



Оценка эффективности влияния трубчатого турбулентного аппарата на кинетику процессов получения полимеров

Э. Н. Мифтахов¹✉, С. И. Мустафина¹, Н. Д. Морозкин¹,
И. Ш. Насыров², С. А. Мустафина¹

¹ Уфимский университет науки и технологий
(г. Уфа, Российская Федерация)

² Акционерное общество «Синтез-Каучук»
(г. Стерлитамак, Российская Федерация)

✉ promif@mail.ru

Аннотация

Введение. В условиях высокого спроса на полимерную продукцию ведется постоянная модернизация технологических процессов ее производства, огромная доля которого основана на применении микрогетерогенных каталитических систем. Физико-химические свойства полимерной продукции можно улучшить с помощью целенаправленного гидродинамического воздействия в турбулентных потоках. Исследование возникающих физико-химических закономерностей процессов синтеза полимерной продукции в присутствии модифицированных каталитических систем вызывает большой интерес.

Цель статьи. Оценка эффективности гидродинамического воздействия в турбулентных потоках на характер неоднородности катализатора и кинетику процессов получения полимеров.

Материалы и методы. При исследовании процессов синтеза полимеров использован имитационный подход к модельному описанию системы, основанный на идее воспроизведения различных сценариев непрерывного производства и проведении необходимой эмпирической оценки. Для повышения скорости расчетов при имитационном моделировании используются технологии параллельного программирования и облачных вычислений.

Результаты исследования. Разработана методология решения обратных задач, которая позволяет на основе известной физико-химической информации определять влияние внешних факторов на кинетическую активность и неоднородность активных центров. Использование имитационного моделирования с применением технологии облачных вычислений позволяет однозначно идентифицировать характер кинетической неоднородности в условиях усреднения реакционной способности активных центров.

Обсуждение и заключение. Апробация нового имитационного подхода к решению обратной задачи позволила оценить эффективность влияния трубчатого турбулентного аппарата на кинетику процесса получения полиизопрена в присутствии титанового катализатора и идентифицировать наличие двух активных центров: тип $A_{Ti} - \ln M = 13,4$, тип $B_{Ti} - \ln M = 11,7$, при этом доля активных центров типа A_{Ti} составляет 0,91; типа $B_{Ti} - 0,09$. На основе полученных данных становится возможным проводить постановку и решение обратных задач идентификации кинетических параметров с целью дальнейшего модельного описания системы.

© Мифтахов Э. Н., Мустафина С. И., Морозкин Н. Д., Насыров И. Ш., Мустафина С. А., 2023



Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License.
This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.



Ключевые слова: синтетический каучук, полимер, трубчатый турбулентный аппарат, гидродинамическое воздействие, математическое моделирование

Благодарности: исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2023-0002).

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Для цитирования: Оценка эффективности влияния трубчатого турбулентного аппарата на кинетику процессов получения полимеров / Э. Н. Мифтахов [и др.] // Инженерные технологии и системы. 2023. Т. 33, № 3. С. 388–402. <https://doi.org/10.15507/2658-4123.033.202303.388-402>

Original article

Evaluating the Efficiency of the Tube Turbulent Apparatus Influence on Kinetics of Polymer Production Processes

E. N. Miftakhov^a✉, S. I. Mustafina^a, N. D. Morozkin^a,
I. Sh. Nasyrov^b, S. A. Mustafina^a

^a Ufa University of Science and Technology (Ufa, Russian Federation)

^b Join Stock Company Sintez Rubber

(Sterlitamak, Russian Federation)

✉ promif@mail.ru

Abstract

Introduction. Because of high demand for polymer products, there are constantly modernized the technological aspects of their production, a huge share of which is based on the use of microheterogeneous catalytic systems. Physicochemical properties of polymer products can be improved through targeted hydrodynamic effect in turbulent flows. The study of physicochemical patterns of polymer product synthesis in the presence of modified catalytic systems is of great interest.

Aim of the Article. The article is aimed at evaluating the efficiency of hydrodynamic influence in turbulent flows on the type of catalyst heterogeneity and the kinetics of polymer production processes.

Materials and Methods. In the study of polymer synthesis processes, there is used a simulation approach to the system model description that is based on the idea of reproducing various scenarios of uninterrupted production and conducting the necessary empirical analysis. Parallel programming and cloud computing technologies are used in simulation modeling to increase computational speed.

Results. A methodology for solving inverse problems has been developed to determine the influence of external factors on the kinetic activity and heterogeneity of active centers on the basis of known physicochemical information. The use of simulation modeling with the application of cloud computing technology makes it possible to unambiguously determine the type of kinetic heterogeneity in the conditions of averaging the reactive capacity of active centers.

Discussion and Conclusion. Approbation of the new simulation approach to the solution of the inverse problem allowed evaluating the efficiency of the influence of the tube turbulent apparatus on the kinetics of producing polyisoprene in the presence of titanium catalyst and identifying the presence of two active centers: type A_{Ti} – $\ln M = 13.4$, type B_{Ti} – $\ln M = 11.7$, while the proportion of active centers type A_{Ti} is 0.91; type B_{Ti} – 0.09. Based on the data obtained, it becomes possible to formulate and solve inverse problems of identifying kinetic parameters for further model description of the system.

Keywords: synthetic rubber, polymer, tube turbulent apparatus, hydrodynamic action, mathematical modeling

Acknowledgments: This research was funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (scientific code FZWU-2023-0002).

Conflict of interest: The authors declare no conflict of interest.

For citation: Miftakhov E.N., Mustafina S.I., Morozkin N.D., Nasyrov I.Sh., Mustafina S.A. Evaluating the Efficiency of the Tube Turbulent Apparatus Influence on Kinetics of Polymer Production Processes. *Engineering Technologies and Systems*. 2023;33(3):388–402. <https://doi.org/10.15507/2658-4123.033.202303.388-402>

Введение

В условиях модернизации существующих циклов непрерывного производства ведутся активные исследования, позволяющие изменить активность применяемых катализаторов и оказать значимое влияние на свойства получаемой продукции. Ключевой особенностью микрогетерогенных каталитических систем является получение продукта с достаточно высоким значением полидисперсности, что является следствием наличия в системе различных типов активных центров, способных проявлять различную реакционную способность и стереоспецифичность [1]. С целью воздействия на кинетическую неоднородность применяются различные подходы, к которым можно отнести как изменение химического состава катализатора [2], так и изменение гидродинамического режима [3] в зоне реакции.

