Вестник ВГУИТ/ Proceedings of VSUET ISSN 2226-910X E-ISSN 2310-1202
DOI: http://doi.org/10.20914/2310-1202-2025-4-212-218 Оригинальная статья/Research article
УДК 678:51-74 Open Access Available online at vestnik-vsuet.ru

Математическое моделирование процесса получения функционализированных статистических бутадиен-стирольных сополимеров

Сергей Г. Тихомиров [1] tikhomirov_57@mail.ru 0000-0002-8192-0049
Ольга В. Карманова [1] kaf-tospp@vsuet.ru 0000-0003-2226-6582
Алена В. Фирсова [2] firsova_alen@mail.ru 0000-0001-8175-6210
Виталий К. Битюков [1] kaf-ius@vsuet.ru 0000-0003-1439-9318
Игорь А. Хаустов [1] kaf-ius@vsuet.ru 0000-0002-8897-5763

1 Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия
2 Воронежский филиал ФГБУ «НИИСК им. Академика С.В. Лебедева», ул. Менделеева. д. 3б, г. Воронеж, 394014, Россия

Аннотация. В статье рассматриваются подходы к математическому моделированию процесса синтеза бутадиен-стирольных статистических сополимеров (ДССК), полученных растворной полимеризацией в присутствии инициирующей системы «литийалкил-модификатор». Объектом исследования являлся функционализированный статистический бутадиен-стирольный каучук ДССК-2560Ф, полученный сополимеризацией бутадиена-1,3 со стиролом периодическим способом, при этом инициирующий комплекс «*н*-бутиллитий + модификатор» образуется в режиме *in situ* в присутствии мономеров. Процесс синтеза сополимера проводили при постоянной температуре. Конверсию мономеров определяли методом сухого остатка. С учетом того, что статистическое распределение стирола в сополимере определяется соотношением Me/Li в инициирующей системе, разработана кинетическая схема процесса синтеза статистического бутадиен-стирольного каучука. Для предложенной кинетической схемы представлена система бесконечных дифференциальных уравнений. С использованием метода моментов бесконечная система уравнений сведена к конечной. С использованием полученной системы уравнений проведена оценка степени превращения мономеров, значений среднечисленной, среднемассовой молекулярной массы и коэффициента полидисперсности в зависимости от условий синтеза в периодическом процессе. Кинетические параметры модели оценены с использованием процедур нелокальной оптимизации. В результате идентификации параметров математической модели рассчитаны значения констант скоростей элементарных реакций. Получены аналитические зависимости, описывающие влияние температуры полимеризации на степень конверсии и молекулярно-массовые характеристики каучука. Разработанная математическая модель может быть использована в технологии получения растворных бутадиен-стирольных статистических сополимеров, где в качестве инициирующей системы выступают алголят натрия и *н*-бутиллитий. Применение разработанной математической модели позволит установить влияние технологических параметров (температуры, соотношения компонентов инициирующей системы) на молекулярно-массовые характеристики получаемого каучука.

Ключевые слова: сополимеризация, математическая модель, кинетика полимеризации, конверсия, бутадиен-стирольный каучук, модификатор

Mathematical modeling of obtaining functionalized statistical butadiene-styrene copolymers

Sergey G. Tikhomirov [1] tikhomirov_57@mail.ru 0000-0002-8192-0049
Olga V. Karmanova [1] kaf-tospp@vsuet.ru 0000-0003-2226-6582
Alena V. Firsova [2] firsova_alen@mail.ru 0000-0001-8175-6210
Vitaly K. Bityukov [1] kaf-ius@vsuet.ru 0000-0003-1439-9318
Igor A. Khaustov [1] kaf-ius@vsuet.ru 0000-0002-8897-5763

1 1. Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia
2 Voronezh branch of the Research Institute of Building Structures named after Academician S.V. Lebedev, Mendeleyev St., Bldg. 3b, Voronezh, 394014

Abstract. The article considers approaches to mathematical modeling of the synthesis of butadiene-styrene random copolymers (DSSK). These rubbers are obtained by solution polymerization in the presence of an alkyl lithium modifier initiating system. The object of the study was the functionalized random butadiene-styrene rubber DSSK-2560F. The rubber was obtained by copolymerization of butadiene-1,3 with styrene in a periodic manner. The initiating complex (n-butyl lithium + modifier) is formed in situ in the presence of monomers. The synthesis temperature was constant. The conversion of monomers was determined using the dry residue method. It was taken into account that the random distribution of styrene in the copolymer is determined by the Me/Li ratio in the initiating system. A kinetic scheme for the synthesis of random butadiene-styrene rubber has been developed. A system of infinite differential equations is presented for the proposed kinetic scheme. Using the method of moments, an infinite system of equations is reduced to a finite system of equations. The degree of monomer conversion, the values of the number-average and weight-average molecular weight, and the polydispersity coefficient are estimated depending on the synthesis conditions under batch conditions. The kinetic parameters of the model are estimated using nonlocal optimization procedures. The values of the rate constants of elementary reactions are calculated. Analytical dependences of the effect of polymerization temperature on the degree of conversion and molecular weight characteristics of the rubber are obtained. The developed mathematical model can be used in the technology of producing solution-based butadiene-styrene random copolymers, where sodium alcoholate and n-butyl lithium act as the initiating system. Application of the developed mathematical model will allow us to determine the influence of process parameters (temperature, ratio of components of the initiating system) on the molecular weight characteristics of the resulting rubber..

