

УДК 541.64:547.313.4

РАСЧЕТ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ
ИЗОБУТИЛЕНА КАК БЫСТРОЙ РЕАКЦИИ

*Берлин А.Л., Минскер К.С., Сангалов Ю.А.,
Ошмян В.Г., Свинухов А.Г., Кириллов А.П.,
Ениколопян Н.С.*

Проведен математический анализ кинетики быстрой полимеризации изобутилена, осуществляющейся по непрерывной схеме, с учетом особенностей свойств реакционной среды и технологических параметров проведения реакции. Показано, что быстрые реакции с локальным вводом катализатора протекают по отдельным зонам в виде «факела» с различными температурными и кинетическими параметрами, что сопровождается образованием полимера с повышенной молекулярной неоднородностью. Проведено сравнение расчетных данных с экспериментальными и обнаружено их соответствие.

Экспериментальные данные, полученные в работе [1], положены в основу математического описания процесса быстрой полимеризации изобутилена.

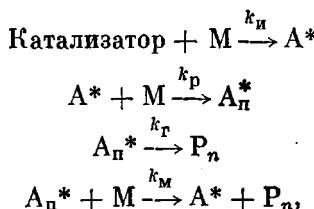
Постановка задачи и методика расчета для теоретического изучения быстрой полимеризации. Реакционная зона аппарата для расчетов выбрана из лабораторной модели методом масштабного переноса, т. е. принимались те же соотношения геометрических размеров аппарата, скоростей ввода реагентов, а также принцип ввода катализатора.

Высокие скорости потока в зоне реакции ($1-10 \text{ м/сек}$) обеспечивают турбулентное смешение раствора катализатора ($c_0=10^{-4}-10^{-1} \text{ моль/л}$) и смеси мономера ($[M]_0=0,01-1 \text{ моль/л}$), полимера и растворителя. Значение критерия Re , вычисленного для данной линейной скорости потока, его плотности ($0,5-1 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$), динамического коэффициента вязкости ($5 \cdot 10^{-4} \text{ кг/м\cdot сек}$) и диаметра трубы ($0,1 \text{ м}$), составляет $\sim 10^4$. Поэтому в качестве коэффициентов массо- и теплопередачи можно использовать коэффициент турбулентной диффузии, равный коэффициенту температуропроводности

$$D_t = \frac{\lambda_t}{\rho C}, \quad (1)$$

где λ_t , C , ρ — средние теплопроводность, теплоемкость и плотность реакционной среды соответственно.

Согласно данным работы [2] и в соответствии с полученными экспериментальными данными, выбрана следующая кинетическая схема:



где М – мономер, A^* и A_{n^*} – активный центр мономерный и полимерный соответственно, P_n – мертвая цепь; k_i , k_p , k_r и k_m – константы скоростей инициирования, роста, гибели и передачи цепи через мономер.

Предполагается, что скорость инициирования достаточно велика ($k_i \gg k_p$), хотя исходные уравнения и их решения не изменятся, если предполагать относительно медленное инициирование и стационарность по активным центрам. Основной реакцией, определяющей величины ММ и ММР в широкой области температур и особенно при высоких температурах, является передача цепи на мономер. Поэтому средняя степень полимеризации v_n и ММР $\rho_n(j)$ в каждом малом элементе реакционного объема определяется лишь температурой

$$v_n = k_p/k_m \text{ и } \rho_n(j) = 1/v_n e^{-j/v_n} \quad (2)$$

В связи с этим изменения ММ и ММР продукта отражают температурное поле реакционной зоны.

