# СИНТЕЗ НЕЙРО-НЕЧЕТКОЙ МОДЕЛИ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССОВ РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

# А.Г. Лопатин, Д.П. Вент, Б.А. Брыков

Александр Геннадиевич Лопатин \*, Дмитрий Павлович Вент, Богдан Александрович Брыков Кафедра автоматизация производственных процессов, Новомосковский институт Российского химико-технологического университета им. Д.И. Менделеева, ул. Дружбы, 8, Новомосковск, Российская Федерация, 301665

E-mail: a\_lopatin@mail.ru \*, dvent@list.ru, brybogdan@yandex.ru

Рассматривается кинетическая схема проиессов синтеза полимеров метилметакрилата и стирола методом радикальной полимеризации. Показано, что основное различие в приведенных кинетических схемах наблюдается в последнем этапе реакиии и заключается в механизмах обрыва цепи полимера – рекомбинацией для полистирола и диспропорционированием для полиметилметакрилата. Приведены известные математические модели, описывающие кинетическую схему полимеризации метилметакрилата и стирола и отображающие зависимость степени превращения мономера в полимер от времени. Показано, что каждая из представленных моделей содержит большое количество эмпирических констант, размерности которых у разных исследователей отличаются на порядки, что значительно затрудняет использование этих моделей и зачастую приводит к путанице и неправильным результатам имитационного моделирования. Кроме того, некоторые из известных моделей не учитывают явление автоускорения процесса – гель-эффекта, присущего радикальной полимеризации стирола и, в большей степени, метилметакрилата. Таким образом, была обоснована необходимость разработки более простой по своей структуре адекватной математической модели рассматриваемых процессов на основании методов нейро-нечеткого моделирования. В качестве исходных данных при разработке нечеткой модели использовались результаты изучения скорости полимеризации метилметакрилата и стирола в лабораторном реакторе при разных начальных условиях. При помощи адаптивной нейро-нечеткой системы были получены первичные модели типа Такаги-Сугено, обработав которые, получили окончательную нечеткую модель. Точность полученной модели была проверена путем проведения сравнительного анализа результатов имитационного моделирования процесса при разных исходных данных и результатов, полученных на лабораторном реакторе. Показана хорошая сходимость данных и даны рекомендации по использованию модели.

Ключевые слова: радикальная полимеризация, стирол, полистирол, метилметакрилат, полиметилметакрилат, кинетика, моделирование, нечеткая модель

# SYNTHESIS OF A NEURO-FUZZY MODEL OF RADICAL POLYMERIZATION PROCESS KINETICS

## A.G. Lopatin, D.P. Vent, B.A. Brykov

Alexander G. Lopatin \*, Dmitriy P. Vent, Bogdan A. Brykov

Department of Automation of Manufacturing Processes, Novomoskovsk Institute of D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Druzhby st., 8, Novomoskovsk, 301665, Russia E-mail: a\_lopatin@mail.ru \*, dvent@list.ru, brybogdan@yandex.ru

There was considered the kinetic scheme of the processes of methyl methacrylate and styrene polymers synthesis by the radical polymerization method. It is shown that the main difference in the above kinetic schemes is observed in the last stage of the reaction and lies in the mechanisms of breaking the polymer chain – by recombination for polystyrene and by disproportionation for polymethyl methacrylate. There were given the well-known mathematical models describing the kinetic scheme for the polymerization of methyl methacrylate and styrene and show-

Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. 2020. V. 63. N 7

### A.G. Lopatin, D.P. Vent, B.A. Brykov

ing the dependence of the degree of monomer to polymer conversion on the time. It is shown that each of the presented models contains a large number of empirical constants, the values of which differ by orders of magnitude among different researchers, which greatly complicates the use of these models and often leads to confusion and incorrect results of simulation modeling. In addition, some of the known models do not take into account the phenomenon of auto-acceleration of the process - the gel effect inherent in the radical polymerization of styrene and, to a greater extent, methyl methacrylate. Thus, the necessity of developing a simpler in its structure adequate mathematical model of the processes under consideration based on the methods of neuro-fuzzy modeling was substantiated. The results of studying the rate of polymerization of methyl methacrylate and styrene in a laboratory reactor under different initial conditions were used as initial data in the development of a fuzzy model. With the help of an adaptive neuro-fuzzy system, there were obtained primary models of the Takagi-Sugeno type, after processing which, we obtained the final fuzzy model. The accuracy of the obtained model was verified by conducting a comparative analysis of the results of process simulation with different initial data and results obtained in a laboratory reactor. The good data convergence were shown and recommendations were given for using the model.