Keywords: copolymerization, mathematical model, polymerization kinetics, conversion, styrene-butadiene rubber, modifier

Для цитирования
Тихомиров С.Г., Карманова О.В., Фирсова А.В., Битюков В.К., Хаустов И.А. Математическое моделирование процесса получения функционализированных статистических бутадиен-стирольных сополимеров // Вестник ВГУИТ. 2025. Т. 87. № 4. С. 212–218. doi:10.20914/2310-1202-2025-4-212-218

For citation
Tikhomirov S.G., Karmanova O.V., Firsova A.V., Bityukov V.K., Khaustov I.A. Mathematical modeling of obtaining functionalized statistical butadiene-styrene copolymers. *Vestnik VGUIT* [Proceedings of VSUET]. 2025. vol. 87. no. 4. pp. 212–218. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2025-4-212-218

©2025, Карманова О.В. и др./ Karmanova O.V. et al.
This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License

Введение

При производстве «зеленых» шин нашли применение бутадиен-стирольные каучуки анионной полимеризации (ДССК), в особенности с функциональными группами в «голове» и «хвосте» полимерной цепи, применение которых обеспечивает получение шин с высоким сцеплением с сухим и мокрым дорожным покрытием, а также с улучшенными показателями устойчивости против заноса без повышения сопротивления качению и снижения износостойкости [1–2].

Согласно последним данным 58% мирового использования ДССК приходится на шинную промышленность, а ужесточение требований к зимним шинам приведет к увеличению использования ДССК еще на 20% [3]. Растущий спрос автомобильного сектора на высокоэффективные шины обусловлен потребностью в снижении сопротивления качению при использовании в протекторных резинах ДССК в сочетании с диоксидом кремния. В этой связи особую актуальность приобретают исследования, направленные на установление оптимального сочетания между основными эксплуатационными характеристиками шин. Например, для снижения сопротивления качению необходимо применение каучуков с высокими показателями эластичности по отскоку, в то же время показатели устойчивости при движении по мокрой дороге, которые являются результатом высокочастотного деформирования скользящей поверхности, определяются гистерезисными свойствами протекторных резин [4–6]. Поэтому в составе протекторных резиновых смесей применяются разные марки каучуков, в том числе ДССК для достижения баланса между такими противоречивыми характеристиками, а также для возможности регулирования молекулярно-массовых характеристик и количества 1,2-звеньев бутадиеновой части сополимера, что влияет на температуру стеклования и степень разветвленности макромолекул. В настоящее время главной задачей является оптимизация этих характеристик с целью улучшения комплекса эксплуатационных свойств протекторных резин на его основе, одним из путей решения которой является функционализация каучука.

Получение функционализированных полимеров возможно с применением аминосодержащих инициаторов, которые образуются в результате взаимодействия *н*-бутиллития и модификатора, содержащего в своем составе >NH группу [7]. Таким образом, часть полимерных цепей содержит в «голове» аминную функциональную группу.

Математическое моделирование процессов полимеризации и сополимеризации играет важную роль в изучении различных аспектов их протекания, а, соответственно, и в оптимизации рассматриваемых процессов. Исследования на основе построения математической модели ориентированы на вычисление характеристик формируемого сополимера и продукта, получаемого на его основе, на поиск режимов оптимизации управления параметрами процесса и анализ их взаимного влияния в условиях промышленного производства [8–10].

Цель исследований – разработка математической модели статистической сополимеризации бутадиена со стиролом в присутствии инициирующей системы «литийалкил-модификатор», позволяющей установить влияние технологических параметров – температуры, соотношения компонентов инициирующей системы – на молекулярно-массовые характеристики получаемого каучука.