На основании вышеизложенного и в соответствии с экспериментальными данными работы [1] уравнения, описывающие изменения концентрации мономера и активных центров, а также температуры, имеют вид

$$\frac{\partial [M](x, r)}{\partial t} = D_t \frac{\partial^2 [M]}{\partial r^2} + \frac{D_t}{r} \frac{\partial [M]}{\partial r} + D_t \frac{\partial^2 [M]}{\partial x^2} - V \frac{\partial [M]}{\partial x} - k_p^0 [M] A^* \exp(-E_p/RT) \quad (3)$$

$$\frac{\partial [A^*](x, r)}{\partial t} = D_t \frac{\partial^2 [A^*]}{\partial r^2} + \frac{D_t}{r} \frac{\partial [A^*]}{\partial r} + D_t \frac{\partial^2 [A^*]}{\partial x^2} - V \frac{\partial [A^*]}{\partial x} - k_r [A^*] \exp(-E_r/RT) \quad (4)$$

$$\rho c \frac{\partial T(x, r)}{\partial t} = \lambda_t \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\lambda_t}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \lambda_t \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - V \rho c \frac{\partial T}{\partial x} + q k_p^0 M A^* \exp(-E_p/RT) \quad (5)$$

со следующими граничными условиями:

$$T(0, r) = T_0$$

$$[M](0, r) = \begin{cases} [M]_0 & \text{при } R > r > r_0 \\ 0 & \text{при } r < r_0 \end{cases}$$

$$[A^*](0, r) = \begin{cases} 0 & \text{при } R > r > r_0 \\ [A]_0 & \text{при } r < r_0 \end{cases}$$

$$\frac{\partial [M](x, R)}{\partial r} = \frac{\partial [A^*](x, R)}{\partial r} = \frac{\partial [A^*](x, 0)}{\partial r} = \frac{\partial [M](x, 0)}{\partial r} = \frac{\partial T(x, 0)}{\partial r} = 0$$

$$\frac{\partial T(x, R)}{\partial r} = \alpha \{T(x, R) - T_1\},$$

где x и r – координаты по длине и радиусу реакционной зоны; T – температура; T_0 и T_1 – температура вводимых реагентов и внешнего термостатирования; α – коэффициент теплопередачи через стенку реактора; q – тепловой эффект реакции полимеризации (для изобутилена 71,9 кДж/моль); $k_p = k_p^0 \exp(-E_p/RT)$, $k_r = k_r^0 \exp(-E_r/RT)$, $k_m = k_m^0 \exp(-E_m/RT)$ – константы скоростей роста, гибели и передачи цепи на мономер соответственно; k_p^0 , k_r^0 , k_m^0 и E_p , E_r , E_m – предэкспоненты и энергии активации этих реакций.

Принимая во внимание стационарный характер процесса, т. е.

$$\frac{\partial M(x, r, t)}{\partial t} = \frac{\partial A^*(x, r, t)}{\partial t} = \frac{\partial T(x, r, t)}{\partial t} = 0$$

и пренебрегая диффузионным переносом вдоль оси x по сравнению с линейным со скоростью v , решение квазилинейных параболических уравнений (3) – (5) упрощается путем отбрасывания слагаемых

$$D_r \frac{\partial^2 [M]}{\partial x^2}, \quad D_r \frac{\partial^2 [A^*]}{\partial x^2}, \quad D_r \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

В результате расчет математической модели сводится к решению краевой задачи для системы уравнений (3) – (5). Численное решение задачи производилось с помощью неявной разностной схемы. Аппроксимация дифференциальных уравнений разностными имеет порядок $O(\tau+h)^2$, где τ, h – шаги по x и r соответственно, причем последние задаются точно, а краевые условия аппроксимируются с точностью $O(h)$. Разностная система уравнений решается по методу итераций. Весовую функцию распределения $\rho_w(j)$ по степеням полимеризации на выходе из реактора длиной l и моменты распределения I_0 – I_3 вычисляли по формулам

$$\rho_w(j) = \int_0^l \int_0^R \frac{j}{v_n^2} \exp(-j/v_n) k_p[A^*][M] \exp(-E_p/RT) 2\pi r dr dx, \quad (6)$$

