

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа: Инженерная Школа Природных Ресурсов (ИШПР)

Направление подготовки (специальность): 18.04.01 Химическая технология (Химическая технология топлива и газа)

Отделение школы (НОЦ): Отделение химической инженерии (ОХИ)

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Разработка компьютерной моделирующей системы процесса получения синтетических моющих средств

УДК 661.185.6:004.9

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ72	Бунаев Аюр Алексеевич		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Долганов Игорь Михайлович	К.Т.Н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Криницина Зоя Васильевна	К.Т.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Атепаева Наталья Александровна	-		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Юрьев Егор Михайлович	К.Т.Н.		

Томск – 2019 г.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП (18.04.01)

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять <i>глубокие</i> естественно-научные, математические и инженерные <i>знания</i> для создания <i>новых</i> материалов
P2	Применять <i>глубокие знания</i> в области современных технологий химического производства для решения <i>междисциплинарных</i> инженерных задач
P3	Ставить и решать <i>инновационные</i> задачи <i>инженерного анализа</i> , связанные с созданием материалов и изделий, с использованием системного анализа и моделирования объектов и процессов химической технологии
P4	Разрабатывать химико-технологические процессы, <i>проектировать</i> и использовать <i>новое</i> оборудование для создания материалов, конкурентоспособных на <i>мировом</i> рынке
P5	Проводить теоретические и экспериментальные <i>исследования</i> в области создания <i>новых</i> материалов, современных химических технологий, нанотехнологий
P6	Внедрять, <i>эксплуатировать</i> современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать их <i>высокую эффективность</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
<i>Универсальные компетенции</i>	
P7	Использовать <i>глубокие знания</i> по <i>проектному менеджменту</i> для ведения <i>инновационной</i> инженерной деятельности с учетом юридических аспектов защиты интеллектуальной собственности
P8	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
P9	Эффективно работать индивидуально, в качестве <i>члена и руководителя группы</i> , состоящей из специалистов различных направлений и квалификаций, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность <i>следовать корпоративной культуре</i> организации
P10	Демонстрировать <i>глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов</i> инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах <i>устойчивого развития</i>
P11	<i>Самостоятельно учиться</i> и непрерывно <i>повышать квалификацию</i> в течение всего периода профессиональной деятельности

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа: Инженерная Школа Природных Ресурсов (ИШПР)

Направление подготовки (специальность): 18.04.01 Химическая технология (Химическая технология топлива и газа)

Отделение школы (НОЦ): Отделение химической инженерии (ОХИ)

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

____ Юрьев Е.М. ____
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации
(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ72	Бунаеву Аюру Алексеевичу

Тема работы:

Разработка компьютерной моделирующей системы процесса получения синтетических моющих средств	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	от 21.03.2019 г. №2190/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	05.06.2019
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе (наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).	Объект исследования – реактор сульфирования линейных алкилбензолов серным ангидридом. Сырьем реактора является линейный алкилбензол и серный ангидрид, производительность реактора составляет 60 тыс. т/год; Режим работы – непрерывный; Реактор сульфирования предназначен для производства линейной алкилбензолсульфокислоты, являющейся компонентом в производстве синтетических моющих средств.
---	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i>	1 Обзор специальной литературы по технологии сульфирования ЛАБ. 2 Объект и методы исследования процесса. 3 Экспериментальная часть. Мониторинг работы технологических установок. Разработка диффузионной математической модели процесса сульфирования линейных алкилбензолов серным ангидридом. 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение. 5 Социальная ответственность. Заключение. Список публикаций. Список использованной литературы
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	Технологическая схема получения ЛАБСК, реактор сульфирования, аналитические графики по экспериментальным данным, графики по результатам расчетов на модели
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
«Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	доцент отделения социально-гуманитарных наук, к.т.н., Креницына Зоя Васильевна
«Социальная ответственность»	старший преподаватель ООД ШБИП Атепаева Наталья Александровна
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
Разделы на русском языке: • Введение; • Литературный обзор; • Теоретическая часть; • Экспериментальная часть; • Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; • Социальная ответственность; • Заключение	
Разделы на иностранном языке: • Литературный обзор;	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	14.01.2019
--	-------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения химической инженерии	Долганов Игорь Михайлович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ72	Бунаев Аюр Алексеевич		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ72	Бунаев Аюр Алексеевич

Школа	Инженерная Школа Природных Ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология топлива и газа

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Работа с информацией, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах, статических бюллетенях и изданиях, нормативно-правовых документах.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Анализ причин и следствия проблем, оценка коммерциализации проекта.
2. Инициация научного проекта	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.
3. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Составление структуры работ и календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ
4. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Проведение сравнительной оценки экономической эффективности научного исследования.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Диаграмма Исикавы
2. Иерархическая структура работ проекта
3. Диаграмма Ганта работ по проекту
4. Оценка экономической эффективности НИИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Криницина Зоя Васильевна	К.Т.Н		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ72	Бунаев Аюр Алексеевич		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ72	Бунаеву Аюру Алексеевичу