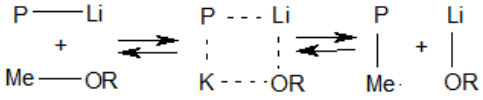
Материалы и методы

Объектом исследования являлся функционализированный статистический бутадиен-стирольный каучук ДССК-2560Ф, полученный сополимеризацией бутадиена-1,3 со стиролом в атмосфере азота в гексановом растворителе. Синтез опытных образцов ДССК2560Ф осуществляли периодическим способом в реакторе емкостью 13 л, снабженном мешалкой, рубашкой для теплоносителя, системой дозирования компонентов и выгрузки полимера. В качестве растворителя использовали Нефрас П1–65/75. В реактор загружали шихту с концентрацией мономеров 13 ± 1%, затем подавали последовательно модификатор и *н*-бутиллитий. Инициирующий комплекс «*н*-бутиллитий + модификатор» образуется в режиме *in situ* в присутствии мономеров. Процесс синтеза сополимера проводили при постоянной температуре. Конверсию мономеров определяли методом сухого остатка.

Результаты и обсуждение

При анионной сополимеризации с использованием литийорганических инициаторов в сочетании с алкоголятами щелочных и щелочноземельных металлов можно получать линейные полимеры с узким ММР и заданной молекулярной массой. Введение модификаторов резко повышает скорость полимеризации бутадиена и стирола, которая зависит от температуры процесса, типа мономера, природы щелочного металла, молярного отношения компонентов инициирующей системы [7, 11]. Алкоголяты металлов (соединения типа R-OMe) при добавлении в небольших количествах к алкиллитию, обеспечивают образование статистического

сополимера, при этом структура бутадиеновой части меняется незначительно [12]. При использовании инициатора, который представляет собой смесь алкиллития и алкоголята щелочного металла, центр роста цепи находится в динамическом таутомерном равновесии с двумя металлами, статистическое распределение стирола в сополимере определяется соотношением Me/Li в инициирующей системе [13]:



где *P* – полимерная цепь, *Me* – катион металла (натрия, кальция), *R* – аллил.

Кинетическую схему процесса можно представить как:

$$
\begin{aligned}
&LiBu + B \xrightarrow{k_1} LiBBu,\\
&LiBBu + MeOR \underset{k_3}{\overset{k_2}{\rightleftarrows}} MeBBu + LiOR,\\
&LiBBu + B \xrightarrow{k_1} LiB_2Bu,\\
&LiBu + B \xrightarrow{k_1} LiBBu,\\
&MeBBu + St \xrightarrow{k_4} MeStBBu,\\
&MeBBu + B \xrightarrow{k_5} MeB_2Bu,
\end{aligned}
\qquad (1)
$$

где *B* – бутадиен, *St* – стирол, *LiBu-н* – бутиллитий.

Предложенной кинетической схеме соответствует бесконечная система дифференциальных уравнений (2). Бесконечную систему дифференциальных уравнений можно свести к конечной (3), используя метод моментов [14].

$$
\begin{aligned}
&\frac{d[LiBu]}{dt} = -k_1[LiBu][B]\\
&\frac{d[B]}{dt} = -k_2[B]\sum_i LiP_i - k_1[B][LiBu] - k_5[B]\sum_i MeP_i\\
&\frac{d[St]}{dt} = -k_4[St]\sum_i MeP_i\\
&\frac{d[LiOR]}{dt} = k_2[MeOR]\sum_i LiP_i - k_3[LiOR]\sum_i MeP_i\\
&\frac{d[MeOR]}{dt} = -k_2[MeOR]\sum_i LiP_i + k_3[LiOR]\sum_i MeP_i\\
&\frac{d[LiP_1]}{dt} = -k_2[MeOR][LiP_1] + k_3[LiOR][MeP_1] -\\
&-k_1[B][LiP_1] + k_1[LiBu][B]\\
&\frac{d[LiP_2]}{dt} = -k_2[MeOR][LiP_2] + k_3[LiOR][MeP_2] -\\
&-k_1[B][LiP_2] + k_1[LiP_1][B]\\
&\frac{d[LiP_n]}{dt} = -k_2[K = MeOR][LiP_n] + k_3[LiOR][MeP_n] -\\
&-k_1[B][LiP_n] + k_3[B][LiP_{n-1}]\\
&\frac{d[MeP_1]}{dt} = k_2[LiP_1][MeOR] - k_3[LiOR][MeP_1] -\\
&-k_4[St][MeP_1] - k_5[B][MeP_1]\\
&\frac{d[MeP_2]}{dt} = k_2[LiP_2][MeOR] - k_3[LiOR][MeP_2] -\\
&-k_4[St][MeP_2] - k_5[B][MeP_2] + k_4[St][MeP_1] +\\
&+k_5[B][MeP_1]\frac{d[MeP_n]}{dt} = k_2[LiP_n][MeOR] -\\
&-k_3[LiOR][MeP_n] - k_4[St][MeP_n] - k_5[B][MeP_n] +\\
&+k_4[St][MeP_{n-1}] + k_5[B][KMe]
\end{aligned}
\qquad (2)
$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{d\mu_1^0}{dt} = -k_2[NaOR]\mu_1^0 + K_3[LiOR]\mu_2^0\\
&\frac{d\mu_2^0}{dt} = k_2[NaOR]\mu_1^0 - k_3[LiOR]\mu_2^0\\
&\frac{d\mu_1^1}{dt} = -k_2[NaOR]\mu_1^1 + k_3[LiOR]\mu_2^1 + k_1[B]\mu_1^0\\
&\frac{d\mu_2^1}{dt} = k_2[NaOR]\mu_2^1 - k_3[LiOR]\mu_2^1 +\\
&+k_4[St]\mu_2^0 + k_5[B]\mu_2^0\\
&\frac{d\mu_1^2}{dt} = -k_2[NaOR]\mu_1^2 + k_3[LiOR]\mu_2^2 +\\
&+k_1[B]\left(2\mu_1^1 + \mu_1^0\right)\\
&\frac{d\mu_2^2}{dt} = k_2[NaOR]\mu_1^2 - k_3[LiOR]\mu_2^2 +\\
&+k_4[St]\left(2\mu_2^1 + \mu_2^0\right) + k_5[B]\left(2\mu_2^1 + \mu_2^0\right)
\end{aligned}
\qquad (3)
$$

