

УДК 519.245
DOI 10.26456/vtchem2022.1.10

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ФОРМИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНО-МАССОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В УСЛОВИЯХ ИНТЕРВАЛЬНОГО ХАРАКТЕРА ИСХОДНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Э.Н. Мифтахов¹, С.А. Мустафина¹,
И.Ш. Насыров², С.И. Мустафина¹

¹ Башкирский государственный университет, г. Уфа

² Открытое акционерное общество «Синтез-Каучук», г. Стерлитамак

Представлено описание методов и алгоритмов, позволяющих проводить исследование кинетической неоднородности полимерных продуктов, получаемых в присутствии микрогетерогенных каталитических систем. Для случая интервального характера исходных экспериментальных данных, полученных в результате проведенного гель-хроматографического анализа, проведена модификация метода решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения. В основе нового метода решения лежит идея использования регуляризирующего оператора, предложенная А.Н. Тихоновым, в совокупности с интервальной постановкой задачи, формируемой из результатов эксперимента. В новой постановке обратная задача формирования молекулярно-массового распределения сведена к задаче линейного программирования, численное решение которой получено с применением итерационного симплекс-метода. Новые методы и алгоритмы апробированы для определения кинетической неоднородности 1,4-цис-полиизопрена, полученного в присутствии титанового катализатора.

Ключевые слова: полиизопрен, обратная задача, молекулярно-массовое распределение, титан, интервал.

Процесс получения синтетического каучука промышленным способом представляет собой сложный механизм ведения последовательных реакций, обеспечивающих непрерывное производство. В зависимости от применяемого типа каталитического комплекса, его состава, способа его приготовления, концентрации реагентов и условий ведения непрерывного процесса образующийся полимерный продукт может обладать богатым комплексом различающихся характеристик, основу которых формируют молекулярные параметры полимера. Молекулярные характеристики определяют потребительские свойства каучука – технологичность при его переработке, и эксплуатационные свойства конечных резиновых

изделий. Вероятностный характер образования макромолекул объясняет неоднородность по молекулярной массе и широкий вид молекулярно-массового распределения образуемого продукта [1, 2]. Лучшие потребительские свойства проявляет синтетический полимер, у которого как правило более узкое молекулярно-массовое распределение и высокая средняя молекулярная масса. В частности, стереорегулярные изопреновые каучуки получают путем полимеризации мономера на литиевых, литийорганических катализаторах или катализаторах Циглера – Натта.

Полимеры, полученные с использованием катализаторов Циглера-Натта, обладают широким молекулярно-массовым распределением, которое объясняется наличием кинетически неоднородных активных центров. Ранее это было продемонстрировано для титаносодержащих, неодимсодержащих катализаторов [3], а также для катализаторов на основе сольвата хлорида гадолиния [4]. Снижение кинетической неоднородности в промышленных условиях ведения процесса осуществляется путем оказываемого гидродинамического воздействия на каталитический комплекс на этапе его приготовления [5]. Данный способ модификации показал свое успешное применение для титановых и неодимовых каталитических систем. Однако контроль ширины молекулярно-массового распределения образуемого продукта остается открытым, поскольку нехарактерные отклонения в свойствах исходного сырья, изменения технологических аспектов производства могут приводить к изменению молекулярных характеристик продукта. С целью осуществления контролируемого производства конечный продукт подвергается гель-хроматографическому анализу, после чего путем решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения определяется количество и состав активных центров, и на основании полученных результатов делается вывод об успехе гидродинамического воздействия на катализатор. Ранее в работах [6, 7] было продемонстрировано, что большую роль в оценке кинетической неоднородности имеют значения погрешности измерений гелипроникающей хроматографии. Вместе с тем, в условиях ведения крупнотоннажного производства приходится сталкиваться со взаимным отклонением молекулярного распределения для различных образцов полимера. Все это искажает точность численного решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения. Актуальной в этом случае является разработка модифицированного способа решения обратной задачи, учитывающая разброс исходных экспериментальных данных.