где

$$v_n = \frac{k_p}{k_m} = \frac{k_p^0}{k_m^0} \exp[-(E_p - E_m)/RT]$$

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_0^\infty \frac{\rho_w(j)}{j} dj = \int_0^R \int_0^l k_m^0 [A^*] [M] \exp(-E_m/RT) 2\pi r dr dx = \\ &= \int_0^R \int_0^l \frac{1}{v_n} k_p^0 [A^*] [M] \exp(-E_p/RT) 2\pi r dr dx \end{aligned} \quad (7)$$

$$I_1 = \int_0^\infty j \rho_w(j) dj = \int_0^R \int_0^l 2v_n k_p^0 [A^*] [M] \exp(-E_p/RT) 2\pi r dr dx = \quad (8)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^\infty j^2 \rho_w(j) dj = \int_0^R \int_0^l 2v_n^2 k_p^0 [A^*] [M] \exp(-E_p/RT) 2\pi r dr dx = \\ &= \int_0^R \int_0^l \frac{(k_p^0)^2}{k_m^0} [A^*] [M] \exp[-(2E_p - E_m)/RT] 4\pi r dr dx \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} I_3 &= \int_0^\infty j^3 \rho_w(j) dj = \int_0^R \int_0^l 6v_n^3 k_p^0 [A^*] [M] \exp(-E_p/RT) 2\pi r dr dx = \\ &= \int_0^R \int_0^l 6 \frac{(k_p^0)^3}{(k_m^0)^2} [A^*] [M] \exp[-(3E_p - E_m)/RT] 2\pi r dr dx \end{aligned} \quad (10)$$

$\bar{v}_n = I_1/I_0$; $\bar{v}_w = I_2/I_1$; $\bar{v}_z = I_3/I_2$ — среднечисленная, средневесовая и z — средняя степень полимеризации продукта. Интегралы по $x, r \int \int f(x, r) dx dr$ считаются по имеющейся сетке.

Результаты расчета. Анализ процесса быстрой полимеризации. Численные значения E_p и E_r для быстрых процессов катионной полимеризации изобутилена невелики [3]. Поэтому проведены расчеты, не учитывающие температурную зависимость k_p , k_r и D .

Система уравнений (3)–(5), если пренебречь предельной диффузией, приводится к безразмерным координатам путем следующих подстановок

$$\rho = \sqrt{\frac{k_p[M]}{D}} r, \quad x = \frac{k_p[M]_0}{v} x, \quad \theta = \frac{\rho c}{q[M]_0} T,$$

$$a = \alpha \sqrt{\frac{D}{k_p[M]_0}}, \quad \frac{[M]}{[M]_0} = m, \quad \frac{[A^*]}{[A]_0} = a. \text{ Тогда имеем}$$

$$[A]_0/[M]_0 = c_0, \quad \frac{k_r}{k_p[M]_0} = \chi$$

$$\frac{\partial^2 m}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial m}{\partial \rho} - \frac{\partial m}{\partial x} - mac_0 = 0 \quad (11)$$

$$\frac{\partial^2 a}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial a}{\partial \rho} - \frac{\partial a}{\partial x} - \chi a = 0 \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \theta}{\partial \rho} - \frac{\partial \theta}{\partial x} - mac_0 = 0 \quad (13)$$

с соответствующими граничными условиями.

В этом случае увеличение скорости v соответствует лишь изменению масштаба по оси x ; изменение коэффициента D — масштаба по r и соответствующего изменения коэффициента α . Изменение k_p и $[M]_0$ также эквивалентно некоторому искажению масштабов по обеим осям. Кроме того, существенны не абсолютные значения кинетических констант, а лишь их отношения.

Произведенные преобразования позволяют обобщить приведенные ниже результаты расчета на более широкий круг значений параметров.

На рис. 1 приведены поля* температур, концентраций мономера и катализатора, а на рис. 2 поля скорости полимеризации для различных значений D , k_p и α . Из рисунков видно, что процесс проходит, как и в эксперименте [1], в основном на входе катализатора в реакционную зону при его смешении с раствором мономера. Температура и скорость в зоне реакции оказываются переменными и зависящими от начальных концентраций реагентов, величины D и в некоторой степени от α . Хотя максимум скорости полимеризации наблюдается вблизи зоны ввода катализатора, реакция продолжается достаточно далеко вдоль оси x , что приводит к изменению выхода и свойств полимера по мере удаления от зоны максимума. Образование полимера в разных точках реакционного объема (соответственно при различных температурах) приводит к уширению ММР полимера по сравнению с наиболее вероятным ММР $[\rho_n(j) = 1/\bar{P}_n \exp(-j/\bar{P}_n)]$, характерным для изотермических условий.