**Key words:** radical polymerization, styrene, polystyrene, methyl methacrylate, polymethyl methacrylate, kinetics, modeling, fuzzy model

### Для цитирования:

Лопатин А.Г., Вент Д.П., Брыков Б.А. Синтез нейро-нечеткой модели кинетики процессов радикальной полимеризации. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2020. Т. 63. Вып. 7. С. 67–73

#### For citation:

Lopatin A.G., Vent D.P., Brykov B.A. Synthesis of a neuro-fuzzy model of radical polymerization process kinetics. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* [Russ. J. Chem. & Chem. Tech.]. 2020. V. 63. N 7. P. 67–73

#### ВВЕДЕНИЕ

Процессы синтеза таких полимеров, как полиметилметакрилат (ПММА) и полистирол (ПС), довольно часто проводят по механизму свободной радикальной полимеризации в суспензии, получая в результате гранулированный полимер. В ходе изучения особенностей процессов радикальной полимеризации установлено, что кинетика процесса значительно осложнена вследствие наличия явления автоускорения процесса при определенной степени конверсии мономера в полимер – гель-эффекта [1-3]. Так, для процесса синтеза ПС данное явление проявляется, начиная с 60% степени конверсии мономера, а для процесса синтеза ПММА гель-эффект выражается уже с 30% степени конверсии.

Механизмы возникновения гель-эффекта описаны в [4]; отметим лишь, что последствием гель-эффекта является резкое выделение большого количества теплоты в объеме реакционной смеси, из-за чего свойства конечного продукта существенно ухудшаются. Для предотвращения гельэффекта во время протекания процесса радикальной полимеризации существует множество различных методов: введение в реакционную смесь активных добавок и/или специальных инициаторов, использование слабых ингибиторов, фотоингибирование, применение двухкомпонентных систем «инициатор-ингибитор», введение в реакционную систему кислорода.

Вышеназванные методы имеют определенную эффективность в подавлении гельэффекта, однако их использование приводит к существенному осложнению технологического процесса и удорожанию конечного продукта. В этой связи, все чаще находят свое применение сложные системы автоматического управления, в основе которых зачастую лежит математическая модель кинетики процесса, позволяющая реализовывать интеллектуальные методы предиктивного или нечеткого управления [5-7].

Таким образом, разработка математической модели кинетики радикальной полимеризации, адекватно описывающей процессы химического превращения с учетом гель-эффекта, является очень важной и актуальной задачей, имеющей весомое прикладное значение.

Чаще всего принимают [8, 9], что радикальную полимеризацию стирола и метилметакрилата можно описать в виде кинетической схемы, состоящей из следующих этапов:

1) Инициирование – стадия распада инициатора (1) с последующим образованием реакционного центра будущей макромолекулы вследствие реакции радикала распавшегося инициатора и молекулы мономера (2):

$$I \xrightarrow{k_d} q R^*, \tag{1}$$

$$R^* + M \xrightarrow{k_i} P_1^*, \qquad (2)$$

где I – концентрация инициатора, моль/м<sup>3</sup>; q – количество первичных радикалов, образовавшихся при распаде инициатора (для процессов синтеза ПС и ПММА q = 2);  $R^*$  – концентрация первичных радикалов, моль/м<sup>3</sup>; M – концентрация мономера, моль/м<sup>3</sup>;  $P_1^*$  – концентрация макрорадикалов с первым мономерным остатком, моль/м<sup>3</sup>;  $k_d$ ,  $k_i$  – константы скоростей разложения инициатора и начала полимеризации соответственно, м<sup>3</sup>/(моль·с).