Целью работы является разработка новых математических методов и алгоритмов, позволяющих решать обратную задачу формирования молекулярно-массового распределения в условиях

интервального характера молекулярного распределения конечного продукта, а также их апробация на примере промышленно получаемого 1,4-цис-полиизопрена в присутствии титансодержащего катализатора.

Постановка и решение обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения

Для проведения эксперимента в промышленном масштабе производства использовали титансодержащий катализатор, который был сформирован на основе толуольных растворов $TiCl_4$ и триизобутилалюминия (ТИБА). Состав каталитического комплекса усложнялся путем добавления электронодонорных модификаторов, в роли которых участвовали дифенилоксид (ДФО) и пентадиен-1,3 (ПП). Суспензию титанового каталитического комплекса для производства каучука получали при $-10^{\circ}C$ путем сливания толуольных растворов $TiCl_4$ (катализатор) с $Al(i-C_4H_9)_3$ (сокатализатор), р-электронодонорной добавкой дифенилоксида (ДФО) и -электронодонорной добавкой пиперилена. Соотношение подаваемых реагентов задавалось в соотношении $TiCl_4/Al(i-C_4H_9)_3/пиперилен/ДФО = 1/1/0.2/0.15$ моль. Процесс проводился непрерывным способом при начальной температуре $-5^{\circ}C$ в каскаде реакторов идеального перемешивания объемом 16.6 м^3 длиной 2 или 3 реактора в зависимости от требования конечной конверсии продукта. Массовый расход реагентов составлял 19 т/час при концентрации изопрена в изопентане в объеме 15% мас. Расход титанового катализатора при этом составил 1 моль на 980 моль изопрена. Остановка полимеризации и отмывка полимеризата проводилась обессоленной водой.

Для того, чтобы перед отбором на полимеризацию частицы катализатора могли хотя бы однократно подвергнуться гидродинамическому воздействию на линии циркуляции суспензии каталитического комплекса был установлен малогабаритный трубчатый турбулентный аппарат [8] со следующими технологическими параметрами: диаметр диффузора 65 мм, диаметр конфузора 35 мм, длина диффузор-конфузорной секции 190 мм, длина входной и выходной секции 175 мм, общая длина 1.3 м, угол раскрытия диффузора 45 ± 5 град. Линейная скорость движения потока в широком и узком сечениях аппарата составила 1 и 3.5 м/с, соответственно.

На выходе из последнего полимеризатора с разницей во времени 30 минут были взяты два образца полимера (№ 1 и № 2), которые подвергались анализу по принципу гелепроникающей хроматографии. На основании результатов проводимого анализа выстраивалась картина молекулярно-массового распределения продукта (рис. 1).