Поскольку средняя ММ и ММР полимерного продукта определяется реакцией передачи цепи на мономер, основным фактором, влияющим на эти характеристики, является разница энергий активации реакций пере-

* Здесь и далее под полем подразумевается изменение параметра в условных единицах по длине и ширине реакционной зоны.

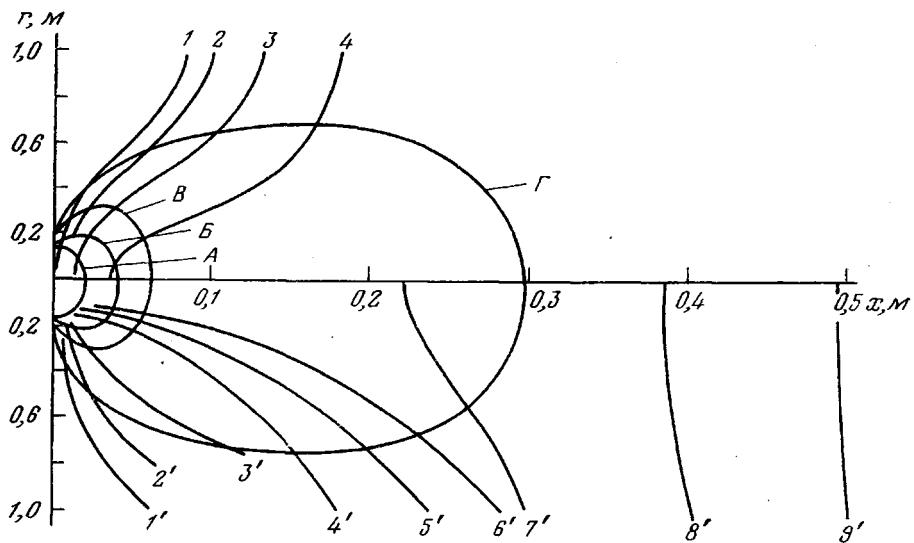


Рис. 1. Поля температур, концентраций мономера и катализатора:

$k_p = 10^5 \text{ л/моль\cdotсек}$; $k_{fr} = 1 \text{ сек}^{-1}$; $[M]_0 = 1 \text{ моль/л}$, $c_0 = 10^{-2} \text{ моль/л}$, $D = 1 \text{ м}^2/\text{сек}$, $\alpha = 0$; $T, ^\circ\text{C}: 310 (1)$, $313 (2)$, $320 (3)$, $330 (4)$; $[M]_0, \text{ моль/л}: 0,9 (1'), 0,7 (2'), 0,5 (3'), 0,3 (4'), 0,2 (5'), 0,15 (6')$, $0,085 (7')$, $0,035 (8')$, $0,016 (9')$; $c, \text{ моль/л}: 1 \cdot 10^{-4} (A)$, $5 \cdot 10^{-4} (B)$, $1 \cdot 10^{-3} (B)$, $2 \cdot 10^{-3} (\Gamma)$.

