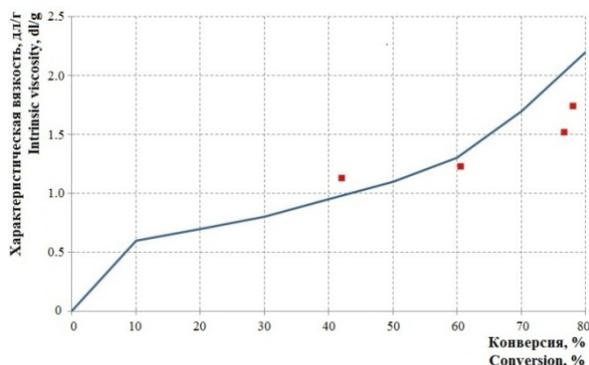


Рисунок 4. Зависимость расчётных (линия) и экспериментальных (точки) значений характеристической вязкости от конверсии мономеров

Figure 4. The dependence of the calculated (lines) and experimental (points) intrinsic viscosity's values from conversion of monomers

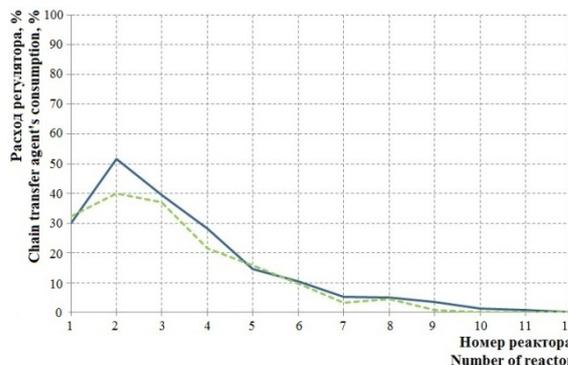


Рисунок 5. Изменение концентрации регулятора в реакторах: пунктир – 15 ч, сплошная линия – 30 ч ведения процесса

Figure 5. Changing chain transfer agent's concentration in the reactors: the dotted line – 15 hours, the solid line – 30 hours conducting of the process

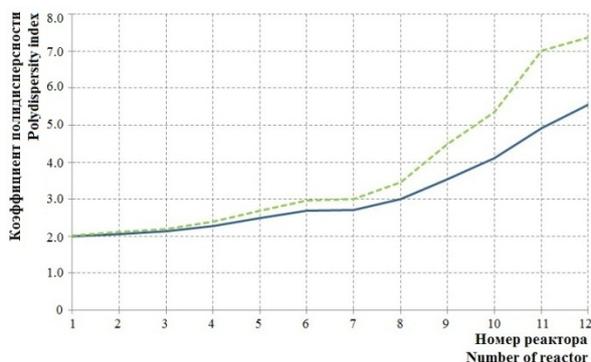


Рисунок 6. Изменение коэффициента полидисперсности образующегося сополимера в зависимости от номера реактора: пунктир – 15 ч, сплошная линия – 30 ч ведения процесса

Figure 6. Changing polydispersity index of the formed copolymer depending on the number of reactor: the dotted line – 15 hours, the solid line – 30 hours conducting of the process

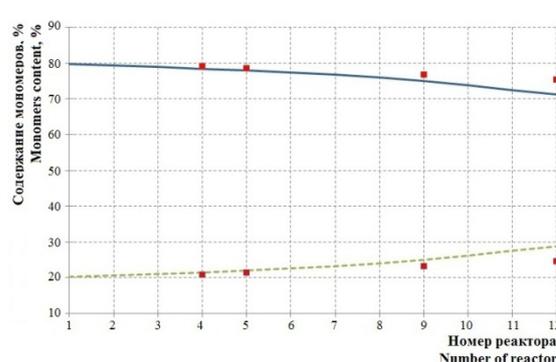


Рисунок 7. Зависимость массового содержания бутадиена (сплошная линия) и стирола (пунктир) от номера реактора (точки – экспериментальные данные)

Figure 7. Dependence of weight content of butadiene (solid line) and styrene (dotted line) from number of the reactor (points – experimental data)

На рисунке 8 изображена дифференциальная кривая молекулярно-массового распределения (ММР), которая демонстрирует соотношение макромолекул различной молекулярной массы в образце сополимера. При моделировании процесса сополимеризации методом Монте-Карло для построения ММР необходимо произвести численное фракционирование макромолекул образовавшегося сополимера по массе и рассчитать массовую долю каждой фракции сополимера. ММР бутадиен-стирольного сополимера с увеличением объёма реакционной смеси повторяет поведение модельного распределения Шульца–Флори, которое учитывает обрыв цепи в результате взаимодействия с регулятором [5].