Проведенные экспериментальные исследования [4; 5] демонстрируют огромный эффект, который возникает после гидродинамического воздействия с использованием трубчатого турбулентного аппарата на состав, активность катализатора и, как следствие, на кинетику процессов получения полимеров.

В условиях действующего промышленного производства оценить

эффективность гидродинамического воздействия на физико-химические свойства конечного продукта практически невозможно, что определяет актуальность модельного подхода к математическому описанию процесса, позволяющего воспроизвести необходимые сценарии ведения производства.

Целью данной работы является создание необходимых цифровых инструментов, позволяющих оценить эффективность использования трубчатого турбулентного аппарата на кинетику процессов получения полимерной продукции.

Обзор литературы

Вследствие микрогетерогенности используемых катализаторов изменение их дисперсного состава способно оказывать значимое влияние на свойства производимого полимерного продукта. В работе С. А. Будера¹ впервые было показано, что при увеличении интенсивности перемешиваний реакционной смеси для процесса стереоспецифической полимеризации изопрена наряду с ростом скорости процесса наблюдается заметное снижение расхода катализатора.

Впервые конструкция такого трубчатого турбулентного аппарата (ТТА) была предложена А. А. Берлином². Проводимые дальнейшие исследования [6]³ определяли возникающий

¹ Влияние вязкости раствора и скорости перемешивания на скорость полимеризации изопрена в присутствии катализатора Циглера / С. А. Будер [и др.] // Промышленность СК. 1983. № 7. С. 9–11.

² Трубчатые турбулентные реакторы – основа энерго- и ресурсосберегающих технологий / А. А. Берлин [и др.] // Хим. Промышленность. 1995. № 9. С. 550–559; Физико-химические основы протекания быстрых жидкофазных процессов / В. П. Захаров [и др.]. М. : Наука. 2008. 348 с.

³ Нетрадиционный способ повышения стереорегулярности и улучшения некоторых других характеристик цис-1,4-изопренового каучука / К. С. Минскер [и др.] // Журнал прикладной химии. 1999. Т. 72, № 6. С. 996–1001; Нетрадиционный способ воздействия на молекулярные характеристики полиолефинов и полидиенов / К. С. Минскер [и др.] // Доклады Академии наук. 2001. Т. 381, № 3. С. 373–376.

эффект при интенсивном перемешивании. В своих научных обоснованиях исследователи руководствовались идеей разделения всех характерных для сложного процесса реакций на быстрые и медленные стадии, протекающие в различных потоках. Для формирования и последующего инициирования активных центров свойственна достаточно высокая скорость, что является причиной возникающих диффузионных ограничений и предопределяет неоднородность распределения образующихся активных центров [7–10]. Изменение гидродинамического режима с использованием ТТА позволяет отделить быстрые стадии и обеспечить практически идеальные условия протекания процесса.

В ранее проведенных исследованиях достаточно подробно изучались вопросы влияния турбулентного перемешивания на размеры частиц каталитической системы [11], а также на кинетические параметры, характеризующие скорости отдельных элементарных реакций [12].

Для оценки гидродинамического влияния исследователи руководствуются изменением числа активных центров, иницирующих процесс полимеризации. Изучение характера кинетической неоднородности катализатора проводится путем постановки и решения обратной задачи на основании первичной физико-химической информации в виде кривой молекулярно-массового распределения (ММР).

Классический подход, позволяющий оценить эффективность гидродинамического воздействия в турбулентных потоках на кинетическую неоднородность катализатора, предполагает решение задачи идентификации функции распределения активных центров $\varphi(\lambda)$ исходя из выражения:

$$q_{\text{эксп}}(M) = \int_0^{\infty} \varphi(\lambda) K(\lambda, M) d\lambda, \quad (1)$$

где λ – статистический параметра Френкеля; $K(\lambda, M)$ – ядро интегрального уравнения, отражающее механизм полимеризационного процесса; $q_{\text{эксп}}(M)$ – вектор, определяющий ММР продукта. В качестве ядра интегрального уравнения для микрогетерогенных каталитических систем чаще всего используется распределение Флори [13]

$$K(\lambda, M) = \lambda^2 M e^{-\lambda M}. \quad (2)$$

Задача вида (1) является некорректно поставленной и успешно решается с помощью метода регуляризации, предложенного академиком А. Н. Тихоновым⁴. Ранее данный подход успешно применялся для восстановления характера кинетической неоднородности каталитической системы на основе сольвата хлорида гадолиния [14; 15]. В частности, в работе В. П. Захарова и соавторов было описано исследование кинетической неоднородности титансодержащей и неодимсодержащей каталитических систем в условиях предварительного гидродинамического воздействия в турбулентных потоках, продемонстрировавшее снижение кинетической неоднородности [16]. Л. А. Бигаевой [17] с соавторами была решена обратная задача формирования молекулярно-массового распределения ионно-координационной полимеризации образца полиизопрена, синтезированного на каталитической системе TiCl_4 –пиперилен– $\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$. В свою очередь А. С. Зиганшина [18] проводила исследование активности частиц каталитической системы TiCl_4 – $\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$ путем изменения дисперсионного состава в процессе получения полибутадиена.

Во всех указанных случаях решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения большое внимание уделяется параметру, характеризующему погрешность

⁴ Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. М. : Наука, 1986. 288 с.
Technologies, machinery and equipment

экспериментальных данных. Большая ошибка эксперимента приводит к «размыванию» хроматограмм, что отражается на получаемой кривой распределения активных центров и способствует неверной интерпретации результатов.

Материалы и методы

Программная реализация и вычислительные эксперименты, проведенные ранее, показали высокую чувствительность подхода к решению обратной задачи, основанного на методе регуляризации А. Н. Тихонова, к исходным экспериментальным данным. В работе [19] показано, что при погрешности лабораторных измерений более чем 10 % становится практически невозможно оценить доли активных центров, на которых образуются фракции полимеров с наиболее низкой молекулярной массой. Все это определяет необходимость учета влияния параметров погрешности на возможность корректного решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения [20].