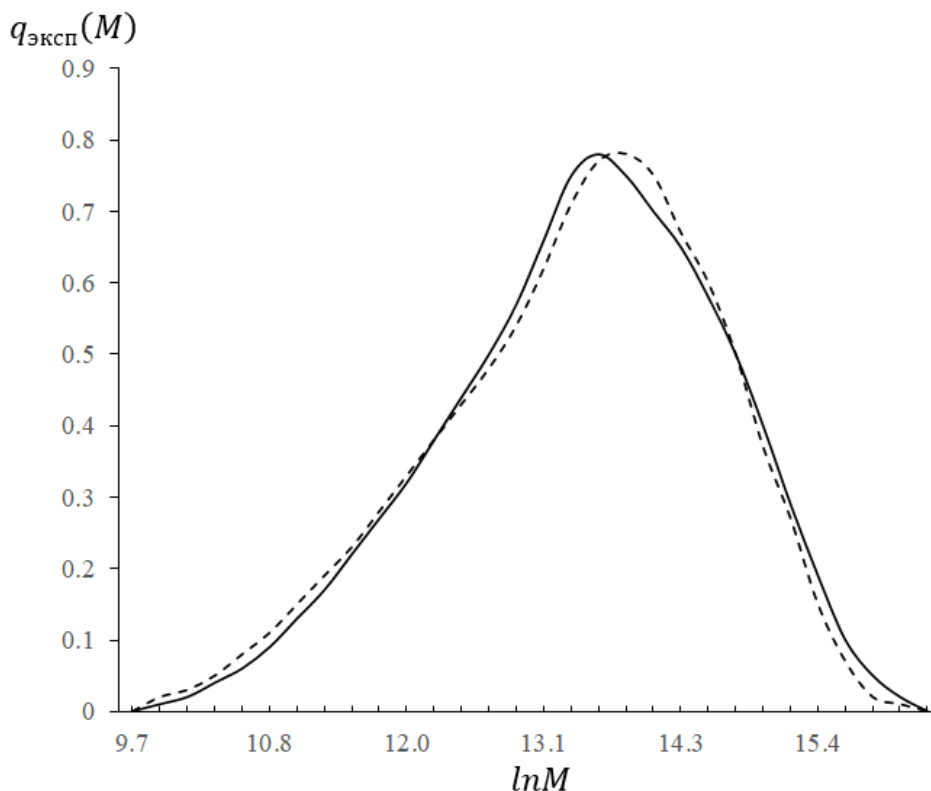


Рис. 1. Молекулярно-массовое распределение продукта полимеризации изопрена на каталитической системе $TiCl_4/Al(i-C_4H_9)_3$ /пиперилен/ДФО (линия – образец полимера № 1, штрих – образец полимера № 2)

Для проведения анализа кинетической неоднородности титанового катализатора для взятых образцов полимера проводилось решение обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения. В основе метода лежит предположение о том, что существует функция распределения активных центров, каждый из которых имеет одинаковое модельное распределение, характерное для заданного кинетического механизма процесса. Тогда экспериментальная кривая молекулярно-массового распределения подчиняется соотношению:

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

где $K(\lambda, M)$ – функция, отражающая механизм полимеризационного процесса, $\varphi(\lambda)$ – функция распределения активных центров.

Поскольку для катализаторов Циглера-Натта характерна мономолекулярная гибель активных центров, то в качестве модельной функции, определяющей динамику каждого активного центра, берется распределение Флори [9], определяемое соотношением $K(\lambda, M) =$

$\lambda^2 \text{Mexp}(-\lambda M)$. Суперпозиция этих распределений объясняет широкий характер получаемого молекулярно-массового распределения.

Результатом гель-хроматографического анализа является молекулярно-массовое распределение продукта в координатах $\ln M$, поэтому перейдем к новым переменным $x = \ln M$ и $s = \ln \lambda$. Выражение $K(\lambda, M)$ примет вид $\exp[2(s+x) - \exp(s+x)]$, а выражение (1) переписывается

$$q_{\text{эксп}}(M) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(s) \exp[2(s+x) - \exp(s+x)] ds. \quad (2)$$

Идентификация вида функции распределения активных центров $\psi(s)$ является основной задачей в данной постановке. Поскольку вид выражения (2) относится к интегральным уравнениям Фредгольма первого рода [10], то задача определения подынтегральной функции является некорректно поставленной и решается с помощью численного метода регуляризации, предложенного А.Н. Тихоновым [11]. Идея метода заключается в составлении и минимизации функционала вида:

$$\int_c^d \left[\int_a^b \varphi(s) K(s, x) ds - q_{\text{эксп}}(x) \right]^2 dx + \alpha \int_a^b \left[\varphi^2 + \left(\frac{d\varphi}{ds} \right)^2 \right] ds \rightarrow \min, \quad (3)$$

где α – параметр регуляризации, поиск значения которого представляет собой отдельную задачу.

Поскольку нахождение аналитического решения выражения (3) не представляется возможным, то для нахождения численного решения проводится предварительная дискретизация уравнения и аппроксимация функционала [12]. Для этого на отрезках $[a, b]$ и $[c, d]$ вводится равномерная сетка из n и m точек, соответственно, с шагом $h_s = (b - a)/(n - 1)$ и $h_x = (d - c)/(m - 1)$. Результатом подобных преобразований является сведение задачи (2) к уравнению Эйлера:

$$W_\alpha Z = WZ + \alpha CZ = V, \quad (4)$$

где вектор $V_j = \sum_{i=1}^m \beta K(s_j, x_i) q_i h_x$, $W_{jk} = \sum_{i=1}^m \beta(k) K(s_k, x_i) \beta(j) K(s_j, x_i) q_i h_x$, $\beta(x) = 0.5$, если $x = 1, n$, иначе $\beta(x) = 1$. Квадратная матрица C имеет зависимость лишь от величины шага сетки:

$$C = \begin{bmatrix} 1 + \frac{1}{h_s^2} & -\frac{1}{h_s^2} & \dots & 0 \\ -\frac{1}{h_s^2} & 1 + \frac{2}{h_s^2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 + \frac{1}{h_s^2} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Решение обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения в представлении (4) сводится к нахождению вектора Z , значения которого образуют дискретный вид функции $\psi(s)$. Классический подход к решению подобных задач сводится к применению численных методов решения систем линейных уравнений. Поскольку матрица W_α является симметричной, а размерность зависит

от количества точек разбиения исходного отрезка, то оптимальным является применение точных методов решения, например, метод квадратного корня. Однако требование неотрицательности вектора Z в случае применения подобных методов не всегда выполняется.

Вычислительный эксперимент

Исходные экспериментальные данные, формирующие вектор $q_{\text{эксп}}$, заданы в интервале возможных значений, поэтому для решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения требуется модифицировать постановку задачи (4). В табл.1 отображены значения всех интервалов в случае разбиения исходного отрезка на $m=30$ точек, где $\underline{q}_i, \bar{q}_i$ представляют собой значения нижней и верхней оценки, соответственно. Интервальный характер не является постоянным и для некоторых точек отрезка может иметь как очень узкий, так и широкий характер.

Таблица 1

Интервальный вид вектора q

lgM	$[\underline{q}_i; \bar{q}_i]$	$q_{\text{ср}}$	lgM	$[\underline{q}_i; \bar{q}_i]$	$q_{\text{ср}}$
4.2	[0;0]	0	5.7	[0.62;0.66]	0.64
4.3	[0.01;0.02]	0.015	5.8	[0.71;0.75]	0.73
4.4	[0.02;0.03]	0.025	5.9	[0.77;0.78]	0.775
4.5	[0.04;0.05]	0.045	6	[0.75;0.78]	0.765
4.6	[0.06;0.08]	0.07	6.1	[0.7;0.75]	0.725
4.7	[0.09;0.11]	0.1	6.2	[0.65;0.67]	0.66
4.8	[0.13;0.15]	0.14	6.3	[0.58;0.6]	0.59
4.9	[0.17;0.19]	0.18	6.4	[0.5;0.5]	0.5
5	[0.22;0.23]	0.225	6.5	[0.37;0.4]	0.385
5.1	[0.27;0.28]	0.275	6.6	[0.27;0.29]	0.28
5.2	[0.32;0.33]	0.325	6.7	[0.15;0.19]	0.17
5.3	[0.38;0.38]	0.38	6.8	[0.07;0.1]	0.085
5.4	[0.43;0.44]	0.435	6.9	[0.02;0.05]	0.035
5.5	[0.48;0.5]	0.49	7	[0.01;0.02]	0.015
5.6	[0.54;0.57]	0.555	7.1	[0;0]	0

Модифицируем вектор V под интервальный характер вектора q и введем значения нижней и верхней оценки:

$$\underline{V}_j = \sum_{i=1}^m \beta K(s_j, x_i) \underline{q}_i h_x, \quad (6)$$

$$\bar{V}_j = \sum_{i=1}^m \beta K(s_j, x_i) \bar{q}_i h_x. \quad (7)$$

Исходную задачу (3) в этом случае перепишем в виде

$$\min\{WZ + \alpha CZ - \underline{V}; WZ + \alpha CZ - \bar{V}\} \rightarrow \min, \quad (8)$$

$$\underline{V} \leq WZ + \alpha CZ \leq \overline{V}, \quad Z \geq 0. \quad (9)$$

Функция минимизации (8) и ограничения (9) имеют линейный характер, поэтому задача нахождения значений вектора Z относится к задачам линейного программирования в классической постановке. Для ее решения можно использовать симплекс-метод [13], численная реализация которого в итерационном исполнении была описана авторами работы с использованием языка программирования Python.

