

Э. Р. Гиззатова, С. И. Спивак (Стерлитамак, БашГУ). Численное моделирование решения прямой кинетической задачи для процесса полимеризации диенов на неодимсодержащих катализаторах.

В работах последних лет, посвященных исследованию механизмов полимеризации на ионно-координационных катализаторах, было показано [1], что присущее им свойство полицентровости влияет на кинетическую активность системы и ведет к изменению ряда экспериментально получаемых значений, в том числе средних молекулярных масс и кривой молекулярно-массового распределения. Задача прогнозирования поведения этих параметров может быть решена путем численного моделирования решения прямой кинетической задачи. Целью работы является создание программы, реализующей алгоритм решения прямой кинетической задачи для процесса полимеризации диенов на неодимсодержащей каталитической системе:

$P_i^j + M \xrightarrow{k_p^j} P_{i+1}^j$ — рост цепи; $P_i^j + M \xrightarrow{k_m^j} Q_i + P_1^j$ — передача цепи на мономер; $P_i^j + A \xrightarrow{k_{Al}^j} Q_i + P_1^j$ — передача цепи на алюминийорганическое соединение (АОС); здесь j — номер типа активного центра (АЦ), ведущего полимеризацию, P_i^j — концентрация активных полимерных цепей с i звеньями на j -м типе АЦ, Q_i — концентрация неактивных полимерных цепей с i звеньями, M и A — концентрации мономера и АОС.

Математическая модель представляет собой систему из бесконечного числа дифференциальных уравнений, каждое из которых характеризует скорость изменения концентрации отдельно взятого реагента во времени. Прямая кинетическая задача заключается в ее решении, т. е. в нахождении функций распределения концентраций реакционных компонентов.

Ранее было получено численное решение прямой кинетической задачи с использованием метода Рунге–Кутты 4-го порядка [2]. Однако наряду с простотой и доступностью этого метода его недостатком является большой объем вычислений и, следовательно, увеличение затрат машинного времени. В связи с этим возникла необходимость модернизации имеющегося алгоритма. В него были добавлены два блока: 1) условие на автоматическое изменение шага; 2) количество одновременно решаемых дифференциальных уравнений в системе кратно текущему времени полимеризации. Это позволяет значительно увеличить скорость расчета и сократить время, затрачиваемое на расчет реагентов с заведомо «нулевыми» концентрациями.

Таким образом, в докладе предложен алгоритм численного решения прямой кинетической задачи и на его основе составлено программное обеспечение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Монаков Ю. Б., Сабиров З. М., Марина Н. Г. — Высокомолек. соед., сер. А, 1996, т. 38, № 3, с. 407–417.
2. Максютова Э. Р. Дисс. на соискание ученой степени к.ф.-м.н. Уфа, 2003, 113 с.