Кроме того, в ряде случаев часто возникали проблемы, связанные с высокой осцилляцией получающегося решения на концах, которые не позволяли качественно интерпретировать расчетные результаты. Часто успех решения обратной задачи зависел от корректности выбора параметра регуляризации α , единственным критерием для которого выступает минимизация функции невязки, определяющей абсолютную разность между экспериментальными и расчетными значениями распределения. При проведении вычислительных экспериментов нередко возникали ситуации, когда численные методы решения задачи в формуле (1) давали отличающиеся друг от друга результаты в виде совокупности параметров α и p_i , что определяло необходимость дополнительного анализа получающегося решения.

Проблемы возникают и в тех случаях, когда потенциальные активные центры

расположены достаточно близко друг к другу. В частности, в работе [21] для полиизопрена на TiCl_4 -ДФО-пипериллен- $\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$ авторы столкнулись с задачей разложения «размытых» максимумов, т. е. когда перекрытие отдельных функций существенно.

В условиях возникающих проблем была реализована альтернативная методика решения обратной задачи, позволяющая на основании единственного допущения о том, что распределение на каждом типе активных центров описывается одним из модельных распределений, в автоматическом режиме решить задачу подбора числа активных центров и долей каждого типа, а также кинетических параметров, способствующих образованию полимеров с заданной молекулярной массой на каждом активном центре.

Основная идея нового имитационного подхода заключается в том, что программным образом «разыгрываются» различные сценарии ведения процесса, определяемые числом активных центров – N , долей каждого активного центра в общем составе катализатора – p_i и кинетическими параметрами, которые определяют статистический параметр Френкеля – λ_i и приводят к формированию различных вариантов ММР. Воспроизводимое таким образом ММР, которое наилучшим образом описывает результаты эксперимента, в свою очередь определяет искомым набор параметров p_i и λ_i ($i = 1 \dots N$). Таким образом, если классический подход к анализу кинетической неоднородности предполагает решение обратной задачи, то в условиях реализации новой методики проводится многократное решение прямой задачи воспроизведения вида ММР как суперпозиции распределений, характерных для каждого типа активного центра, и выбирается тот набор параметров p_i и λ_i , которые определяют ММР, максимально приближенное к экспериментальному.

Однако при всей логичности и структурированности предлагаемого подхода при его реализации потребовалось решить ряд возникающих проблем. Во-первых, неизвестно каким образом идентифицировать точное число активных центров, инициирующих процесс полимеризации. Действительно, если исходное ММР может быть описано наличием лишь N типов активных центров, то оно также легко может быть описано с помощью $N+1$ активных центров. В связи с этим в рамках реализации данного подхода к решению обратной задачи необходимо руководствоваться критерием минимизации возможного количества активных центров. Следовательно, на начальном этапе закладывается лишь один тип активного центра и определяются возможные кинетические параметры, позволяющие приблизить ММР к экспериментальному. Если же разница между экспериментальным и расчетным ММР превышает допустимую погрешность, то число активных центров увеличивается до двух и определяются возможные кинетические параметры, соответствующие каждому типу. Алгоритм повторяется до тех пор, пока разница между экспериментальным и расчетным ММР не станет менее максимально допустимого размера ошибки.

Вторая проблема выражается в достаточно низкой скорости обработки огромного количества сценариев при проведении вычислительных экспериментов. Для того чтобы многократный перебор различных вариантов молекулярно-массового распределения стал осуществимым, алгоритм пошагового воспроизведения был оптимизирован: все расчетные зависимости выведены за пределы итерационного поиска, шаг сдвига функционально зависит от величины ошибки. Однако наибольшее влияние на скорость расчетов оказала интеграция технологий параллельного

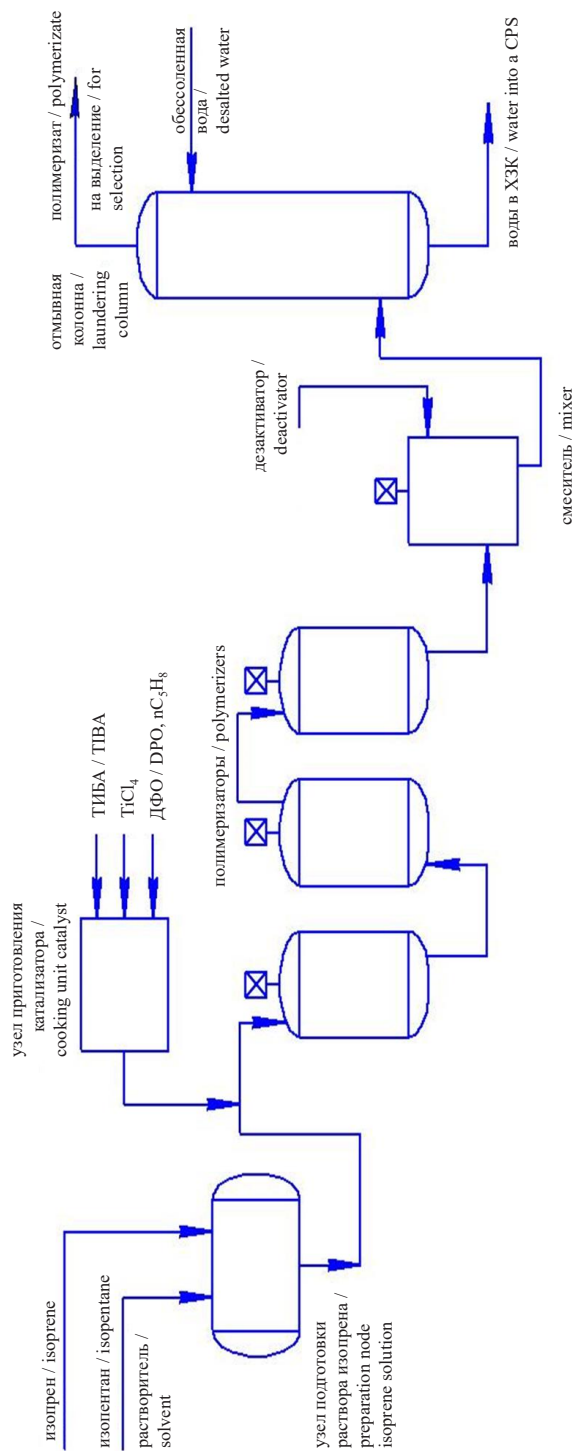
программирования и технологий облачных вычислений [22–24], эффективность которых уже была ранее продемонстрирована при исследовании сложных физико-химических процессов [25–28].