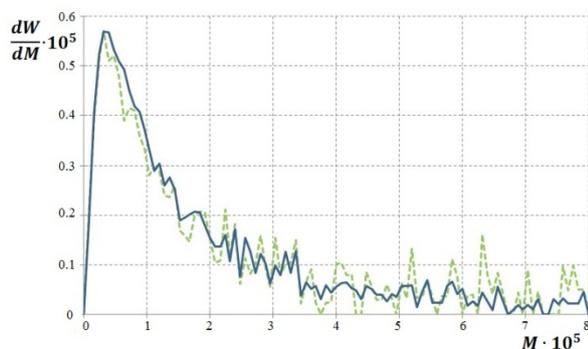


Рисунок 8. Дифференциальная кривая молекулярно-массового распределения бутадиен-стирольного сополимера

Figure 8. Differential curve of the molecular weight distribution of the butadiene-styrene copolymer

Так как исследуемый процесс производства бутадиен-стирольного каучука является сополимеризационным, то для образующихся макромолекул сополимера помимо отличия по размеру характерно отличие по составу (доле звеньев бутадиена и стирола).

Состав образующегося сополимера характеризует композиционное распределение, которое позволяет определить состав преобладающих в сополимере макромолекул. Для построения композиционного распределения продуктов бинарной сополимеризации необходимо построить соотношение между долей массового содержания первого мономера (бутадиена) в образующемся продукте и числовой долей макромолекул сополимера с учётом их размеров.

На рисунке 9 представлена кривая композиционного распределения продукта сополимеризации бутадиена со стиролом по

итомам моделирования 15 и 20 часов ведения процесса. В полученном продукте наблюдается преобладание макромолекул с долей бутадиена в составе в пределах 76–78%.

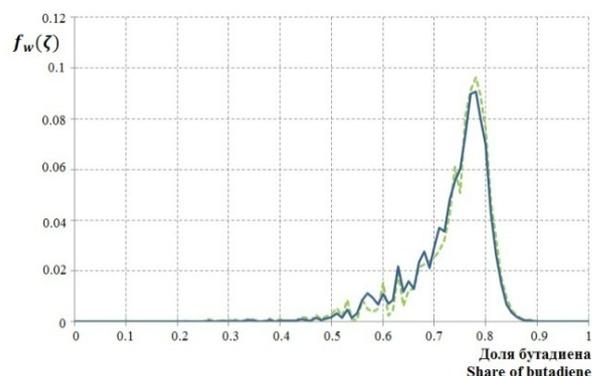


Рисунок 9. Композиционное распределение продукта сополимеризации бутадиена со стиролом, полученного в результате вычислительного эксперимента

Figure 9. Compositional distribution of the butadiene-styrene copolymerization product received as a result of computing experiment

Для построения распределения макромолекул сополимера по размеру и составу необходимо поделить образовавшиеся макромолекулы сополимера на фракции по массовому содержанию бутадиена и построить соотношение между степенью сополимеризации и числовой долей соответствующих макромолекул сополимера с учётом их размера.

На рисунках 10–12 показаны стационарные состояния, отвечающие различным составам бутадиен-стирольного сополимера по результатам вычислительного эксперимента по моделированию 30 часов ведения процесса.