Начальные условия определены как:

$$
\begin{aligned}
&\mu_1^0 = [LiBu]\\
&\mu_2^0 = \mu_2^1 = \mu_2^2 = \mu_1^1 = 0
\end{aligned}
\qquad (4)
$$

где $\mu_1^j = \sum_k k^j LiP_k$ и $\mu_2^j = \sum_k k^j NaP_k$

В результате получена система (3), состоящая из шести дифференциальных уравнений с пятью неизвестными константами k_i, i = 1,5. С использованием полученной системы уравнений можно оценивать степень превращения мономеров (*x*) и значения среднечисленной (P_n), среднемассовой (P_W) степени полимеризации и коэффициента полидисперсности (K_n) в зависимости от условий синтеза в периодическом процессе:

$$
x = \frac{[B]_0 + [St]_0 - [St][B]}{[B]_0 + [St]_0} \qquad (5)
$$

$$P_n = \frac{[B]_0 + [St]_0 - [B] - [St]}{[LiBu]_n} \quad (6)$$

$$P_w = \frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{\mu_1^1 + \mu_2^1} = \frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{[B]_0 + [St]_0 - [B] - [St]} \quad (7)$$

$$K_n = \frac{M_w}{M_n} \quad (8)$$

Параметрическая идентификация модели сводилась к оценке значений 5 констант. Устанавливали зависимость суммарной степени превращения бутадиена и стирола от времени полимеризации при известных значениях концентрации мономеров и инициатора (*LiBu* и *MeOR*).

Кинетические параметры оценивали с использованием процедур нелокальной оптимизации [14]. В качестве критерия минимизации использован модульный критерий:

$$\sum_{i=1}^{n} \left| x_i^{эксп} - x_i^{расч} \right| \to min$$

где n – количество экспериментальных точек.

В результате идентификации математической модели получены следующие значения параметров (константы скоростей элементарных реакций), представленные в таблице 1.

Таблица 1.

Значения констант скоростей элементарных реакций (дм^3/ моль ·мин)

Table 1.

Rate constants of elementary reactions (dm^3/mol×min)

T, K	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5
313	24,07	226,14	240,32	552,53	1,78
333	360,92	291,52	480,92	3358,54	8,24

Константы скоростей элементарных реакций описываются согласно закону Аррениуса:

$$K_j = K_0 j e^{-\left(Ej/RT\right)} \quad (9)$$

где K_{0j} – предэкспонента; E_j – энергия активации реакции; R – универсальная газовая постоянная.

Получены следующие значения: E_1 =115,28 кДж/моль; E_2 = 109,82 кДж/моль; E_3 = 32,18 кДж/моль; E_4 = 72,22 кДж/моль; E_5 = 65,36 кДж/моль.

Применимость полученной математической модели оценивалась путем сравнения экспериментальных данных конверсии с соответствующими характеристиками, полученными по модели.

На рисунках 1–2 представлены экспериментальные данные и результаты вычислительного эксперимента по модели для следующего набора исходных данных: температура синтеза T = 313 K; концентрация стирола $[St]_0$ = 0,41 моль/дм^3 концентрация бутадиена $[B]_0$ = 0,95 моль/дм^3; концентрация *н*-бутиллилия $[LiBu]_0$ = 1,37×10^{-3} моль/дм^3; концентрация модификатора $[NaOR]_0$ = =8,55×10^{-5} моль/дм^3; сухой остаток G_0 = 15,3% мас.