Результаты исследования

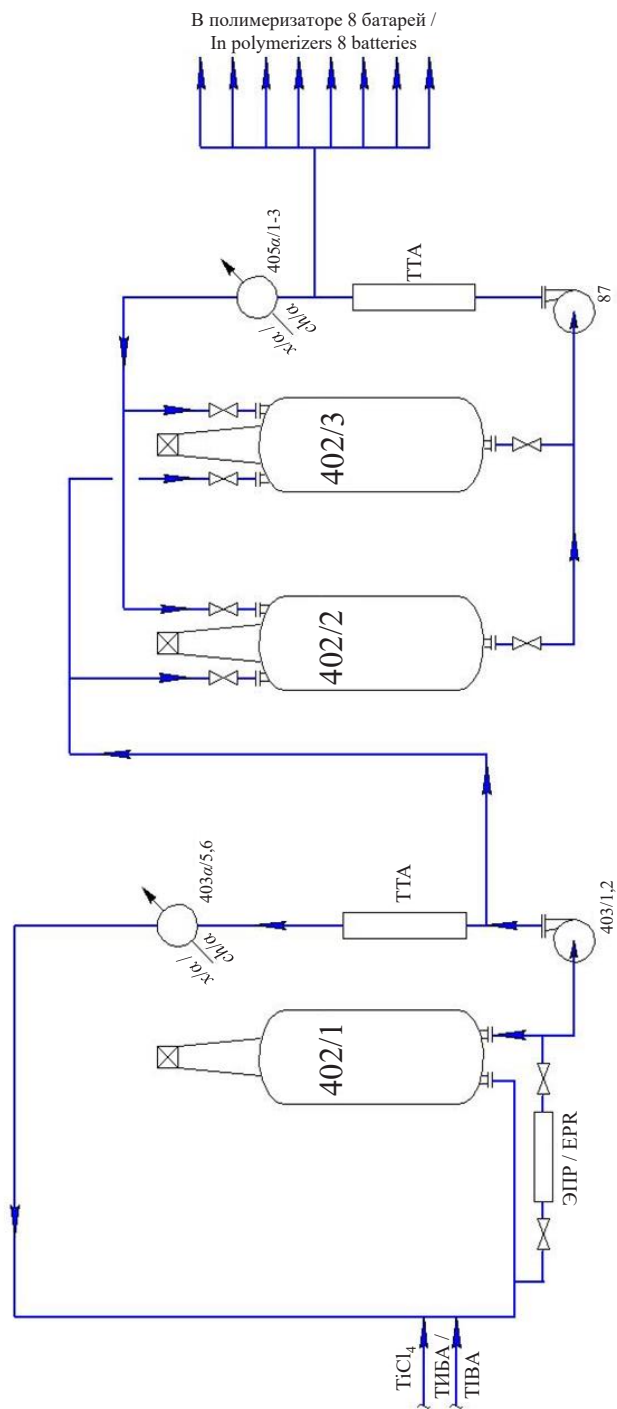
Апробация имитационного подхода к оценке кинетической неоднородности осуществлялась на промышленном производстве. Согласно технологическим условиям, непрерывный процесс получения полиизопрена организован в каскаде реакторов идеального перемешивания (рис. 1) объемом до $16,6 \text{ м}^3$. Каждый реактор снабжен мешалкой, мощность электродвигателя которой составляет 30 кВт, что позволяет поддерживать постоянную скорость перемешивания ($20\div 40$ оборотов в минуту). Поскольку организация какого-либо подвода теплоносителя отсутствует, то регулирование температуры ведения процесса осуществляется только за счет температуры поступающей реакционной смеси. Раствор мономера, который поступает в основную линию промышленного производства, формируется в результате смешения изопрена и возвратного растворителя.

С целью воздействия на поверхностную структуру катализатора на стадии его приготовления установлен малогабаритный ТТА (рис. 2), оказывающий существенное влияние на характер кинетической неоднородности катализатора.

Непрерывный процесс получения полиизопрена в присутствии титанового катализатора предполагает использование всего двух реакторов каскада, а суспензию каталитического комплекса при этом получают при $-10 \text{ }^\circ\text{C}$ путем сливания толуольных растворов TiCl_4 (катализатор) с $\text{Al}(i\text{-C}_4\text{H}_9)_3$ (сокатализатор), р-электронодонорной добавкой дифенилоксида (ДФО) и -электронодонорной добавкой пиперилена.



Р и с. 1. Технологическая схема организации непрерывного производства полиизопрена
 Fig. 1. Technological scheme of polyisoprene uninterrupt production



Р и с. 2. Технологическая схема приготовления катализатора с использованием турбулентного аппарата
F i g. 2. Technological scheme of preparing the catalyst using a turbulent apparatus

Состав катализатора формировали исходя из мольного соотношения $TiCl_4/ТИБА/ПП/ДФО = 1/1/0,2/0,15$ с дозировкой 1 моль $TiCl_4/980$ моль изопрена.

Полученный полиизопрен исследовался методом гель-проникающей хроматографии (ГПХ). Метод измерения основан на различии времен удерживания макромолекул полимера, растворенных в элюенте, в зависимости от их размеров в порах носителя разделяющей системы.

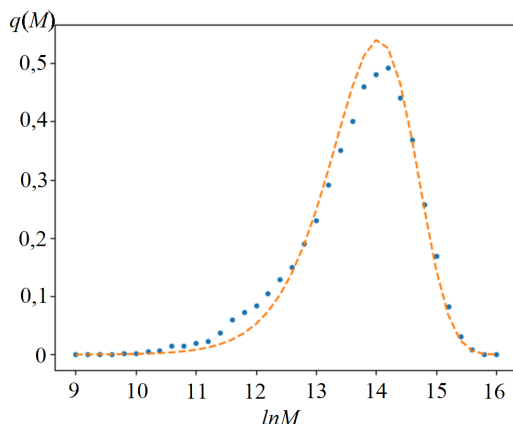
Апробация имитационного подхода проводилась последовательно. Согласно результатам эксперимента, индекс полидисперсности получаемого продукта составляет $M_w/M_n = 2,56$. Результаты проведенных расчетов для предполагаемых условий существования лишь одного типа активного центра представлены на рисунке 3. При этом было получено расчетное значение статистического параметра Френкеля $\lambda = 1,6 \cdot 10^{-6}$. Для количественной оценки согласованности расчетного молекулярно-массового распределения с экспериментальным рассчитывалась величина ошибки

$$\delta^2 = \sum_i (q_{\text{эксп}} [i] - q_{\text{расч}} [i])^2,$$

которая составила 0,02. Очевидно, что если закладывать в систему организации расчетов лишь один тип активного центра, то он не способен будет обеспечить необходимую ширину молекулярно-массового распределения, а исходное молекулярно-массовое распределение нельзя описать моноцентральной моделью.