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение	Геологии
Уровень образования	Магистратура	Специальность	18.04.01 «Химическая технология»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения.	Объект исследования – технология сульфирования линейного алкилбензола Рабочая зона – компьютерный класс, технологическая зона. Методика исследования – моделирование технологии сульфирования линейного алкилбензола Область применения – нефтехимия.
---	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	- Обеспечение безопасности на рабочем месте; - Режим труда и отдыха при работе с ПЭВМ.
2. Производственная безопасность 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	Опасные факторы: 1. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека 2. Вещества, обладающие острой токсичностью по воздействию на организм (ядовитые вещества / химикаты / химическая продукция) Вредные факторы: 1. Недостаточная освещенность рабочей зоны 2. Отклонение параметров микроклимата в помещении 3. Монотонный режим работы 4. Повышенный уровень шума 5. Электромагнитное излучение
3. Экологическая безопасность	1. Предупреждение загрязнения атмосферного воздуха;

	2. Предупреждение загрязнения водных объектов;
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях	Вероятность возникновения возгорания при эксплуатации ПЭВМ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД ШБИП	Атепаева Наталья Александровна	-		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ72	Бунаев Аюр Алексеевич		

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа: Инженерная Школа Природных Ресурсов (ИШПР)
 Направление подготовки (специальность): 18.04.01 Химическая технология (Химическая технология топлива и газа)
 Уровень образования Магистратура
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии
 Период выполнения (осенний / весенний семестр 2018/2019 учебного года)

Форма представления работы:

Магистерская диссертация
(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	05.06.2019
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
4.03.19	Обзор литературы	15
18.03.19	Способы реализации	15
22.04.19	Экспериментальная часть	25
03.05.19	Результаты исследования	15
13.05.19	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
20.05.19	Социальная ответственность	15

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения химической инженерии	Долганов Игорь Михайлович	К.Т.Н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения химической инженерии	Юрьев Егор Михайлович	К.Т.Н.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 108 стр., 37 рис., 32 табл., 58 источника литературы, 1 прил.

Ключевые слова: сульфирование, алкилбензол, линейная алкилбензолсульфокислота, технологические параметры, серный ангидрид, математическая модель.

Объектом исследования являются технология получения алкилбензолсульфокислоты и реактор сульфирования линейных алкилбензолов серным ангидридом.

Цель работы – разработка диффузионной математической модели процесса сульфирования линейных алкилбензолов серным ангидридом и создание соответствующей компьютерной программы.

В работе приведен принцип работы диффузионной математической модели сульфирования, создана компьютерная программа в виде приложения комплексного моделирования процесса сульфирования, представлены результаты оценки погрешности вычислений с помощью полученной модели, а также динамика изменения концентрации высоковязкого компонента внутри реакционных трубок, его динамика в течении определенного промежутка времени и зависимость его образования в пленке органического вещества от расхода линейных алкилбензолов.

Научно-исследовательская работа направлена на поиск и исследование закономерностей, которые должны, в свою очередь, стать основой для выработки рекомендаций изменения технологических параметров процесса сульфирования линейных алкилбензолов серным ангидридом с целью увеличения показателей эффективности с точки зрения качества получаемой алкилбензолсульфокислоты.

Область применения – нефтехимия, бытовая химия.

Выпускная квалификационная работа выполнена в текстовом редакторе Microsoft® Office Word 2016.

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

Определения

В представленной работе применены нижеследующие определения:

Линейный алкилбензол (ЛАБ): Органическое соединение, углеводород ароматического ряда; бесцветная жидкость.

Линейный алкилбензолсульфокислота (ЛАБСК): смесь изомеров алкилбензолсульфокислот.

