

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Казанский государственный технологический университет

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИОННЫХ
ПРОЦЕССОВ**

Учебное пособие

Казань
КГТУ
2007

УДК 519.8: 678

ББК 32.81 И 43

Авторский коллектив: проф. Г.А. Аминова
проф. Г.С. Дьяконов
доц. Г.В. Мануйко
доц. А.И. Исмагилова

доц. Т.В. Игнашина
доц. В.В. Бронская
асп. Д.В. Башкиров

Математическое моделирование полимеризационных процессов. Учебное пособие / Г.А. Аминова, Г.С. Дьяконов, Г.В. Мануйко, А.И. Исмагилова, Т.В. Игнашина, В.В. Бронская, Д.В. Башкиров. – Казань: Изд-во Казан. гос. технол. ун-та, 2007. – 92 с.

ISBN 978-5-7882-0445-1

Пособие посвящено математическому моделированию полимеризационных процессов. Рассмотрены основы химической кинетики и термодинамики, необходимые для построения математических моделей полимеризационных процессов, предлагается практическое применение рассмотренной теории для моделирования гомогенного катализа. В качестве примеров выбраны процессы живой и радикальной полимеризации, отличающиеся сложностью и многообразием аппаратного оформления.

Предназначено для магистров по программам 240100-13 «Технология синтетического каучука» и 240100-38 «Каталитические технологии в полимерной химии», изучающих дисциплину «Математическое моделирование полимеризационных процессов».

Подготовлено на кафедре «Процессы и аппараты химической технологии».

Печатается по решению редакционно-издательского совета Казанского государственного технологического университета

Рецензенты: д-р техн. наук, проф. Г.Ю. Даутов
д-р техн. наук, проф. Р.И. Ибятков

© Казан. гос. технол. ун-т, 2007.

© Аминова Г.А. , Дьяконов Г.С., Мануйко Г.В. , Исмагилова А.И. , Игнашина Т.В. , Бронская В.В. , Башкиров Д.В.

Оглавление

Предисловие	6
Введение	8
1. Основы моделирования	12
1.1. Математическое моделирование	14
1.2. Основные особенности полимеризационных процессов	18
1.3. Математическое моделирование полимеризационных процессов ...	25
1.4. Методы моделирования и расчета полимеризационных процессов ..	28
1.4.1. Эмпирические методы расчета реакторов-полимеризаторов.....	28
1.4.2. Статистические методы расчета молекулярных распределений полимеров.....	30
1.4.3. Кинетические методы моделирования	31
2. Моделирование кинетики химических реакций	34
2.1. Определение механизмов реакций	36
2.2. Кинетическое уравнение	38
2.3. Порядок реакции	41
2.4. Константа скорости	42
2.5. Определение порядка реакции и константы скорости	43
2.6. Интегральное кинетическое уравнение первого порядка	45
2.7. Определение константы скорости реакции первого порядка	46
2.8. Интегральное кинетическое уравнение простой реакции второго порядка	47
2.9. Интегральное кинетическое уравнение двух параллельных реакций первого порядка	50

2.10. Интегральные кинетические уравнения последовательных реакций	52
2.11. Интегральное кинетическое уравнение третьего порядка	56
2.12. Интегральное кинетическое уравнение обратимой реакции первого порядка	57
2.13. Интегральное кинетическое уравнение обратимой реакции второго порядка	59
2.14. Интегральное кинетическое уравнение обратимой реакции смешанного (первого и второго) порядка	60
2.15. Интегральное кинетическое уравнение последовательности двух реакций первого порядка с обратимой первой стадией обратимой реакции второго порядка.....	62
2.16. Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса	63
2.17. Энергия активации	65
2.18. Определение энергии активации	66
3. Моделирование основных промышленных процессов синтеза полимеров..	67
3.1. Моделирование гомогенно-каталитических реакций	68
3.2. Моделирование гомогенной каталитической реакции первого порядка	71
3.3. Моделирование процесса радикальной полимеризации	71
3.4. Расчет молекулярно-массового распределения по кинетическим данным	79
3.5. Моделирование «живущей» полимеризации с мгновенным иницированием на основе метода непосредственного интегрирования кинетической схемы	83
3.6. Моделирование радикальной полимеризации с термическим	

инициированием, с передачей цепи на мономер и рекомбинационным обрывом цепи на основе метода производящей функции и z- преобразования	85
Заключение	89
Вопросы для самоконтроля	90
Библиографический список	92