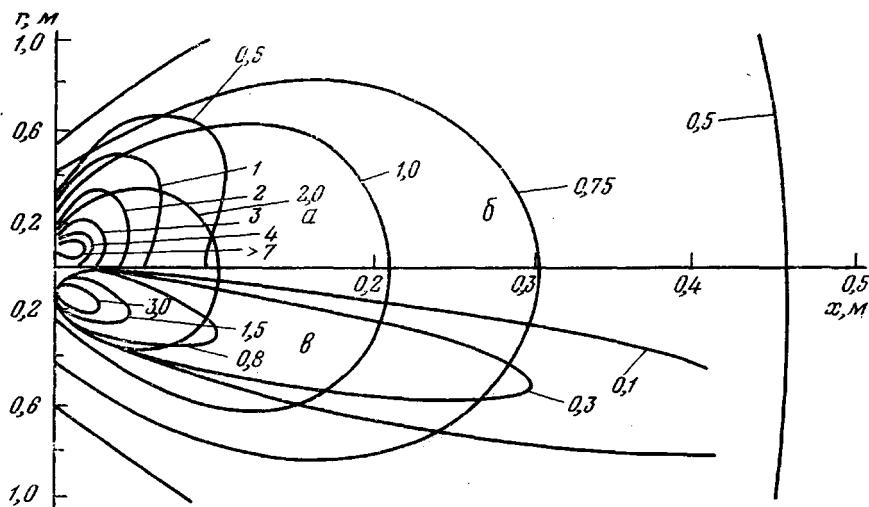


Рис. 2. Поля скоростей полимеризации изобутилена для различных значений:

$a - k_p = 10^5 \text{ л/моль\cdotсек}$, $(E_m - E_p)/R = 5000^\circ \text{К}$, $D = 1 \text{ м}^2/\text{сек}$, $\alpha = 0$; $\beta - k_p = 10^4 \text{ л/моль\cdotсек}$, $(E_m - E_p)/R = 5000^\circ \text{К}$, $D = 1 \text{ м}^2/\text{сек}$, $\alpha = 0$; $\delta - k_p = 10^4 \text{ л/моль\cdotсек}$, $(E_m - E_p)/R = 2000^\circ \text{К}$, $D = 0,1 \text{ м}^2/\text{сек}$, $\alpha = 10$; $k_{fr} = 1 \text{ моль/л}$, $[M]_0 = 1 \text{ моль/л}$, $c_0 = 10^{-2} \text{ моль/л}$. Цифры на кривых — значения параметров скоростей в условных единицах.

дачи цепи и роста $E_m - E_p$. На рис. 3 показаны зависимости \bar{v}_w/\bar{v}_n и \bar{v}_z/\bar{v}_w от $E_m - E_p$, а на рис. 4 — вид функции ММР и ее анаморфозы в полулогарифмических координатах $\lg \rho_n(j)$ от j (кривые 5 и 6). Как видно, для заметного отклонения ММР от наиболее вероятного (прямая на рис. 4) значения E_m и E_p должны отличаться по меньшей мере на несколько единиц, что соответствует литературным данным для полимеризации изобутилена [2].

Увеличение коэффициента α при постоянстве остальных параметров процесса вызывает некоторое сужение ММР, что соответствует сглаживанию температурного поля. Однако заметное влияние теплопередача через

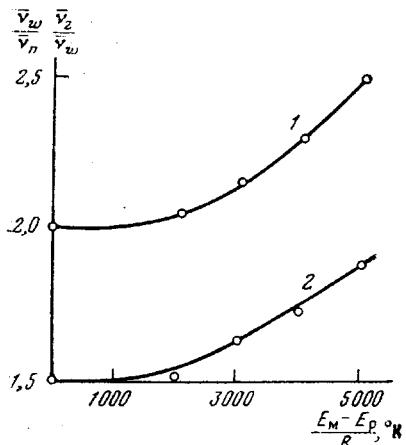


Рис. 3. Зависимость \bar{v}_w/\bar{v}_n (1) и \bar{v}_z/\bar{v}_w (2) от E_m-E_p/R для $k_p=10^5$ л/моль·сек, $k_r=1$ сек $^{-1}$, $[M]_0=1$ моль/л, $c_0=10^{-2}$ моль/л, $D=1$ м 2 /сек, $\alpha=0$, $l=1$ м