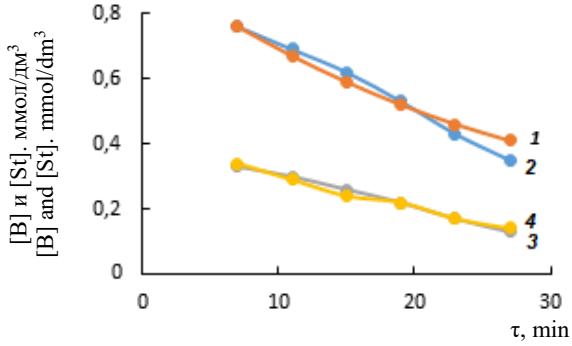


Рисунок 1. Кинетика сополимеризации бутадиена со стиролом и результаты вычислительного эксперимента по модели синтеза ДССК-2560Ф: *1, 2*- изменение концентрации бутадиена [B] от времени τ; *3, 4* – изменение концентрации стирола [St] от времени τ; *1, 3* – расчет; *2, 4* – эксперимент

Figure 1. Kinetics of copolymerization of butadiene with styrene and results of computational experiment using the model: *1, 2* – change in butadiene concentration [B] over time τ; *3, 4* – change in styrene concentration [St] over time τ; *1, 3* – calculation; *2, 4* – experiment

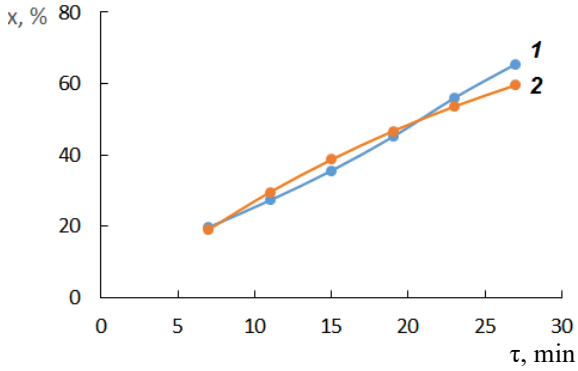


Рисунок 2. Зависимости изменения конверсии (x) от времени синтеза (τ) каучука ДССК-2560Ф: *1* – эксперимент; 2 – расчет

Figure 2. Dependences of the change in conversion (x) on the synthesis time (τ) of rubber DSSK-2560F: 1 – experiment; 2 – calculation

Средняя ошибка отклонения расчетных значений степени превращения мономеров от экспериментальных соответствует 5% отн., что с одной стороны не превышает точности измерения данной величины, а с другой – это отклонение обусловлено нарушением изотермичности процесса и наличием неконтролируемых возмущений, воздействующих на процесс.

Результаты исследования влияния температуры полимеризации на кинетику процесса и параметры молекулярно-массового распределения (*P*n, *P*w, *K*r) представлены в таблице 2.

Таблица 2.

Влияние температуры полимеризации на степень конверсии и молекулярные параметры каучука ДССК-2560Ф

Table 2.

The influence of polymerization temperature on the degree of conversion and molecular parameters of rubber DSSK-2560F

T, K	τ	x, %	$P_n \times 10^{-3}$	$P_w \times 10^{-3}$	K_n
313	100	50	1,7	2,9	1,7
323	100	88	2,9	3,8	1,3
333	47	100	3,3	4,4	1,3
343	13	100	3,3	5,2	1,6
353	10	100	3,3	6,2	1,9

Полученные данные свидетельствуют о том, что с ростом температуры наблюдается существенное повышение скорости процесса и выравнивание скоростей расходования бутадиена и стирола. Оптимальной температурой с точки зрения одновременного исчерпания бутадиена и стирола является температура 343 К. Одновременно с ростом температур происходит возрастание среднемассовой и среднечисленной степеней полимеризации, коэффициент же полидисперсности в диапазоне температуры [313÷333 К] падает, а затем возрастает в диапазоне [313÷333 К].

Заключение

Разработана математическая модель сополимеризации бутадиена со стиролом в присутствии инициирующей системы «*н*-бутиллитий + модификатор» при получении каучука ДССК-2560Ф. Кинетические параметры системы оценены с использованием процедур нелокальной оптимизации, преобразование бесконечной системы дифференциальных уравнений осуществлено с использованием метода моментов.

Разработанная модель может быть использована для имитационного моделирования с выбором оптимальных параметров процесса в технологии получения растворных бутадиен-стирольных статистических сополимеров, где в качестве инициирующей системы выступают алголят натрия и *н*-бутиллитий.

Литература

1 Куперман Ф.Е. Новые каучуки для шин. М.: Альянс Пресс, 2005. 329 с.

2 Бакфиш К., Хайнц Д. Новая книга о шинах. Справочное издание. М.: Издательство Астрель, 2003. 303 с.