2) Рост (распространение) цепи – присоединение молекул макрорадикалов к молекулам мономера. Кинетические уравнения, характеризующие эту стадию, в общем виде имеют вид (3):

$$P_n^* + M \xrightarrow{k_p} P_{n+1}^*, \qquad (3)$$

где  $P_n^*$ ,  $P_{n+1}^*$  – концентрация макрорадикалов с n, n+1 мономерными остатками, моль/м<sup>3</sup>;  $k_p$  – константа скорости роста цепи, м<sup>3</sup>/(моль·с).

Первые две рассмотренные стадии процесса характерны как для синтеза ПММА, так и для ПС. Третья стадия процесса – обрыв цепи – у рассматриваемых процессов протекает по-разному.

3) Обрыв цепи – активные макрорадикалы, присоединяющие молекулы мономера, исчезают из реакционной смеси, либо заменяются на неактивные. Для процесса синтеза ПММА обрыв цепи происходит по механизму диспропорционирования (4), а для процесса синтеза ПС характерна рекомбинация двух макрорадикалов (5):

$$P_n^* + P_m^* \xrightarrow{k_{td}} D_n + D_m, \qquad (4)$$

$$P_n^* + P_m^* \xrightarrow{k_{tr}} D_{n+m}, \tag{5}$$

где литеры *m* и *n* обозначают соответствующий мономерный остаток;  $k_{td}$  – константа скорости обрыва цепи в результате диспропорционирования,  $M^3/(MOND\cdot c)$ ;  $k_{tr}$  – константа скорости обрыва цепи в результате рекомбинации,  $M^3/(MOND\cdot c)$ ;  $D_n$ ,  $D_m$ ,  $D_{n+m}$  – концентрация «мертвого» полимера с *n*, *m*, n+m мономерными остатками, моль/ $M^3$ .

На основании приведенных кинетических схем для процессов синтеза ПММА и ПС разные исследователи [8-12] предлагают применять разные математические модели. Все перечисленные ниже модели справедливы для случая применения пероксида бензоила в качестве инициатора.

Так, для описания процесса радикальной полимеризации стирола известны модель Сантоса [10], описывающая степень конверсии мономера и инициатора и модель Куртиану [8] – более слож-

ная по своей структуре, но позволяет отслеживать момент распределения активных цепей.

Для описания процесса полимеризации метилметакрилата известны модели Куртиану [9, 11], отличающиеся механизмом учета гельэффекта и модель Чжоу [12].

Математические модели [8-12] описывают один и тот же процесс синтеза ПС и ПММА с одинаковыми условиями его протекания. Однако в силу ряда причин использование подобных моделей может не дать адекватного результата. Рассмотрим ключевые недостатки рассмотренных моделей.

Во-первых, это обилие эмпирических констант, которые у каждого исследователя имеют не просто разные значения, а отличаются на порядки! Для примера, в моделях процесса синтеза ПС для константы скорости распада инициатора *k*<sub>d</sub> в модели Куртиану приведено значение: 1,2·10<sup>13</sup>·exp(-120000/RT), в то время как в модели Сантоса это же значение:  $1,4 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-125700/RT)$ . Подобные различия характерны также для значений константы скорости роста цепи k<sub>p</sub>: в случае модели Куртиану 1,051·10<sup>4</sup>·exp(-29580/RT) и для модели Сантоса 1,89·10<sup>9</sup>·exp(-43516/RT). Для константы скорости обрыва цепи k<sub>t</sub> выражения имеют  $1.26 \cdot 10^{6} \cdot \exp(-7040/RT)$  и  $6.52 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-7040/RT)$ вил: 37114/RT) соответственно для моделей Куртиану и Сантоса. Аналогичная ситуация наблюдается для моделей синтеза ПММА.