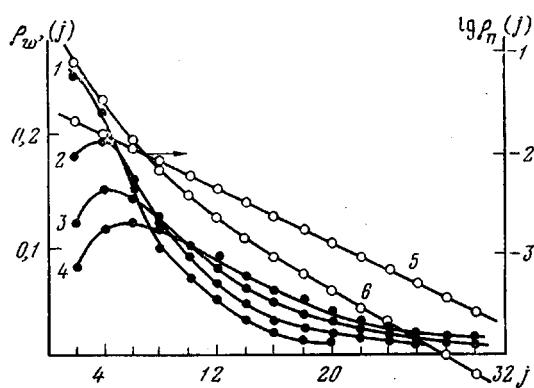


Рис. 4. Функции ММР полиизобутилена для различных E_m-E_p/R (1 – 5000, 2 – 4000, 3 – 3000, 4 – 2000) и их полулогарифмические анаморфозы (5 – 2000, 6 – 5000); расчетные параметры те же, что и на рис. 3

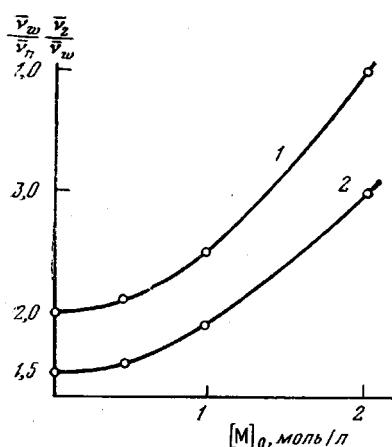


Рис. 5. Зависимость \bar{v}_w/\bar{v}_n (1) и \bar{v}_z/\bar{v}_w (2) от концентрации мономе-ра; $k_p=10^5$ л/моль·сек, $k_r=1$ сек $^{-1}$, $c_0=10^{-2}$ моль/л, $D=1$ м 2 /сек, $\alpha=0$, $E_m-E_p/R=5000^\circ$ К, $l=1$ м

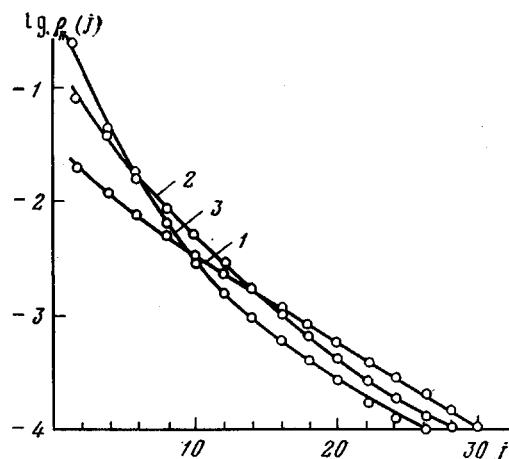


Рис. 6. Полулогарифмические анаморфозы функций ММР полиизобутилена для различных концентраций мономера: 0,5 (1), 1 (2), 2 моль/л (3)

боковую стенку может оказаться лишь в случае небольших размеров реакционного сосуда и больших значений коэффициентов D и λ .

Температурное поле в зоне реакции определяется скоростью процесса и количеством выделяющегося тепла, а следовательно, концентрацией мономера и катализатора. Влияние концентрации мономера на параметры ММР и функции ММР в координатах $lg \rho_n(j)$ от j приведено на рис. 5 и 6. Из этих рисунков следует, что ММР заметно расширяется при увеличении концентрации мономера, причем главным образом за счет появления большого количества низкомолекулярной фракции. Аналогичные закономерности наблюдаются при варьировании концентрации катализатора (табл. 1).

Как оказалось, увеличение концентрации катализатора кроме ожидаемого увеличения выхода полимера приводит к возрастанию температуры и градиента температур в зоне реакции, а следовательно, и к падению средней ММ и уширению ММР (увеличивается отношение \bar{v}_w/\bar{v}_n). Из данных

Таблица 1

Зависимость конверсии мономера и параметров ММР полимера от концентрации катализатора *