3 Solution Styrene Butadiene Rubber Market Size, Share, Growth, and Industry Analysis, By Type (Oil-filled, Non-oil Filled), By Application (Tires, Footwear, Polymer Modification, Adhesives & Sealants, Others), Regional Insights and Forecast to 2037. URL: https://www.industryresearch.biz/enquiry/request-sample/100788 (дата обращения: 06.03.2025).

4 Ansari A., Mohanty T.R., Ramakrishnan S. et al. Design of Silyl Functionalized Emulsion SBR and its Application in Green Tire // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2025. V. 64. № 7. P. 3795–3809.

5 Кротова О.А., Белоблоцкая Н.Г. Упруго-гистерезисные свойства протекторных резин с кремнекислотными наполнителями // Китайско-российский конкурс инноваций и предпринимательства-2020, Юго-Западный регион: сб. материалов. 2021. С. 121.

6 Карманова О.В., Шутилин Ю.Ф. Вулканизирующие системы в рецептуре резин на основе смесей каучуков // Инженерные технологии. 2024. С. 71.

7 Бердников В.В., Карманова О.В., Фирсова А.В. Исследование свойств модифицированных бутадиен-стирольных каучуков для шинной промышленности // Технология органических веществ: мат. 89-й науч.-техн. конф. профес.-препод. состава, науч. сотрудников и аспирантов (с междунар. участием), Минск, 3-18 февраля 2025 г. Минск: БГТУ, 2025. С. 146–148.

8 Михайлова Т.А., Мустафина С.А. Компьютерное моделирование процесса синтеза бутадиен-стирольного каучука: влияние подачи регулятора на характеристики продукта // Тонкие химические технологии. 2024. Т. 19. № 6. С. 555–564.

9 Schmid F. Understanding and modeling polymers: The challenge of multiple scales // ACS Polymers Au. 2022. V. 3. № 1. P. 28–58.

10 Мифтахов Э.Н., Михайлова Т.А., Мустафина С.А. Моделирование процессов синтеза полимеров с целью оценки молекулярно-массового распределения // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2024. № 5 (116). С. 110–126.

11 Федосеев М.С., Державинская Л.Ф. Теплостойкие полимеры и композиты на основе эпоксидных связующих различной химической природы // Вестник Пермского ФИЦ. 2022. № 2. С. 17–26.

12 Сарасеко Е.Г. Краткий справочник по основным понятиям органической и специальной химии // Инновационное развитие науки: фундаментальные и прикладные проблемы. 2020. С. 287–356.

13 Долгоплоск Б.А., Тинякова Е.И. Металлоорганический катализ в процессах полимеризации. М.: Наука, 1982. 511 с.

14 Кафаров В.В., Ветохин В.Н., Тихомиров С.Г. Моделирование кинетики процесса полимеризации полиизопренового каучука // Доклады Академии наук СССР. 1989. Т. 305. № 6. С. 1425–1429.

15 Мифтахов Э.Н., Кубряк А.И., Мустафина С.А. и др. Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров методами математического моделирования // Материалы докладов XXVIII науч.-практ. конф. «Резиновая промышленность: сырье, материалы, технологии». Москва, 2023. С. 35–37.

16 Kashnikova A., Miftakhov E., Ivanov D. Modeling and Optimization of Butadiene–Styrene Copolymerization Using a Kinetic Approach and a Genetic Algorithm // 2025 7th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA). IEEE, 2025. P. 112–116.

17 Bronskaya V., Smirnova L., Matyukhina A. et al. Copolymerization of butadiene and styrene under the influence of N-butyllithium // Arabian Journal of Chemistry. 2023. V. 16. № 11. P. 105205.

18 Datta S., Kao N., Bhaskar T. et al. Mathematical function using mechanical properties to calculate chain scission as a function of radiation dose in electron beam treated styrene-butadiene-styrene block copolymer // Express Polymer Letters. 2024. V. 18. № 9. doi: 10.3144/expresspolymlett.2024.68

19 Rentería-Baltiérrez F.Y., Reyes-Melo M.E., Martínez-González C.L. et al. Effect of 3D Printing Parameters on the Viscoelastic Behavior of Acrylonitrile Butadiene Styrene: Fractional Calculus Modeling and Statistical Optimization // Polymers. 2025. V. 17. № 12. P. 1650. doi: 10.3390/polym17121650

20 Miftakhov E., Mustafina S., Akimov A. Application of Heuristic Methods for Polymer Synthesis Process Optimization // Journal of Engineering. 2024. V. 2024. № 1. P. 5900477. doi: 10.28991/ESJ-2024-08-06-023

21 Pianese G., Milani G., Milani F. Kinetic mathematical model with induction and reversion for the vulcanization of natural rubber and ethylene propylene diene monomer blend // Polymer Testing. 2024. V. 131. P. 108339. doi: 10.1016/j.polymertesting.2024.108339