Такая большая разница в принятых значениях констант объяснима сложностью описания кинетики радикальной полимеризации вследствие явно выраженного нелинейного характера протекания процесса. Причиной такой нелинейности является гель-эффект, происходящий из-за лавинообразного увеличения вязкости среды.

Во-вторых, во всех моделях с целью упрощения пренебрегают изменением (в меньшую сторону) эффективности инициатора f во времени. В каждой из моделей соответствующее значение fпринимается равным 0,6.

В-третьих, проводя численное интегрирование уравнений моделей, приведенных в [8-12], можно заметить плохую согласованность результатов между ними [13, 14]. В частности, для кривых степени конверсии мономера у моделей Сантоса и Чжоу наблюдается почти полное отсутствие гель-эффекта, в то время как модели Куртиану учитывают очень сильный гель-эффект как для случая синтеза ПС, так и ПММА.

Известны работы, цель которых заключалась в упрощении существующих моделей кинетики полимеризации стирола [15] и метилметакрилата [16] с использованием методов факторного анализа. Было установлено, что с достаточной степенью точности для моделей Куртиану [8] и [9] в интересующей области пространства эксперимента можно получить эмпирическое выражение для степени конверсии мономера, содержащее всего 6 эмпирических констант, в то время как модели [8-12] включают в себя более 15 таких констант. Использование подобного выражения существенно упрощает задачу моделирования кинетики, однако не отменяет того факта, что методика получения таких эмпирических зависимостей очень сложна и требует проведения множества вычислительных операций.

Таким образом, становится очевидным вывод о нецелесообразности использования дифференциальных уравнений для описания столь сложного процесса, как радикальная полимеризация и необходимости создания более простых по своей внутренней структуре адекватных моделей кинетики процессов синтеза ПС и ПММА.

# МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Одной из альтернатив моделирования с помощью дифференциальных уравнений является создание нейро-нечетких моделей (ННМ), основанных на принципах нечеткой логики и нечетких множеств, впервые предложенной Лотфи Заде [17, 18]. Основным свойством нечетких множеств является возможность аппроксимировать любую дифференцируемую функцию с любой, наперед заданной, точностью [19]. Таким образом, имеется возможность создания адекватной ННМ кинетики процессов синтеза ПС и ПММА для наиболее часто используемых начальных условий протекания этих процессов.

В качестве начальных условий протекания процесса используем начальную концентрацию инициатора  $I_0$ , моль/м<sup>3</sup> и заданную температуру процесса T, °С:

- для процесса синтеза ПММА

$$I_0 = 20 - 40$$
 моль/м<sup>3</sup>,  $T = 60 - 90$  °C;

- для процесса синтеза ПС

 $I_0 = 30 - 70$  моль/м<sup>3</sup>, T = 70 - 100 °C.

Рассмотрим методику получения ННМ на примере процесса синтеза ПММА. Для создания ННМ необходимо получить набор обучающих выборок, представляющих собой двумерные массивы данных. Они состоят из 2 столбцов и включают в себя вектор данных изменения степени конверсии соответствующего мономера  $x_m(t)$  (2 столбец, выход будущей ННМ) в зависимости от

вектора времени t (1 столбец, вход будущей HHM).

Получим 12 обучающих выборок с разными начальными условиями протекания процесса синтеза ПММА, например:  $I_0 = 20$  моль/м<sup>3</sup>, T = 60 °C;  $I_0 = 30$  моль/м<sup>3</sup>, T = 70 °C и т.д.

Векторы данных о степени конверсии мономера  $x_m(t)$  получим, проведя серию из 12 экспериментов на лабораторном реакторе, описание которого приведено в [20, 21]. Во время каждого процесса синтеза ПММА при разных сочетаниях начальных условий через определенный промежуток времени t (~10 мин) брались пробы реакционной смеси из реактора и замерялся % содержания полимера.