Опыт, №	Концентрация катализатора, моль/л	Конверсия мономера, %	\bar{v}_n	\bar{v}_w	\bar{v}_w/\bar{v}_n	\bar{v}_z/\bar{v}_w
1	$1 \cdot 10^{-1}$	99,7	3,6	8,9	2,46	1,94
2	$6 \cdot 10^{-2}$	98,0	3,8	9,3	2,46	1,93
3	$3 \cdot 10^{-2}$	89,5	4,2	10,2	2,41	1,87
4	$1 \cdot 10^{-2}$	60,0	5,6	13,3	2,24	1,70
5	$1 \cdot 10^{-2}$	99,9	4,1	10,3	2,50	1,90
6	$3 \cdot 10^{-3}$	89,2	5,1	12,4	2,42	1,80
7	$1 \cdot 10^{-3}$	53,6	8,0	17,3	2,17	1,62
8	$1 \cdot 10^{-4}$	8,5	13,8	27,6	2,00	1,50

* $k_p = 10^5$ л/моль·сек; $k_r = 10$ сек⁻¹ (для опытов 5–8 $k_r = 1$ сек⁻¹); $[M]_0 = 1$ моль/л; $(E_M - E_p)/R = 5000^\circ K$; $D = 1$ м²/сек; $\alpha = 0$.

Таблица 2

Зависимость конверсии мономера и параметров ММР от значений k_p и k_r *

k_p , л/моль·сек	k_r , сек ⁻¹	\bar{v}_w/\bar{v}_n	\bar{v}_z/\bar{v}_w	Конверсия, %	k_p , л/моль·сек	k_r , сек ⁻¹	\bar{v}_w/\bar{v}_n	\bar{v}_z/\bar{v}_w	Конверсия, %
10^5	1	2,50	1,90	99	10^6	10	2,26	1,94	99,7
10^5	10	2,24	1,70	60	10^4	1	2,17	1,62	53,6
10^6	1	2,46	1,94	100					

* $[M]_0 = 1$ моль/л; $c_0 = 10^{-2}$ моль/л; $(E_M - E_p)/R = 5000^\circ K$; $D = 1$ м²/сек; $\alpha = 0$, $l = 1$ м.

Таблица 3

Зависимость конверсии мономера и параметров ММР от длины реакционной зоны l *

l , м	Конверсия, %	\bar{v}_n	\bar{v}_w	\bar{v}_z	\bar{v}_w/\bar{v}_n	\bar{v}_z/\bar{v}_w
0,1	10,0	9,3	19,8	31,3	2,11	1,58
0,3	27,0	7,6	16,2	26,2	2,14	1,62
0,7	45,7	5,1	12,4	22,5	2,44	1,81
1	53,6	4,2	11,2	21,5	2,66	1,92
3	68,6	3,0	9,4	20,2	3,13	2,17

* $[M]_0 = 2$ моль/л, $c_0 = 10^{-3}$ моль/л, $(E_M - E_p)/R = 5000^\circ K$.

табл. 1 следует, что концентрация катализатора ниже 10^{-4} моль/л будет обеспечивать получение полимера с ММР, близким к наиболее вероятному.

Роль скорости процесса, определяющего градиент температур и как следствие ширину ММР, видна из данных табл. 2.

Данные табл. 2 показывают, что с увеличением соотношения $k_p : k_r$ значения \bar{v}_w/\bar{v}_n и \bar{v}_z/\bar{v}_w также увеличиваются, равно как и конверсия мономера. При этом важность отношения констант, а не их абсолютных величин, демонстрируется близостью значений параметров ММР и выхода полимерного продукта для $k_p : k_r$, равного $10^5 : 1$ и $10^6 : 10$, $10^5 : 10$ и $10^4 : 1$ соответственно.

Из табл. 3 следует, что для всей зоны реакционного объема по мере увеличения конверсии изменяются параметры ММР, причем наиболее за-

метно на расстоянии до 1 м от точки ввода катализатора. Изменение характера кривых весового дифференциального ММР ($\rho_w(j)$) по длине реакционной зоны (рис. 7) указывает на постепенное появление низкомолекулярной фракции (за счет возрастания температуры).

Некоторые следствия. Проведенный анализ быстрых реакций полимеризации показал, что отмечаемые при математическом моделировании эффекты тождественны наблюдаемым экспериментально на примере катионной полимеризации изобутилена в олигоизобутилены с $M=800-1000$ [1].