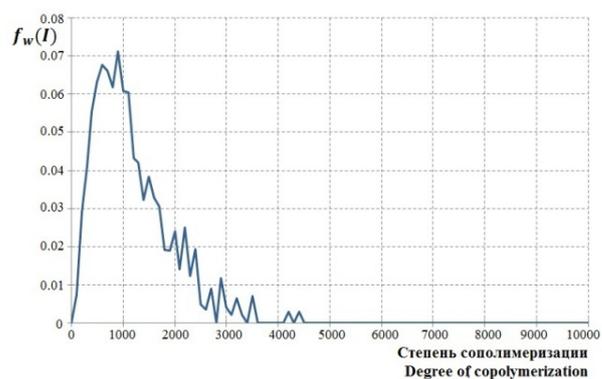


Рисунок 10. Распределение по размеру и составу макромолекул бутадиен-стирольного сополимера (бутадиен – 80%, стирол – 20%)

Figure 10. Distribution by the size and structure of the macromolecules of butadiene-styrene copolymer (butadiene – 80%, styrene – 20%)

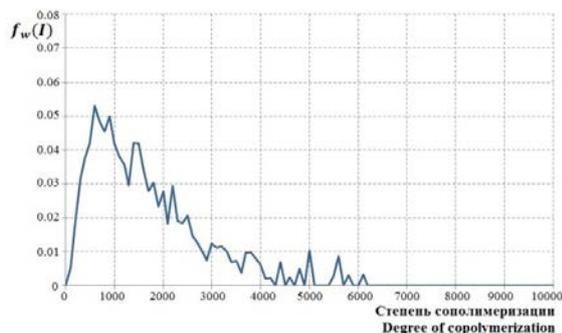


Рисунок 11. Распределение по размеру и составу макромолекул бутадиен-стирольного сополимера (бутадиен – 78%, стирол – 22%)

Figure 11. Distribution by the size and structure of the macromolecules of butadiene-styrene copolymer (butadiene – 78%, styrene – 22%)

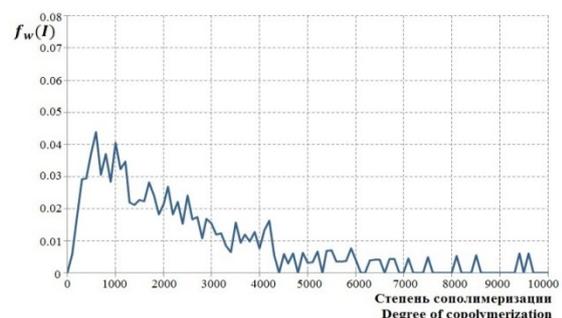


Рисунок 12. Распределение по размеру и составу макромолекул бутадиен-стирольного сополимера (бутадиен – 76%, стирол – 24%)

Figure 12. Distribution by the size and structure of the macromolecules of butadiene-styrene copolymer (butadiene – 76%, styrene – 24%)

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Mustafina S., Mikhailova T., Miftakhov E. Mathematical Study of the butadiene-styrene copolymerization product by the Monte-Carlo method // International journal of chemical sciences. 2015. № 13(2). P. 849–856.
- 2 Khapre A., Rajavathsavai D., Munshi B. Study on residence time distribution of CSTR using CFD // Indian Journal of Chemical Technology. 2016. № 23. P. 114–120.
- 3 Rawlings J.B., Ekerdt J.G. Chemical Reactor Analysis and Design Fundamentals. Madison: Nob Hill Publishing, 2002. 609 p.
- 4 Михайлова Т.А., Григорьев И.В., Мустафина С.А. Исследование синтеза бутадиен-стирольного сополимера на основе метода Монте-Карло с учётом распределения по времени пребывания // Фундаментальные исследования. 2015. № 5–3. С. 517–520.
- 5 Прокопов Н.И., Гервальд А.Ю. и др. Практикум по дисциплине «Методы исследования полимеров». М.: МИТХТ, 2013. 150 с.

Заключение

Таким образом, предложенный алгоритм моделирования, основанный на методе Монте-Карло, адекватно описывает непрерывный процесс сополимеризации бутадиена со стиролом, проводящийся в каскаде реакторов идеального смешения. Для осуществления моделирования процесса учтено распределение по времени пребывания частиц системы. Получаемая в результате моделирования информация даёт возможность исследовать молекулярно-массовые и вязкостные характеристики образующегося продукта сополимеризации в динамике и исследовать композиционную неоднородность при постоянной дозагрузке сырья.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16–31–00162_мол_а «Разработка математических методов исследования структуры и качественных свойств продуктов свободно-радикальной сополимеризации с целью повышения эффективности инновационного производства» и проекта № 2629 «Развитие теории и методов математического моделирования процессов в условиях частичной неопределённости исходной физико-химической и технологической информации», выполняемого в рамках базовой части государственного задания МОиН РФ.