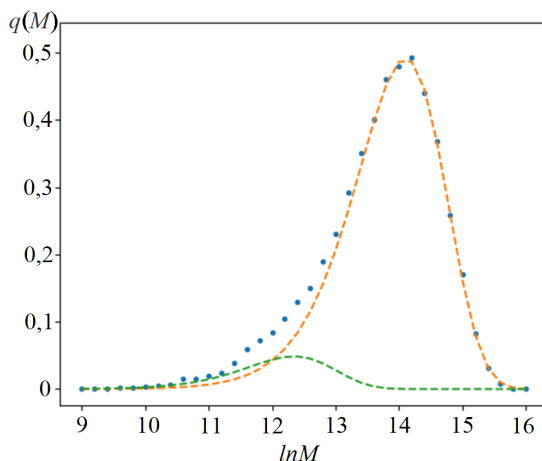
Продолжение работы алгоритма для случая использования двух типов активных центров позволило идентифицировать значения $p = (0,91; 0,09)$ для $\lambda = (1,5 \cdot 10^{-6}; 8,7 \cdot 10^{-6})$. Величина ошибки δ^2 при этом составила $7,3 \cdot 10^{-4}$ (рис. 4). Дополнительных шагов для реализации имитационного подхода к решению обратной задачи не требуется, поскольку расчетное молекулярно-массовое распределение, получаемое в результате суперпозиции распределений, характерных для каждого типа активного центра, достаточно хорошо согласуется с итогами эксперимента.

В результате проведенных вычислений имитационный подход к решению обратной задачи формирования ММР позволил идентифицировать наличие двух активных центров: тип $A_{Ti} - \ln M = 13,4$, тип $B_{Ti} - \ln M = 11,7$, при этом доля активных центров типа A_{Ti} составила 0,91; тип $B_{Ti} - 0,09$.



Р и с. 3. Результаты работы имитационного подхода к решению обратной задачи (точки – исходная кривая молекулярно-массового распределения; штрих – расчетная кривая)

F i g. 3. Results of the simulation approach to solving the inverse problem (dots are the initial curve of the molecular weight distribution; dashed line is the calculated curve)



Р и с. 4. Результаты работы имитационного подхода к решению обратной задачи (точки – исходная кривая молекулярно-массового распределения; штрих – расчетная кривая для активных центров 1 и 2 типа)

F i g. 4. Results of the simulation approach to solving the inverse problem (dots are the initial curve of the molecular weight distribution; dashed line is the calculated curve for active centers of types 1 and 2)

Обсуждение и заключение

Таким образом, разработана методология решения обратных задач, которая позволяет на основании известной физико-химической информации определять влияние внешних факторов на кинетическую активность и неоднородность активных центров. В частности, на основании исходной кривой молекулярно-массового распределения представленный имитационный подход позволил оценить эффективность гидродинамического воздействия в турбулентных потоках на исходный состав катализатора в непрерывном производстве 1,4-цис-полиизопрена. Поскольку гидродинамическое воздействие оказывает существенное влияние на характер кинетической неоднородности и способствует усреднению реакционной способности активных центров, то часто максимумы могут быть расположены

близко друг к другу и сложно поддаются однозначной идентификации. Использование имитационного подхода в этом случае становится оправданным.

Апробация нового имитационного подхода к решению обратной задачи позволила оценить эффективность влияния трубчатого турбулентного аппарата на кинетику процесса получения полиизопрена в присутствии титанового катализатора и идентифицировать наличие двух активных центров: тип A_{Ti} – $\ln M = 13,4$, тип B_{Ti} – $\ln M = 11,7$, при этом доля активных центров типа A_{Ti} составляет 0,91; типа B_{Ti} – 0,09.

На основании полученных данных становится возможным проводить постановку и решение обратных задач идентификации кинетических параметров с целью дальнейшего модельного описания системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Active Sites of Polymerization. Multiplicity: Stereospecific and Kinetic Heterogeneity / G. Zaikov [et al.]. London : CRC Press, 2005. 397 p.