Полученные выборки используются для получения первичных ННМ с помощью адаптивной нейро-нечеткой системы вывода ANFIS, являющейся частью пакета MATLAB [22]. В ANFIS для каждой первичной ННМ зададим 20 гауссовых функций принадлежности (ФП) для входной переменной времени. Такое оптимальное количество ФП было выбрано после проведения авторами ряда экспериментов, в результате которых оказалось, что меньшее количество ФП в данном случае крайне негативно сказывается на точности ННМ. Связано это с нелинейным характером исходной кривой степени конверсии мономера  $x_m(t)$ . С другой стороны, использование числа ФП больше 20 хотя и увеличивает точность ННМ, но незначительно, а вместе с увеличением числа ФП существенно осложняется процесс построения HHM.

Используя 12 первичных ННМ с 1 входом и 1 выходом, создадим .fis файл общей ННМ со следующей структурой:

 модель имеет 3 входные переменные (время, температура, начальная концентрация инициатора) и 1 выходную переменную – степень конверсии мономера;

- диапазон изменения переменной «время» [0;10000], для ее лингвистического описания использовано 20 равномерно распределенных гауссовых  $\Phi\Pi$ , пересекающихся в точке со значением  $\alpha = 0,5$ ;

- диапазон изменения переменной «температура» [55;95], для ее лингвистического описания использовано 4 равномерно распределенных треугольных  $\Phi\Pi$ , пересекающихся в точке со значением  $\alpha = 0,5$ ;

- диапазон изменения переменной «начальная концентрация инициатора» [15;45], для ее лингвистического описания использовано 3 равномерно распределенных гауссовых  $\Phi\Pi$ , пересекающихся в точке со значением  $\alpha = 0.5$ ;

- выходная переменная модели представляет собой набор констант, рассчитанных с помощью ANFIS в 12 первичных HHM.

База знаний ННМ включает в себя 240 лингвистических правил, записанных по принципу:

ЕСЛИ «t = ... сек» И «T = ... °С» И « $I_0 = ...$ моль/м<sup>3</sup>», ТО « $x_m(t) = ...$ »

Фрагмент базы знаний разработанной ННМ имеет вид:

if (*t* is 0) and (*T* is 60) and ( $I_0$  is 20) then ( $x_m$  is T60I20t1) (1);

if (*t* is 520) and (*T* is 60) and ( $I_0$  is 20) then ( $x_m$  is T60I20t2) (1);

.....

if (*t* is 9474) and (*T* is 90) and ( $I_0$  is 40) then ( $x_m$  is T90I40t19) (1);

if (*t* is 9985) and (*T* is 90) and ( $I_0$  is 40) then ( $x_m$  is T90I40t20) (1);

где индекс «1» в конце каждого правила означает его вес.

На рис. 1 приведена трехмерная поверхность вывода этой ННМ в координатах «Время процесса t – Температура процесса T – Степень конверсии мономера  $x_m(t)$ ». Данный рисунок получен с использованием Fuzzy Logic Toolbox в среде MATLAB.



Рис. 1. Окно «Surface Viewer» в Fuzzy Logic Toolbox Fig. 1. «Surface Viewer» window in a Fuzzy Logic Toolbox

По виду рис. 1 можно заметить, что поверхность вывода представляет собой сплошную нелинейную поверхность, что позволяет нам проводить имитационное моделирование процесса в условиях, отличных от заданных изначально в виде обучающих выборок – что является несомненным плюсом разработанных ННМ.

Полностью аналогичным образом была реализована ННМ для процесса синтеза ПС.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для проверки адекватности созданных ННМ был проведен сравнительный анализ результатов имитационного моделирования этих ННМ в MATLAB Simulink с результатами проведения экспериментов в лабораторном реакторе. Так, для процесса синтеза ПММА проверим точность ННМ при следующих исходных данных:  $I_0 =$ = 27 моль/м<sup>3</sup>, T = 78 °C; для процесса синтеза ПС проверим точность ННМ при следующих исходных данных:  $I_0 = 55$  моль/м<sup>3</sup>, T = 93 °C. Результаты сравнения для модели процесса синтеза ПММА приведены на рис. 2а, для модели процесса синтеза ПС – на рис. 26.