22 Rodriguez-Guadarrama L. Modeling of batch production of high vinyl styrene/butadiene copolymers for high performance tires // Journal of Applied Polymer Science. 2020. V. 137. № 45. P. 49415. doi: 10.1002/app.49415

23 Wang Y., Li R., Qiao J. Study on the diffusion behaviour of styrene-butadiene rubber modifier and asphalt components based on molecular dynamics simulation // Road Materials and Pavement Design. 2024. V. 25. № 10. P. 2225–2241. doi: 10.1080/14680629.2024.2302806

References

1 Kuperman F.E. New Rubbers for Tires. Moscow: Al'yans Press, 2005. 329 p. (in Russian).

2 Bakfish K., Hajnc D. New Book about Tires. Reference Edition. Moscow: Izdatel'stvo Astrel', 2003. 303 p. (in Russian).

3 Solution Styrene Butadiene Rubber Market Size, Share, Growth, and Industry Analysis, By Type (Oil-filled, Non-oil Filled), By Application (Tires, Footwear, Polymer Modification, Adhesives & Sealants, Others), Regional Insights and Forecast to 2037. Available at: https://www.industryresearch.biz/enquiry/request-sample/100788 (accessed: 06.03.2025).

4 Ansari A., Mohanty T.R., Ramakrishnan S. et al. Design of Silyl Functionalized Emulsion SBR and its Application in Green Tire. Industrial & Engineering Chemistry Research. 2025. vol. 64. no. 7. pp. 3795–3809.

5 Krotova O.A., Beloblotskaya N.G. Elastic-Hysteresis Properties of Tread Rubbers with Silica Fillers. In: Sino-Russian Innovation and Entrepreneurship Competition-2020, Southwest Region: Collection of Materials. 2021. p. 121. (in Russian).

6 Karmanova O.V., Shutilin Yu.F. Vulcanizing Systems in Rubber Formulations Based on Rubber Blends. Engineering Technologies. 2024. p. 71. (in Russian).

7 Berdnikov V.V., Karmanova O.V., Firsova A.V. Investigation of the Properties of Modified Styrene-Butadiene Rubbers for the Tire Industry. In: Technology of Organic Substances: Proceedings of the 89th Scientific and Technical Conference of Faculty, Researchers, and Postgraduates (with international participation), Minsk, February 3–18, 2025. Minsk: BSTU, 2025. pp. 146–148. (in Russian).

8 Mikhailova T.A., Mustafina S.A. Computer Modeling of the Styrene-Butadiene Rubber Synthesis Process: The Effect of Regulator Feed on Product Characteristics. Fine Chemical Technologies. 2024. vol. 19. no. 6. pp. 555–564. (in Russian).

9 Schmid F. Understanding and modeling polymers: The challenge of multiple scales. ACS Polymers Au. 2022. vol. 3. no. 1. pp. 28–58.

10 Miftakhov E.N., Mikhailova T.A., Mustafina S.A. Modeling of Polymer Synthesis Processes to Assess Molecular Weight Distribution. Bulletin of the Bauman Moscow State Technical University. Series: Natural Sciences. 2024. no. 5 (116). pp. 110–126. (in Russian).

11 Fedoseev M.S., Derzhavinskaya L.F. Heat-Resistant Polymers and Composites Based on Epoxy Binders of Various Chemical Nature. Bulletin of the Perm Federal Research Center. 2022. no. 2. pp. 17–26. (in Russian).

12 Saraseko E.G. Brief Guide to Basic Concepts of Organic and Special Chemistry. In: Innovative Development of Science: Fundamental and Applied Problems. 2020. pp. 287–356. (in Russian).

13 Dolgoplosk B.A., Tinyakova E.I. Organometallic Catalysis in Polymerization Processes. Moscow: Nauka, 1982. 511 p. (in Russian).

14 Kafarov V.V., Vetokhin V.N., Tikhomirov S.G. Modeling the Kinetics of Polyisoprene Rubber Polymerization Process. Proceedings of the USSR Academy of Sciences. 1989. vol. 305. no. 6. pp. 1425–1429. (in Russian).

15 Miftakhov E.N., Kubryak A.I., Mustafina S.A. et al. Study of Physicochemical Regularities of Polymer Synthesis Processes by Mathematical Modeling Methods. In: Materials of the XXVIII Scientific and Practical Conference "Rubber Industry: Raw Materials, Materials, Technologies". Moscow, 2023. pp. 35–37. (in Russian).

16 Kashnikova A., Miftakhov E., Ivanov D. Modeling and Optimization of Butadiene–Styrene Copolymerization Using a Kinetic Approach and a Genetic Algorithm. In: 2025 7th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA). IEEE, 2025. pp. 112–116.