2. Impact of Methylaluminoxane Oxidation on the Ethylene Polymerization Using Ni Catalysts / R. Tanaka [et al.] // *Organometallics*. 2022. Vol. 41, Issue 21. P. 3024–3031. <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.2c00440>
3. Исследование кинетики процесса полимеризации изопрена в присутствии неодимсодержащих каталитических систем, модифицированных в турбулентных потоках / Э. Н. Мифтахов [и др.] // *Журнал прикладной химии*. 2021. Т. 94, № 1. С. 77–83. <https://doi.org/10.31857/S0044461821010114>
4. Assessing the Hydrodynamic Effect on the Molecular Parameters of the Isoprene Polymerization Product in the Presence of a Neodymium–Based Catalytic System / S. Mustafina [et al.] // *ACS Omega*. 2022. Vol. 7, Issue 21. P. 17652–17657. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c00469>
5. Характеристики стереорегулярного цис-1,4-полиизопрена, полученного в условиях крупнотоннажного производства на титановых и лантаноидных катализаторах, модифицированных в турбулентных потоках / И. Ш. Насыров [и др.] // *Журнал прикладной химии*. 2021. Т. 94, № 6. С. 741–747. <https://doi.org/10.31857/S0044461821060074>
6. Интенсификация быстрых химических процессов на межфазных границах двухкомпонентных жидких сред в трубчатых турбулентных реакторах / А. А. Берлин [и др.] // *Химическая физика*. 2019. Т. 38, № 1. С. 19–26. <https://doi.org/10.1134/S0207401X19010059>
7. Roshchin D. E., Patlazhan S. A., Berlin A. A. Free-radical Polymerization in a Droplet with Initiation at the Interface // *European Polymer Journal*. 2023. Vol. 190. Article no. 112002. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2023.112002>
8. Modified Free Volume Theory for Self-Diffusion of Small Molecules in Amorphous Polymers / A. Mansuri // *Macromolecules*. 2023. Vol. 56, Issue 8. P. 3224–3237. <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.2c02451>
9. Multiscale Theoretical Tools for in Silico Macromolecular Chemistry and Engineering / M. Edleeva [et al.] // *In-Silico Approaches to Macromolecular Chemistry*. 2023. P. 17–69. <https://doi.org/10.1016/b978-0-323-90995-2.00012-6>
10. Кинетика полимеризации изопрена в присутствии каталитической системы $\text{NdCl}_3 \cdot \text{NCH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3\text{-Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$ –пиперилен / К. А. Терещенко [и др.] // *Химическая физика*. 2019. Т. 13. С. 170–176. <https://doi.org/10.1134/S0207401X19020134>
11. Гидродинамическое воздействие на каталитическую систему $\text{TiCl}_4\text{-Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$ при полимеризации изопрена / К. С. Минскер [и др.] // *Вестник Башкирского университета*. 2003. Т. 8, № 3–4. С. 29–31.
12. Молекулярные характеристики цис-1,4-полиизопрена при формировании каталитической системы $\text{TiCl}_4\text{-Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$ в турбулентном режиме / В. П. Захаров [и др.] // *Высокомолекулярные соединения. Серия Б*. 2004. Т. 46, № 10. С. 1765–1769.
13. Determination of Catalyst Active Sites Distributions in Ionic Polymerization / T. S. Usmanov [et al.] // *Inverse Problems in Science and Engineering*. 2005. Vol. 13. P. 101–107. <https://doi.org/10.1080/10682760410001697822>
14. Мифтахов Э. Н., Мустафина С. А. Решение обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения методом регуляризации А. Н. Тихонова : свидетельство о государственной регистрации программы. № 2021618232; заявл. 11.05.2021; опублик. 25.05.2021.
15. Исследование кинетической неоднородности каталитической системы на основе сольвата хлорида гадолиния в производстве 1,4-цис-полиизопрена / Э. Н. Мифтахов [и др.] // *Журнал прикладной химии*. 2022. Т. 95, № 3. С. 423–429. <https://doi.org/10.31857/S0044461822030100>
16. Кинетическая неоднородность титановых и неодимовых катализаторов производства 1,4-цис-полиизопрена / Захаров В. П. [и др.] // *Химическая физика*. 2015. Т. 9. С. 300–305. <https://doi.org/10.7868/S0207401X15030139>
17. Обратная задача молекулярно-массового распределения и анализ функций распределения / Л. А. Бигаева [и др.] // *Башкирский химический журнал*. 2014. Т. 21, № 2. С. 65–69.
18. Controlling the Activity of Particles of $\text{TiCl}_4\text{-Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$ Catalytic System by Changing Their Dispersion Composition in the Process of Producing Low-Molar-Mass Polybutadiene – a Component of Sticky Glue / A. Ziganshina [et al.] // *Polymer Science, Series D*. 2020. Vol. 13. P. 365–371. <https://doi.org/10.1134/s199542122004022x>

19. Модифицированный метод решения обратных задач формирования молекулярно-массового распределения в условиях интервального характера исходных экспериментальных данных / Э. Н. Мифтахов [и др.] // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2022. Т. 1, № 47. С. 102–112. <https://doi.org/10.26456/vtchem2022.1.10>
20. Kinetic Heterogeneity of Polymer Products Obtained in the Presence of Microheterogenic Catalytic Systems Based on Gel Chromatograms / E. Miftakhov [et al.] // Periódico Tchê Química. 2021. V. 18, Issue 38. P. 27–37. https://doi.org/10.52571/PTQ.v18.n38.2021.03_MIFTAKHOV_pgs_27_37.pdf
21. О проблеме решения обратной некорректной задачи в химической технологии полимеров: интерпретация гель-хроматограмм / Л. А. Бигаева [и др.] // Вестник Казанского технологического университета. 2015. Т. 18, № 3. С. 86–92.
22. Cloud Computing in Construction Industry: Use Cases, Benefits and Challenges / S. Bello [et al.] // Automation in Construction. 2020. Vol. 122. Article no. 103441. <https://doi.org/10.1016/j.autcon.2020.103441>
23. Mustafa C., Zeebaree S. Sufficient Comparison among Cloud Computing Services: IaaS, PaaS, and SaaS: A Review. 2021. Vol. 5. P. 17–30. <http://dx.doi.org/10.5281/zenodo.4481415>
24. A Survey of Biological Data in a Big Data Perspective / D. Gabriel [et al.] // Big Data. 2022. Vol. 10, Issue 4. P. 279–297. <https://doi.org/10.1089/big.2020.0383>
25. Developing Methods and Algorithms for Cloud Computing Management Systems in Industrial Polymer Synthesis Processes / E. Miftakhov [et al.] // Emerging Science Journal. 2021. Vol. 5, Issue 6. P. 964–972. <https://doi.org/10.28991/esj-2021-01324>
26. SaaS is the Service for Solving Problems of Chemical Kinetics / A. Daminov [et al.] // 2021 International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT). 2021. P. 1–4. <https://doi.org/10.1109/ITNT52450.2021.9649017>
27. Making it Rain: Cloud-based Molecular Simulations for Everyone / P. Arantes [et al.] // Journal of Chemical Information and Modeling. 2021. Vol. 61. P. 4852–4856. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2021-9f2m5>
28. GROMACS in the Cloud: A Global Supercomputer to Speed Up Alchemical Drug Design / K. Carsten [et al.] // Journal of Chemical Information and Modeling. 2022. Vol. 62, Issue 7. P. 1691–1711. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c00044>

Поступила 05.07.2023; одобрена после рецензирования 01.08.2023; принята к публикации 20.08.2023.

