

# Компьютерное моделирование процесса эмульсионной сополимеризации на основе метода Монте-Карло

МИХАЙЛОВА ТАТЬЯНА АНАТОЛЬЕВНА

*Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета (Стерлитамак)*

e-mail: T.A.Mihailova@yandex.ru

МИФТАХОВ ЭЛЬДАР НАИЛЕВИЧ

*Уфимский государственный авиационный технический университет, филиал в г. Ишимбай (ИшТехУ)*

МУСТАФИНА СВЕТЛАНА АНАТОЛЬЕВНА

*Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета (Стерлитамак)*

В настоящее время среди синтетических каучуков, которые производятся на отечественных предприятиях, наиболее распространенными являются бутадиен-стирольные каучуки. Но их производство представляет собой сложный процесс, изучение которого упрощается при построении математической модели. Большой интерес представляет статистический подход, основанный на методе Монте-Карло. Его идея основана на методе, предложенном в 1977 году американским физиком Gillespie. Опишем алгоритм в виде последовательности шагов.

Шаг 1. Выпишем кинетическую схему процесса сополимеризации[1]:

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 ( $V$  – объем реакционной смеси).

Шаг 3. Вычислим скорость каждой реакции:  $R_i = \tilde{k}_i \cdot X_A \cdot X_B$ , 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, образующих кинетическую схему процесса.

Шаг 4. Вычислим вероятность осуществления каждой реакции в данный момент времени:  $p_i = \frac{R_i}{R_{sum}}, i = 1..n$ . Очевидно, что  $p_1 + p_2 + \dots + p_n = 1$ .

Шаг 5. Сгенерируем равномерно распределенное случайное число  $r$  на отрезке от 0 до 1 и подберем такое значение  $k$ , чтобы имело место неравенство:

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

Следовательно, в результате имитационного выбора должна произойти реакция под индексом  $k$ .

Шаг 6. Продолжая рассуждения, аналогичным образом выстроим всю схему проведения реакции.

**Список литературы**

- [1] S. A. MUSTAFINA, E. N. MIFTAKHOV, T. A. MIKHAILOVA. Solving the direct problem of butadiene-styrene copolymerization // Int. J. Chem. Sci. . — 2014. — № 12(2), С. 564–572.