Большой интерес при численном решении представляет параметр регуляризации α , от выбора которого зависит корректность и точность решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения. Выбор параметра регуляризации α проведен исходя из условий минимума функции невязки:

$$\beta(\alpha) = \left\| \min \left\{ \varphi(s)K(s, x) - \underline{q}(x); \varphi(s)K(s, x) - \overline{q}(x) \right\} \right\|^2 = \delta^2. \quad (10)$$

Для корректного выбора значения α проводилось многократное решение задачи (8)-(9) в интервале $[0;1]$ с шагом, не превышающим значения допустимой точности. Далее исходя из условия минимума функционала (10) значение α и $\varphi(s)$ фиксировалось. Этот алгоритм был также реализован на языке Python.

Результаты и обсуждение

На рис. 2 показаны результаты проведенных расчетов. Минимум функционала А.Н. Тихонова был достигнут при оптимальном параметре регуляризации $\alpha=0.000168$, при этом невязка для интервального случая задания результатов эксперимента составила 0.002. Каждый пик на приведенном рисунке соответствует как минимум одному типу активного центра. Анализ кривой $\varphi(s)$ позволяет делать вывод о том, что для данного типа каталитического комплекса характерно наличие в системе 2 типов активных центров с характерной молекулярной массой: тип $A_{Ti} - \ln M=11.9$ и тип $B_{Ti} - \ln M=13.4$. Для того, чтобы более детально оценить вклад каждого центра в общий процесс полимеризации, функция $\varphi(s)$ была разбита на сумму элементарных функций распределения Гаусса согласно выражению

$$\varphi(s) = \sum_{k=1}^n p_k \frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(s_i - s_k)^2}{2\sigma_k^2}\right), \quad (11)$$

где n – количество активных центров в системе, s_k – положение максимумов, σ_k – ширина распределения Гаусса, p_k – доля каждого активного центра в каталитической системе, причем $p_1 + p_2 + \dots + p_k = 1$.

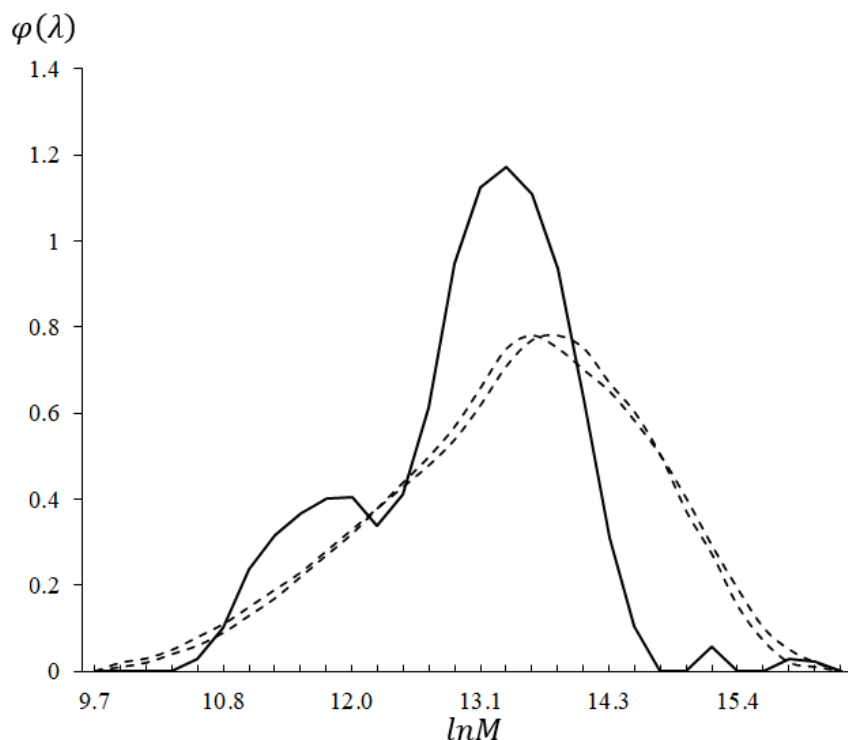


Рис. 2. Результаты решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения изопрена на каталитической системе $TiCl_4/Al(i-C_4H_9)_3$ /пиперилен/ДФО (линия – исходное распределение продукта, штрих – распределение активных центров для образцов полимера № 1 и № 2)