Fig. 2. Conversion curve a – for methyl methacrylate  $\delta$  – for styrene (dots shows data taken from laboratory reactor, solid lined shows neuro-fuzzy model curve) Результаты сравнительного анализа показывают, что в обоих примерах наблюдается хорошая сходимость результатов. Максимальное по модулю значение относительной ошибки составило 4% и 5% соответственно для моделей процесса синтеза ПММА и ПС. Кроме того, на полученных кривых наглядно отображается явление гельэффекта; заметно, что в процессе синтеза ПММА (рис. 2a) он проявляется при значительно меньших степенях конверсии мономера, чем при синтезе ПС (рис. 2б), что согласуется с теоретическими основами кинетики этих процессов.

#### выводы

Реализованные в данной работе нейронечеткие модели процессов радикальной полиме-

### ЛИТЕРАТУРА

- Dhiraj K.G., Christophe A.S., Hoarau Y., Parida D., Bouquey M., Muller R. Analytical solution of free radical polymerization: applications - implementing gel effect using ccs model. *Macromolecules*. 2014. V. 47. N 23. P. 8178-8189. DOI: 10.1021/ma501251j.
- Dhiraj K.G., Christophe A.S., Hoarau Y., Parida D., Bouquey M., Muller R. Analytical solution of free radical polymerization: applications- implementing gel effect using ak model. *Macromolecules*. 2014. V. 47. N 21. P. 7370-7377. DOI: 10.1021/ma501413m.
- Devadoss D.E., Volpert V.A. Modeling isothermal freeradical frontal polymerization with gel effect using free volume theory, with and without inhibition. *J. Math. Chem.* 2006. V. 39. N 1. P. 73-105. DOI: 10.1007/s10910-005-9006-4.
- 4. Савельянов В.П. Общая химическая технология полимеров. М.: ИКЦ «Академкнига». 2007. 336 с.
- Oravec J., Bakošová M. Robust model-based predictive control of exothermic chemical reactor. *Chem. Pap.* 2015. V. 69. N 10. P. 1389-1394. DOI: 10.1515/chempap-2015-0146.
- Lucia S., Finkler T., Engell S. Multi-stage nonlinear model predictive control applied to a semi-batch polymerization reactor under uncertainty. *J. Process Control.* 2013. V. 23. N 9. P. 1306-1319. DOI: 10.1016/j.jprocont.2013.08.008.
- 7. Alipoor M. Fuzzy temperature control in a batch polymerization reactor using ANFIS method. *Int. J. Eng. and Tech.* 2009. V. 1. P. 7-12. DOI: 10.7763/IJET.2009.V1.2.
- Curteanu S. Modeling and simulation of free radical polymerization of styrene under semibatch reactor conditions. *Cent. Eur. J. Chem.* 2003. V. 40. P. 69-90. DOI: 10.2478/BF02479259.
- Curteanu S., Leon F., Galea D. Alternatives for multiobjective optimization of a polymerization process. J. Appl. Pol. Sc. 2005. V. 100. P. 3680-3695. DOI: 10.1002/app.23205.
- Santos J.C. Comparison of techniques for the determination of conversion during suspension polymerization reactions. *Braz. J. Chem. Eng.* 2008. V. 25. N. 2. P. 399-407. DOI: 10.1590/S0104-66322008000200017.
- 11. Curteanu S., Bulacovschi V., Catalin L. Free radical polymerization of methyl methacrylate: modeling and simulation by moment generating function. *Iran. Polymer J.* 1998. V. 7 N 4. P. 225-233.

ризации метилметакрилата и стирола имеют очень простую внутреннюю структуру, в связи с чем легко реализуемы во многих популярных программных средах. Несмотря на это, данные модели показали свою адекватность при проведении сравнительного анализа, поэтому они могут быть эффективно использованы при разработке и отладке современных интеллектуальных систем автоматического управления.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ. Проект № 20-07-00914 «Разработка интеллектуального управления в многоуровневых и распределенных промышленных системах в условиях неустранимой неопределенности и помех».