Об авторах:

Мифтахов Эльдар Наилевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Уфимского университета науки и технологий (450076, Российская Федерация, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, Researcher ID: AAA-5885-2019, Scopus ID: 56178153800, promif@mail.ru

Мустафина Софья Ильшатовна, младший научный сотрудник Уфимского университета науки и технологий (450076, Российская Федерация, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32), ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8036-3001>, Scopus ID: 57204930367, sofiamustafina@mail.ru

Морозкин Николай Данилович, доктор физико-математических наук, профессор, президент Уфимского университета науки и технологий (450076, Российская Федерация, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32), ORCID: <https://orcid.org/0009-0002-5051-7094>, Scopus ID: 6603118906, morozkinnd@mail.ru

Насыров Ильдус Шайхитдинович, кандидат химических наук, заместитель генерального директора по развитию (по науке) Акционерного общества «Синтез-Каучук» (453110, Российская Федерация, г. Стерлитамак, ул. Техническая, д. 14), ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8273-3651>, Scopus ID: 6603373003, nasurovish@mail.ru

Мустафина Светлана Анатольевна, доктор физико-математических наук, профессор, проректор по развитию филиальной сети, заведующий кафедрой математического моделирования Уфимского университета науки и технологий (450076, Российская Федерация, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>, Researcher ID: AAC-3926-2020, Scopus ID: 6603592002, mustafina_sa@mail.ru

Заявленный вклад авторов:

Э. Н. Мифтахов – разработка методов и алгоритмов решения прямых задач, проведение вычислительных экспериментов, подготовка текста статьи.

С. И. Мустафина – программирование вычислительных методов для организации расчетов.

Н. Д. Морозкин – анализ получаемых результатов исследования, обзор литературных источников.

И. Ш. Насыров – планирование и организация необходимых лабораторных экспериментов.

С. А. Мустафина – постановка цели и задачи исследования, планирование необходимых вычислительных экспериментов, анализ получаемых результатов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

REFERENCES

1. Zaikov G., Monakov Y., Sigaeva N., Urazbaev V. Active Sites of Polymerization. Multiplicity: Stereospecific and Kinetic Heterogeneity. London: CRC Press; 2005.
2. Tanaka R., Sogo K., Komaguchi K., Ae K., Nakayama Y., Shiono T. Impact of Methylaluminoxane Oxidation on the Ethylene Polymerization Using Ni Catalysts. *Organometallics*. 2022;41(21):3024–3031. <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.2c00440>
3. Miftakhov E.N., Nasyrov I.S., Mustafina S.A., Zakharov V.P. Study of Kinetics of Isoprene Polymerization in the Presence of Neodymium-Containing Catalytic Systems Modified in Turbulent Flows. *Russian Journal of Applied Chemistry*. 2021;94(1):77–83. (In Russ.) <https://doi.org/10.1134/S1070427221010110>
4. Mustafina S., Miftakhov E., Akimov A., Podvalny S., Gabelashvili K. Assessing the Hydrodynamic Effect on the Molecular Parameters of the Isoprene Polymerization Product in the Presence of a Neodymium-Based Catalytic System. *ACS Omega*. 2022;7(21):17652–17657. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c00469>
5. Nasyrov I.Sh., Zhavoronkov D.A., Shurupov O.K., Zakharova E.M., Vasiliev V.A., Zakharov V.P. Characteristics of Stereoregular cis-1,4-Polyisoprene Obtained under the Conditions of a Large-Tonnage Production Process on Titanium and Lanthanide Catalysts Modified in Turbulent Flows. *Russian Journal of Applied Chemistry*. 2021;94(6):741–747. (In Russ.) <https://doi.org/10.1134/S1070427221060070>
6. Berlin A.A., Patlazhan S.A., Kravchenko I.V., Prochukhan K.Yu., Prochukhan Yu.A. Intensification of Fast Chemical Processes at Interfaces of Two-Component Liquid Media in Tubular Turbulent Reactors. *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2019;38(1):19–26. (In Russ.) <https://doi.org/10.1134/S0207401X19010059>
7. Roshchin D.E., Patlazhan S.A., Berlin A.A. Free-Radical Polymerization in a Droplet with Initiation at the Interface. *European Polymer Journal*. 2023;190:112002. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2023.112002>
8. Mansuri A., Völkel M., Feuerbach T., Winck J., Vermeer A., Hoheisel W., Thommes M. Modified Free Volume Theory for Self-Diffusion of Small Molecules in Amorphous Polymers. *Macromolecules*. 2023;56(8):3224–3237. (In Russ.) <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.2c02451>
9. Edeleva M., Arraez F., Wu Y., Xie L., Figueira F., Marien Y. [et al.]. Multiscale Theoretical Tools for in Silico Macromolecular Chemistry and Engineering. In: In-Silico Approaches to Macromolecular Chemistry. 2023. p. 17–69. <https://doi.org/10.1016/b978-0-323-90995-2.00012-6>
10. Tereshchenko K.A., Ulitin N.V., Shiyan D.A., Almetova G.F., Zakharova E.M., Nasyrov I.Sh., [et al.]. Kinetics of Isoprene Polymerization in the Presence of the Catalytic System NdCl₃·NCH₃CH(OH)CH₃-Al(i-C₄H₉)₃-Piperylene. *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2019;13:170–176. (In Russ.) <https://doi.org/10.1134/S1990793119010299>