Поскольку максимумы на рис. 2 перекрывают друг друга, то оценить долю каждого типа активного центра удается достаточно приближенно. Для нахождения параметров $p_1, p_2, \sigma_1, \sigma_2$, соответствующих первому и второму типу активного центра, была составлена задача минимизации следующей функции:

$$\sum_{i=1}^m \left[\varphi(s_i) - \frac{p_1}{\sigma_1 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(s_i - s_1)^2}{2\sigma_1^2}\right) - \frac{p_2}{\sigma_2 \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(s_i - s_2)^2}{2\sigma_2^2}\right) \right] \rightarrow \min, \quad (12)$$

где m – количество точек разбиения отрезка.

Для решения задачи оптимизации (12), направленной на идентификацию параметров $p_1, p_2, \sigma_1, \sigma_2$, был применен метод конфигурации (Хука-Дживса) [13]. Поскольку p_1 и p_2 связаны соотношением $p_1 + p_2 = 1$, то задача (11) — это задача поиска трех параметров системы. В качестве начальных условий были заданы параметры $\sigma_1 = 0.5, \sigma_2 = 0.5, p_1 = 0.1, p_2 = 0.9$. Начальные условия для p_1, p_2 были предложены исходя из квадратурной оценки кривой на рис. 2.

В ходе решения задачи минимизации (12) получены значения $\sigma_1 = 0.44$, $\sigma_2 = 0.65$, $p_1 = 0.13$, $p_2 = 0.87$. Следовательно, доля центров типа A_{Ti} составляет 0.13, а для центров типа B_{Ti} – 0.87. Среднеквадратичное отклонение суммы распределения Гаусса от расчетной кривой $\varphi(s)$ составило 5.4%.

Постановка и решение обратных задач формирования молекулярно-массового распределения позволяет однозначно выявить динамику активных центров, инициирующих процесс полимеризации. Несмотря на то, что часто для оценки ширины молекулярного распределения используется усредненная величина, выражаемая индексом полидисперсности, она не позволяет в полной мере отражать характер неоднородности. Результаты промышленных испытаний показывают, что картина молекулярно-массового распределения для различных образцов полимера может отличаться и формировать интервальный характер получаемых экспериментальных данных.

В условиях неопределенности исходных данных была проведена модификация метода решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения. В основе модифицированного метода лежит идея использования регуляризирующего оператора, предложенная А.Н. Тихоновым, в совокупности с интервальной постановкой задачи, формируемой из результатов эксперимента. Обратная задача в новой постановке была сведена к задаче линейного программирования, для решения которой были предложен алгоритм решения с реализацией на языке Python.

Модифицированный метод решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения был применен для идентификации кинетической неоднородности титансодержащего каталитического комплекса в непрерывном производстве 1,4-циклополиизопрена.

Полученные результаты исследования неоднородности демонстрируют наличие в системе двух типов активных центров $A_{Ti} - \ln M = 11.9$ и $B_{Ti} - \ln M = 13.4$. Доля активных центров, образующих фракции с наиболее низкой молекулярной массой мала и не превышает 13%. Дополнительное воздействие на каталитический комплекс может привести к дополнительному снижению доли центров типа A_{Ti} и сведению системы к практически моноцентральной.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2020-0027).

Список литературы

1. Монаков Ю.Б., Марина Н.Г., Толстикова Г.А. К вопросу об образовании и структуре активных центров лантанидных координационных