REFERENCES

- 1 Mustafina S., Mikhailova T., Miftakhov E. Mathematical Study of the butadiene-styrene copolymerization product by the Monte-Carlo method. International Journal of Chemical Sciences, 2015, no. 13(2), pp. 849–856.
- 2 Khapre A., Rajavathsavai D., Munshi B. Study on residence time distribution of CSTR using CFD. Indian Journal of Chemical Technology, 2016, no. 23, pp. 114–120.
- 3 Rawlings J.B., Ekerdt J.G. Chemical Reactor Analysis and Design Fundamentals. Madison, Nob Hill Publishing, 2002. 609 p.
- 4 Mikhailova T.A., Miftakhov E.N., Mustafina S.A. Research of butadiene-styrene copolymer synthesis on the basis of Monte Carlo method taking into account the residence-time distribution. *Fundamental'nye issledovaniya* [Fundamental research] 2015, no. 5–3, pp. 517–520. (in Russian).
- 5 Prokopov N.I., Gerval'd A.Yu. Praktikum po discipline «Metody issledovaniya polimerov» [Practical work on the subject «Methods for Polymer Research»]. Moscow, MITKhT, 2013, 150 p. (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Татьяна А. Михайлова аспирант, кафедра математического моделирования, Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, проспект Ленина, 49, г. Стерлитамак, 453103, Россия, Т.А. Mihailova@yandex.ru

Эльдар Н. Мифтахов к. ф.-м. н., доцент, кафедра физики и математики, Губкина, 15, г. Ишимбай, 453213, Россия, promif@mail.ru

Ильдус Ш. Насыров к. х. н., зам. ген. директора по развитию (науке), ОАО «Синтез-Каучук», ул. Техническая, 14, г. Стерлитамак, 453110, Россия, nasyrov.ish@skstr.ru.

Светлана А. Мустафина д. ф.-м. н., профессор, кафедра математического моделирования, Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, проспект Ленина, 49, г. Стерлитамак, 453103, Россия, Mustafina_SA@mail.ru

КРИТЕРИЙ АВТОРСТВА

Татьяна А. Михайлова систематизировала информацию, произвела расчёты, проанализировала данные, написала рукопись и несёт ответственность за плагиат

Эльдар Н. Мифтахов обзор литературных источников по исследуемой проблеме, провёл первичную обработку данных, проанализировал данные

Ильдус Ш. Насыров организовал производственные испытания, консультация в ходе исследования

Светлана А. Мустафина консультация в ходе исследования, предложил схему проведения эксперимента, корректировал рукопись до её подачи в редакцию

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ПОСТУПИЛА 04.04.2016

ПРИНЯТА В ПЕЧАТЬ 16.05.2016

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Tatiana A. Mikhailova graduate student, department of mathematical modeling, Sterlitamak branch of Bashkir State University, Lenin av., 49, Sterlitamak, Russia, T.A. Mihailova@yandex.ru

Eldar N. Miftakhov Ph. D., associate professor, department of physics and mathematics, Ufa State Aviation Technical University, Ishimbay Branch, Gubkina, 15, Ishimbay, Russia, promif@mail.ru

Ildus Sh. Nasyrov Ph. D., deputy CEO for development (science), JSC «Sintez-Kauchuk», Tekhnicheskaya, 14, Sterlitamak, Russia, nasyrov.ish@skstr.ru

Svetlana A. Mustafina D. Sc., professor, department of mathematical modeling, Sterlitamak branch of Bashkir State University, Lenin av., 49, Sterlitamak, Russia, Mustafina_SA@mail.ru

CONTRIBUTION

Tatiana A. Mikhailova codified information, made calculations, analyzed is given in kind, wrote the manuscript and responsible for plagiarism

Eldar N. Miftakhov review of the literature on the researched topic, spent primary processing of data, analyzed data

Ildous S. Nasyrov organized production testing, consultation during the study

Svetlana A. Mustafina consultation during the study, proposed a scheme of the experiment, proofread the manuscript before its submission to the Editor

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare no conflict of interest.

RECEIVED 4.4.2016

ACCEPTED 5.16.2016