### REFERENCES

- Dhiraj K.G., Christophe A.S., Hoarau Y., Parida D., Bouquey M., Muller R. Analytical solution of free radical polymerization: applications - implementing gel effect using ccs model. *Macromolecules*. 2014. V. 47. N 23. P. 8178-8189. DOI: 10.1021/ma501251j.
- Dhiraj K.G., Christophe A.S., Hoarau Y., Parida D., Bouquey M., Muller R. Analytical solution of free radical polymerization: applications- implementing gel effect using ak model. *Macromolecules*. 2014. V. 47. N 21. P. 7370-7377. DOI: 10.1021/ma501413m.
- Devadoss D.E., Volpert V.A. Modeling isothermal freeradical frontal polymerization with gel effect using free volume theory, with and without inhibition. *J. Math. Chem.* 2006. V. 39. N 1. P. 73-105. DOI: 10.1007/s10910-005-9006-4.
- 4. **Savelyanov V.P.** General chemical polymer technology. M.: IKTs «Akademkniga». 2007. 336 p. (in Russian).
- Oravec J., Bakošová M. Robust model-based predictive control of exothermic chemical reactor. *Chem. Pap.* 2015. V. 69. N 10. P. 1389-1394. DOI: 10.1515/chempap-2015-0146.
- Lucia S., Finkler T., Engell S. Multi-stage nonlinear model predictive control applied to a semi-batch polymerization reactor under uncertainty. *J. Process Control.* 2013. V. 23. N 9. P. 1306-1319. DOI: 10.1016/j.jprocont.2013.08.008.
- Alipoor M. Fuzzy temperature control in a batch polymerization reactor using ANFIS method. *Int. J. Eng. and Tech.* 2009. V. 1. P. 7-12. DOI: 10.7763/IJET.2009.V1.2.
- Curteanu S. Modeling and simulation of free radical polymerization of styrene under semibatch reactor conditions. *Cent. Eur. J. Chem.* 2003. V. 40. P. 69-90. DOI: 10.2478/BF02479259.
- Curteanu S., Leon F., Galea D. Alternatives for multiobjective optimization of a polymerization process. J. Appl. Pol. Sc. 2005. V. 100. P. 3680-3695. DOI: 10.1002/app.23205.
- Santos J.C. Comparison of techniques for the determination of conversion during suspension polymerization reactions. *Braz. J. Chem. Eng.* 2008. V. 25. N. 2. P. 399-407. DOI: 10.1590/S0104-66322008000200017.
- 11. **Curteanu S., Bulacovschi V., Catalin L.** Free radical polymerization of methyl methacrylate: modeling and simulation by moment generating function. *Iran. Polymer J.* 1998. V. 7 N 4. P. 225-233.