17 Bronskaya V., Smirnova L., Matyukhina A. et al. Copolymerization of butadiene and styrene under the influence of N-butyllithium. Arabian Journal of Chemistry. 2023. vol. 16. no. 11. article 105205.

18 Datta S., Kao N., Bhaskar T. et al. Mathematical function using mechanical properties to calculate chain scission as a function of radiation dose in electron beam treated styrene-butadiene-styrene block copolymer. Express Polymer Letters. 2024. vol. 18. no. 9. [Online first]. doi: 10.3144/expresspolymlett.2024.68.

19 Rentería-Baltiérrez F.Y., Reyes-Melo M.E., Martínez-González C.L. et al. Effect of 3D Printing Parameters on the Viscoelastic Behavior of Acrylonitrile Butadiene Styrene: Fractional Calculus Modeling and Statistical Optimization. Polymers. 2025. vol. 17. no. 12. article 1650. doi: 10.3390/polym17121650.

20 Miftakhov E., Mustafina S., Akimov A. Application of Heuristic Methods for Polymer Synthesis Process Optimization. Journal of Engineering. 2024. vol. 2024. no. 1. article 5900477. doi: 10.28991/ESJ-2024-08-06-023.

21 Pianese G., Milani G., Milani F. Kinetic mathematical model with induction and reversion for the vulcanization of natural rubber and ethylene propylene diene monomer blend. Polymer Testing. 2024. vol. 131. article 108339. doi: 10.1016/j.polymertesting.2024.108339.

22 Rodriguez-Guadarrama L. Modeling of batch production of high vinyl styrene/butadiene copolymers for high performance tires. Journal of Applied Polymer Science. 2020. vol. 137. no. 45. article 49415. doi: 10.1002/app.49415.

23 Wang Y., Li R., Qiao J. Study on the diffusion behaviour of styrene-butadiene rubber modifier and asphalt components based on molecular dynamics simulation. Road Materials and Pavement Design. 2024. vol. 25. no. 10. pp. 2225–2241. doi: 10.1080/14680629.2024.2302806.

Сведения об авторах

Сергей Г. Тихомиров д.т.н., профессор, кафедра информационных и управляющих систем, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, tikhomirov_57@mail.ru
https://orcid.org/0000-0002-8192-0049

Ольга В. Карманова д.т.н., заведующий кафедрой, кафедра технологии органических соединений, переработки полимеров, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, kaf-tospp@vsuet.ru
https://orcid.org/0000-0003-2226-6582

Алена В. Фирсова к.т.н., заведующий лабораторией, лаборатория растворной полимеризации, Воронежский филиал НИИСК им. Академика С.В. Лебедева», ул. Менделеева, 3б, 394014 г. Воронеж, Россия, firsova_alen@mail.ru
https://orcid.org/0000-0001-8175-6210

Виталий К. Битюков д.т.н., профессор, кафедра профессор, кафедра информационных и управляющих систем, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, kaf-ius@vsuet.ru
https://orcid.org/ 0000-0003-1439-9318

Игорь А. Хаустов д.т.н., заведующий кафедрой, кафедра информационных и управляющих систем, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, kaf-ius@vsuet.ru
https://orcid.org/0000-0002-8897-5763

Вклад авторов

Все авторы в равной степени принимали участие в написании рукописи и несут ответственность за плагиат

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Information about authors

Sergey G. Tikhomirov Dr. Sci. (Engin.), professor, information and control systems department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, tikhomirov_57@mail.ru
https://orcid.org/0000-0002-8192-0049

Olga V. Karmanova Dr. Sci. (Engin.), head of department, technology of organic compounds and processings of polymers department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, kaf-tospp@vsuet.ru
https://orcid.org/0000-0003-2226-6582

Alena V. Firsova Cand. Sci. (Engin.), head of the laboratory, solution polymerization laboratory Voronezh branch of the Institute named after Academician S.V. Lebedev, Revolution Av., 19 Voronezh, 394014, Russia, firsova_alen@mail.ru
https://orcid.org/0000-0001-8175-6210

Vitaly K. Bityukov Dr. Sci. (Engin.), professor, information and control systems department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, kaf-ius@vsuet.ru
https://orcid.org/ 0000-0003-1439-9318

Igor A. Khaustov Dr. Sci. (Engin.), head of department, information and control systems department, Voronezh state university of engineering technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia,kaf-ius@vsuet.ru
https://orcid.org/0000-0002-8897-5763

Contribution

All authors are equally involved in the writing of the manuscript and are responsible for plagiarism

Conflict of interest

The authors declare no conflict of interest.

Поступила 03/11/2025	**После редакции** 17/11/2025	**Принята в печать** 08/12/2025

Received 03/11/2025	**Accepted in revised** 17/11/2025	**Accepted** 08/12/2025