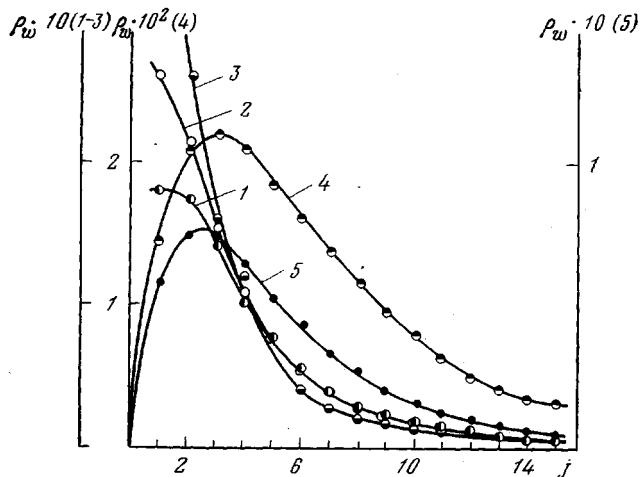


Рис. 7. Вид функций ММР полизобутилена от длины реакционной зоны $l=0,7$ (1), 1 (2), 3 (3), 0,1 (4) и 0,3 м (5)

Сравнение расчетных и экспериментальных данных указывает на возникновение градиента концентрации и температур, т. е. быстрые реакции с локальным вводом катализатора протекают по отдельным зонам в виде «факела» с различными температурными и кинетическими параметрами. Важным следствием неизотермичности процесса является повышение полидисперсности продукта по средней ММ, т. е. ухудшение его качества. Наличие «факела» в быстрых процессах полимеризации, в частности изобутилена, определяет методические и практические приемы их проведения. Так, внешнее термостатирование не является эффективным и ограничивает использование дилатометрии и многих других экспериментальных методов исследования кинетики процесса. Лишь низкие концентрации катализатора (меньше 10^{-4} моль/л) при условии эффективного перемешивания реакционной массы могут обеспечить изотермический характер процесса и получение полимерного продукта с ММР, близким к наиболее вероятному. Однако эти условия трудно реализовать на практике. Из вышеуказанных особенностей быстрых реакций следует, что получение продукта с ММР, близким к наиболее вероятному, в одном аппарате требует ограничения реакционной зоны областью сравнительно невысоких конверсий мономера 50–70%. Это в свою очередь накладывает ограничение на размер самой зоны (размер аппарата), который должен быть подобран исходя из кинетических параметров реакции.

Башкирский государственный университет
им. 40-летия Октября

Институт химии Башкирского филиала
АН СССР

Институт химической физики АН СССР

Поступила в редакцию
31 X 1978

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Берлин, К. С. Минскер, Ю. А. Сангалов, Д. Д. Новиков, Т. И. Позняк, Ю. А. Прочухан, А. П. Кириллов, А. Г. Свинухов, Высокомолек. соед., **B21**, 468, 1979.
 2. Г. А. Михайловский, Кандидатская диссертация, Новосибирск, Институт катализа СО АН СССР, 1976.
 3. J. P. Kennedy, A. Shinkawa, F. Williams, J. Polymer Sci., **9**, A-1, 1551, 1971.
-

CALCULATION AND SIMULATION OF ISOBUTYLENE POLYMERIZATION AS A FAST REACTION

*Berlin At. At., Minsker K. S., Sangalov Yu. A., Oshmyan V. G.,
Svinukhov A. G., Kirillov A. P., Yenikolopyan N. S.*

Summary

The mathematical analysis of the kinetics of fast isobutylene polymerization performed according the continuous scheme has been done with the features of the properties of the reaction medium and technological parameters of the reaction taken into consideration. It was shown that the fast reaction with local injection of the reagent proceed in different zones as «a torch» with different temperature and kinetic parameters thus leading to the formation of a polymer with high molecular heterogeneity. The calculated data were compared with experimental and their correspondence was shown.