- Zhou F., Guptam S.K., Ray A.K. Modeling of the sheetmolding process for poly(methylmethacrylate). *J. Appl. Pol. Sci.* 2001. V. 81. P. 1951–1971.
- Лопатин К.Г., Лопатин А.Г., Вент Д.П., Савельянов В.П. Сравнение кинетических моделей процесса радикальной полимеризации метилметакрилата. Изв. Тул. гос. унив. Технич. науки. 2014. № 2. С. 78–83.
- 14. Сафин М.А., Лопатин А.Г., Вент Д.П., Савельянов В.П. Сравнение кинетических моделей процесса суспензионной полимеризации стирола. Изв. Тул. гос. унив. Технич. науки. 2012. № 3. С. 321–325.
- Вент Д.П., Савельянов В.П., Лопатин А.Г., Сафин М.А. Прикладная кинетика суспензионной полимеризации стирола. *Теор. основы хим. технол.* 2014. Т. 48. № 3. С. 356–360. DOI: 10.7868/S0040357114030191.
- Вент Д.П., Лопатин А.Г., Савельянов В.П., Брыков Б.А. Факторный анализ кинетики радикальной полимеризации метилметакрилата. *Теор. основы хим. технол.* 2018. Т. 52. № 5. С. 555–561. DOI: 10.1134/S0040357118050135.
- Zadeh L. Fuzzy sets. *Information and Control.* 1965. V. 8. N 3. P. 338-353.
- Zadeh L. From computing with numbers to computing with words - from manipulation of measurements to manipulation of perceptions. *Int. J. App. Math Comp. Sc.* 2000. V. 12. N 3. DOI: 10.1007/10720181\_1.
- Castro J.L. Fuzzy logic controllers are universal approximators *IEEE Transact. on Syst. Man Cyb.* 1995. V. 25. N 4. P. 629-635. DOI: 10.1109/21.370193.
- Сафин М.А., Лопатин А.Г., Вент Д.П., Савельянов В.П. Математическая модель пилотной установки процесса суспензионной полимеризации стирола. Изв. Тул. гос. унив. Технич. науки. 2013. № 2. С. 267–277.
- Вент Д.П., Лопатин А.Г., Лопатин К.Г., Лопатина С.В. Динамические особенности лабораторного реактора радикальной полимеризации метилметакрилата. Вест. Межд. Акад. Сист. Иссл. 2014. Т. 16. № 1. С. 55-58.
- 22. Дьяконов В., Круглов В. Математические пакеты расширения МАТLАВ. Специальный справочник. СПб.: Питер. 2001. 480 с.

- Zhou F., Guptam S.K., Ray A.K. Modeling of the sheetmolding process for poly(methylmethacrylate). *J. Appl. Pol. Sci.* 2001. V. 81. P. 1951–1971.
- Lopatin K.G., Lopatin A.G., Vent D.P., Savelyanov V.P. Comparison of the kinetic models of the process of radical polymerization of methyl methacrylate. *Izv. Tul. Gos. Univ. Tekhn. Nauki.* 2014. N 2. P. 78–83 (in Russian).
- Safin M.A., Lopatin A.G., Vent D.P., Savelyanov V.P. Comparison of the kinetic models of styrene suspension polymerization process. *Izv. Tul. Gos. Univ. Tekhn. Nauki.* 2012. N 3. P. 321–325 (in Russian).
- Vent D.P., Savelyanov V.P., Lopatin A.G., Safin M.A. Applied kinetics of styrene suspension polymerization. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2014. V. 48. N 3. P. 332–336. DOI: 10.1134/S0040579514030191.
- Vent D.P., Lopatin A.G., Savelyanov V.P., Brykov B.A. Factorial analysis of the kinetics of radical polymerization of methyl methacrylate. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2018. V. 52. N 5. P. 825–831. DOI: 10.1134/S004057951805041X.
- Zadeh L. Fuzzy sets. *Information and Control.* 1965. V. 8. N 3. P. 338-353.
- Zadeh L. From computing with numbers to computing with words - from manipulation of measurements to manipulation of perceptions. *Int. J. App. Math Comp. Sc.* 2000. V. 12. N 3. DOI: 10.1007/10720181\_1.
- Castro J.L. Fuzzy logic controllers are universal approximators. *IEEE Transact. on Syst. Man Cyb.* 1995. V. 25. N 4. P. 629-635. DOI: 10.1109/21.370193.
- Safin M.A., Lopatin A.G., Vent D.P., Savelyanov V.P. Mathematical model of a pilot installation of styrene suspension polymerization process. *Izv. Tul. Gos. Univ. Tekhn. Nauk.* 2013. N 2. P. 267–277 (in Russian).
- Vent D.P., Lopatin A.G., Lopatin K.G., Lopatina S.V. Dynamic features of the laboratory reactor of radical polymerization of methyl methacrylate. *Vest. Mezh.*. *Akad. Sist. Issled.* 2014. V. 16. N 1. P. 55-58 (in Russian).
- 22. **Dyakonov V., Kruglov V.** MATLAB math expansion packs. Special Handbook. SPb: Piter. 2001. 480 p. (in Russian).

Поступила в редакцию 05.06.2019 Принята к опубликованию 27.04.2020

Received 05.06.2019 Accepted 27.04.2020