- катализаторов цис-полимеризации диенов // *Chemie Stosowana*. 1988. Т. 32. № 3-4. С. 547-558.
2. Monakov Y.B., Sigaeva N.N., Urazbaev V.N. Active sites of polymerization. Multiplicity: stereospecific and kinetic heterogeneity. Leiden: Brill Academic Publishers, 2005.
 3. Захаров В.П., Мингалеев В.З., Берлин А.А., Насыров И.Ш., Жаворонков Д.А., Захарова Е.М. Кинетическая неоднородность титановых и неодимовых катализаторов производства 1,4-цис-полиизопрена // *Химическая физика*. 2015. Т. 34. №3. С. 69-75.
 4. Левковская Е.И. Стереорегулярная полимеризация изопрена под влиянием каталитических систем на основе соединений гадолиния: диссертация ... кандидата химических наук: 02.00.06. — Санкт-Петербург, ФГУП НИИСК им. академика С.В. Лебедева, 2016. 129 с.
 5. Захаров В.П., Мингалеев В.З., Захарова Е.М., Насыров И.Ш., Жаворонков Д.А. Совершенствование стадии приготовления неодимового катализатора в производстве изопренового каучука // *Журнал прикладной химии*. 2013. Т. 86. № 6. С. 967-971.
 6. Усманов Т.С., Спивак С.И., Усманов С.М. Обратные задачи формирования молекулярно-массовых распределений. М.: Химия, 2004. 252 с.
 7. Усманов А.С., Исмаилов Р.Р., Усманов Т.С., Спивак С.И., Усманов С.М. Модельные функции в некорректно поставленной задаче формирования молекулярно-массовых распределений. // *Башкирский химический журнал*. 2005. Т. 12. № 2. С. 67-74.
 8. Насыров И.Ш. Жаворонков Д.А., Фаизова В.Ю., Захаров В.П., Захарова Е.М. Оценка технологической эффективности использования трубчатого турбулентного аппарата на стадии приготовления титанового катализатора в производстве изопренового каучука // *Журнал прикладной химии*. 2016. Т. 89. № 6. С. 802-807.
 9. Усманов А.С., Гайсин Ф.Р., Спивак С.И. Молекулярно-массовое Распределение и модельные функции в полимерах // *Вестник БирГПИ*. 2003. №.1. С. 48-54.
 10. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев: Наукова думка, 1986. 543 с.
 11. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. — М.: Наука, 1986. 287 с.
 12. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 232 с.
 13. Пантелеев А.В., Летова Т.А. Методы оптимизации в примерах и задачах. Санкт-Петербург: Лань, 2015. 512 с.

Об авторах:

МИФТАХОВ Эльдар Наилевич – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник научно-инновационного управления, Башкирский государственный университет, г. Уфа, e-mail: promif@mail.ru

МУСТАФИНА Светлана Анатольевна – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математического моделирования, Башкирский государственный университет, г. Уфа, e-mail: mustafina_sa@mail.ru

НАСЫРОВ Ильдус Шайхитдинович – кандидат химических наук, заместитель генерального директора по развитию (по науке) ОАО «Синтез-Каучук», г. Стерлитамак, e-mail: nasyrov.ish@skstr.ru

МУСТАФИНА Софья Ильшатовна – магистрант кафедры математического моделирования, Башкирский государственный университет, г. Уфа, e-mail: sofiamustafina@mail.ru

MODIFIED METHOD FOR SOLVING INVERSE PROBLEMS OF FORMATION OF MOLECULAR-MASS DISTRIBUTION UNDER INTERVAL CONDITIONS OF INITIAL EXPERIMENTAL DATA

E.N. Miftakhov¹, S.A. Mustafina¹, I.Sh. Nasyrov², S.I. Mustafina¹

¹Bashkir State University, Ufa

²Public Corporation «Sintez-Kauchuk», Sterlitamak

Methods and algorithms are described that make it possible to study the kinetic heterogeneity of polymer products obtained in the presence of microheterogeneous catalytic systems. For the case of the interval nature of the initial experimental data obtained as a result of the performed gel chromatographic analysis, a modification of the method for solving the inverse problem of the formation of the molecular weight distribution was carried out. The new solution method is based on the idea of using a regularizing operator, proposed by A.N. Tikhonov, in conjunction with the interval formulation of the problem, formed from the results of the experiment. In the new formulation, the inverse problem of the formation of the molecular weight distribution is reduced to a linear programming problem, the numerical solution of which is obtained using the iterative simplex method. New methods and algorithms have been tested to determine the kinetic heterogeneity of 1,4-cis-polyisoprene obtained in the presence of a titanium catalyst.

Keywords: *polyisoprene, inverse problem, molecular weight distribution, titanium, interval.*