11. Minsker K.S., Zakharov V.P., Sadykov I.V., Ionova I.A., Berlin A.A., Monakov Yu.B. Hydrodynamic Effect on the $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$ Catalytic System During Isoprene Polymerization. *Bulletin of the Bashkir University*. 2003;8(3–4):29–31. (In Russ.)
12. Zakharov V.P., Sadykov I.V., Minsker K.S., Berlin A.A., Monakov Yu.B. Molecular Characteristics of cis-1,4-Polyisoprene during the Formation of the $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$ Catalytic System in the Turbulent Regime. *High Molecular Compounds. Series: B*. 2004;46(10):1765–1769. (In Russ.)
13. Usmanov T.S., Yagola A.G., Usmanov S.M., Monakov Y.B. Determination of Catalyst Active Sites Distributions in Ionic Polymerization. *Inverse Problems in Science and Engineering*. 2005;13:101–107. (In Russ.) <https://doi.org/10.1080/10682760410001697822>
14. Miftakhov E.N., Mustafina S.A. [Solution of the Inverse Problem of Forming a Molecular Weight Distribution by A.N. Tikhonov's Regularization Method: Certificate of State Registration of the Program]. No. 2021618232; dec. 05.11.2021; publ. 25.05.2021. (In Russ.)
15. Miftakhov E.N., Mustafina S.A., Nasyrov I.S., Faizova V.Y. Kinetic Heterogeneity of the Catalytic System Based on Gadolinium Chloride Solvate in 1,4-cis-polyisoprene Production. *Russian Journal of Applied Chemistry*. 2022;95(3):423–429. (In Russ.) <https://doi.org/10.31857/S004446182203010>
16. Zakharov V.P., Mingaleev V.Z., Berlin A.A., Nasyrov I.Sh., Zhavoronkov D.A., Zakharova E.M. Kinetic Inhomogeneity of Titanium- and Neodymium-Based Catalysts for the Production of cis-1,4-polyisoprene. *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2015;9:300–305. (In Russ.) <https://doi.org/10.7868/S0207401X15030139>
17. Bigaeva L.A., Usmanov A.S., Gaisin F.R., Usmanov S.M. Inverse Problem of Molecular Mass Distribution and Analysis of Distribution Functions. *Bashkir Chemical Journal*. 2014;21(2):65–69. (In Russ.)
18. Ziganshina A., Shiyani D., Ganiev G., Tereshchenko K., Zakharov V., Ulitin N. Controlling the Activity of Particles of $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$ Catalytic System by Changing Their Dispersion Composition in the Process of Producing Low-Molar-Mass Polybutadiene – a Component of Sticky Glue. *Polymer Science. Series: D*. 2020;13:365–371. <https://doi.org/10.1134/s199542122004022x>
19. Miftakhov E.N., Mustafina S.A., Nasyrov I.Sh., Mustafina S.I. Modified Method for Solving Inverse Problems of the Formation of Molecular Mass Distribution under the Conditions of the Interval Nature of the Initial Experimental Data. *Bulletin of the Tver State University. Series: Chemistry*. 2022;1(47):102–112. (In Russ., abstract in Eng.) <https://doi.org/10.26456/vtchem2022.1.10>
20. Miftakhov E., Mustafina S., Nasyrov I., Daminov A. Kinetic Heterogeneity of Polymer Products Obtained in the Presence of Microheterogenic Catalytic Systems Based on Gel Chromatograms. *Periodico Tchê Química*. 2021;18(38):27–37. https://doi.org/10.52571/PTQ.v18.n38.2021.03_MIFTAKHOV_pgs_27_37.pdf
21. Bigaeva L.A., Latypov I.I., Usmanov S.M., Nabiullin A.R., Shiyani D.A., Ulitin N.V. On the Problem of Solving the Inverse Ill-posed Problem in the Chemical Technology of Polymers: Interpretation of Gel Chromatograms. *Bulletin of the Kazan Technological University*. 2015;18(3):86–92. (In Russ.)
22. Bello S., Oyedele L., Akinadé O., Bilal M., Davila D., Akanbi L., [et al.]. Cloud Computing in Construction Industry: Use Cases, Benefits and Challenges. *Automation in Construction*. 2020;122:103441. <https://doi.org/10.1016/j.autcon.2020.103441>
23. Mustafa C., Zeebaree S. Sufficient Comparison among Cloud Computing Services: IaaS, PaaS, and SaaS: A Review. 2021;5:17–30. <http://dx.doi.org/10.5281/zenodo.4481415>
24. Gabriel D., Pedro L., Fernanda P., Daniel L., Scheila A. A Survey of Biological Data in a Big Data Perspective. *Big Data*. 2022;10(4):279–297. <https://doi.org/10.1089/big.2020.0383>
25. Miftakhov E., Mustafina S., Akimov A., Larin O., Gorlov A. Developing Methods and Algorithms for Cloud Computing Management Systems in Industrial Polymer Synthesis Processes. *Emerging Science Journal*. 2021;5(6):964–972. <https://doi.org/10.28991/esj-2021-01324>
26. Daminov A., Miftakhov E., Mustafina S. SaaS is the Service for Solving Problems of Chemical Kinetics. In: 2021 International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT). 2021. p. 1–4. <https://doi.org/10.1109/ITNT52450.2021.9649017>

27. Arantes P., Polêto M., Pedebos C., Ligabue-Braun R. Making it Rain: Cloud-Based Molecular Simulations for Everyone. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2021;61:4852–4856. <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2021-9f2m5>

28. Carsten K., Christian K., Austin C., Ludvig N., Helmut G., Bert L., et al. GROMACS in the Cloud: A Global Supercomputer to Speed Up Alchemical Drug Design. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2022;62(7):1691–1711. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c00044>

Submitted 05.07.2023; revised 01.08.2023; accepted 20.08.2023.

About the authors:

Eldar N. Miftakhov, Cand.Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Ufa University of Science and Technology (32 Zaki Validi St., Ufa 450076, Russian Federation), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, Researcher ID: AAA-5885-2019, Scopus ID: 56178153800, promif@mail.ru

Sofya I. Mustafina, Junior Researcher, Ufa University of Science and Technology (32 Zaki Validi St., Ufa 450076, Russian Federation), ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8036-3001>, Scopus ID: 57204930367, sofiamustafina@mail.ru

Nikolay D. Morozkin, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, President of the Ufa University of Science and Technology (32 Zaki Validi St., Ufa 450076, Russian Federation), ORCID: <https://orcid.org/0009-0002-5051-7094>, Scopus ID: 6603118906, morozkinnd@mail.ru

Ildus Sh. Nasyrov, Cand.Sci. (Chemistry), Deputy General Director for Development (for Science), Joint Stock Company Sintez Rubber (14 Tekhnicheskaya St., Sterlitamak 453110, Russian Federation), ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8273-3651>, Scopus ID: 6603373003, nasyrovish@mail.ru

Svetlana A. Mustafina, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Vice-Rector for Branch Network Development, Head of the Department of Mathematical Modeling, Ufa University of Science and Technology (32 Zaki Validi St., Ufa 450076, Russian Federation), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>, Researcher ID: AAC-3926-2020, Scopus ID: 6603592002, mustafina_sa@mail.ru

Authors contribution:

E. N. Miftakhov – developing methods and algorithms for solving direct problems, conducting computational experiments, writing the text of the article.

S. I. Mustafina – programming of computational methods for organization of calculations

N. D. Morozkin – analyzing the results of the study, reviewing of literary sources.

I. Sh. Nasyrov – planning and organization of the necessary laboratory experiments.

S. A. Mustafina – setting the goal and objectives of the study, planning the necessary computational experiments, analyzing the results.

All authors have read and approved the final manuscript.