ОГЛАВЛЕНИЕ

	Введение	14
1	Литературный обзор	16
	1.1 Конструкции реакторов производства синтетических моющих средств	16
	1.1.1 Реактор смешения	17
	1.1.2 Реактор с вращающимся уплотненным слоем (RBM)	18
	1.1.3 Пленочный цилиндрический реактор	20
	1.1.4 Многотрубный реактор пленочного типа	22
	1.1.5 ТО-реактор	25
	1.2 Математические модели процессов алкилирования и сульфирования	27
	1.3 Компьютерные моделирующие системы для исследования химико-технологических процессов	34
	1.3.1. Aspen HYSYS	34
	1.3.2. PRO/II	35
	1.3.3. UniSim Design	36
	1.3.4. VMGSim	37
2	Теоретическая часть	38
	2.1 Технологическая схема процесса алкилирования	38
	2.2 Технологическая схема процесса сульфирования	40
	2.3 Химизм процесса алкилирования	41
	2.3.1 Алкилирование бензола алкенами	41
	2.3.2 Механизм реакции алкилирования	42
	2.4 Химизм процесса сульфирования	44
	2.4.1. Подготовка газовой смеси SO ₃	44
	2.4.2 Сульфирование линейных алкилбензолов серным ангидридом	45
	2.4.3 Механизм реакции сульфирования	46
	2.5 Кинетические модели	
3	Экспериментальная часть	54
	3.1 Разработка диффузионной математической модели сульфирования	54
	3.2 Оценка адекватности математической модели	60
	3.3 Динамика высоковязкого компонента по длине трубки реактора и толщине пленки органического вещества	65
	3.4 Динамика высоковязкого компонента в течении определенного промежутка времени	67
	3.5 Динамика высоковязкого компонента в зависимости от расхода ЛАБ	70
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	71
	4.1 Предпроектный анализ	71
	4.1.1 Потенциальные потребители	

4.1.2	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	74
4.1.3	Диаграмма Исикавы	76
4.1.4	Оценка готовности проекта к коммерциализации	77
4.1.5	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	79
4.2	Инициация проекта	80
4.2.1	Цели и результат проекта	80
4.2.2	Организационная структура проекта	81
4.2.3	Ограничения и допущения проекта	81
4.3	Планирование научно-исследовательских работ	82
4.3.1	Иерархическая структура работ проекта	82
4.3.2	Контрольные события проекта	82
4.3.3	План проекта	83
4.4	Бюджет научного исследования	84
4.4.1	Основная заработная плата	85
4.4.2	Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала	87
4.4.3	Отчисления на социальные нужды	88
4.5	Организационная структура проекта	89
4.6	Реестр рисков	89
4.7	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	90
4.8	Оценка сравнительной эффективности исследования	90
5	Социальная ответственность	94
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	94
5.2	Производственная безопасность	96
5.2.1	Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования на рабочем месте	97
5.2.1.1	Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	98
5.2.1.2	Недостаточная освещенность рабочей зоны	99
5.2.1.3	Отклонение параметров микроклимата в помещении	100
5.2.1.4	Повышенный уровень шума	101
5.2.1.5	Монотонный режим работы	101
5.2.1.6	Уровень электромагнитного излучения (ЭМП)	103
5.2.2	Вещества, обладающие острой токсичностью по воздействию на организм (ядовитые вещества / химикаты / химическая продукция)	104
5.3	Экологическая безопасность	107

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях (техногенного, природного, социального характера)	109
Заключение	110
Список публикаций	113
Список используемых источников	114
Приложение А	120

ВВЕДЕНИЕ

В наши дни увеличение спроса как со стороны различных секторов промышленного производства, так и повседневным бытовым потреблением на синтетические моющие средства приводит к соответствующему увеличению производства данных веществ. Если говорить о мировом рынке в целом, то необходимо отметить, что объем рынка поверхностно-активных веществ, являющихся, очевидно, основным компонентом синтетических моющих средств, в 2016 году оценивался на 31 миллиард долларов США, тогда как в недалеком будущем, в 2021 году, ожидается увеличение этой цифры до 39,6 млрд. долл. [1].

На сегодняшний день существует постоянный рост до 4,4% в год на производстве поверхностно-активных веществ [1]. Наиболее востребованными являются синтетические моющие вещества имеющие в основе своей анионные ПАВ. Которые, в свою очередь, являются продуктами реакций сульфирования или сульфатирования. В мире, на данный момент, с использованием данных технологий работают порядка 800 действующих заводов. Их мощности, при этом, находятся в диапазоне от 3 до 50 тыс. т/год. При этом, необходимо отметить, что примерно 20%, что составляет 2,5 млн. т/год мирового производства расположены в Соединенных Штатах, странах Западной Европы и Японии [2].

Таким образом, алкилбензолсульфокислота является, по сути, одним из наиболее типичных представителей класса анионных поверхностно-активных веществ. Данное вещество получается в результате реакции сульфирования линейного алкилбензола триоксидом серы. Оно применяется еще с середины 60-х годов прошлого века в качестве компонента синтетических моющих средств и до наших дней широко используется [3]. Однако имеющиеся мощности промышленности в данном сегменте не успевают за разрастающимся спросом на данный продукт и насытить рынок необходимым количеством продукта. Поэтому уже в наши дни имеется дефицит

алкилбензолсульфоокислоты на рынке моющих веществ России, который восполняется другими путями: заменой на менее эффективные ПАВ или импортом более дорогих зарубежных аналогов.

Для того, чтобы значительно повысить эффективность производства алкилбензолсульфоокислоты, главное, что необходимо сделать – выяснить причину, по которой селективность процесса сульфирования недостаточно высока. Для этого, в свою очередь, необходимо сначала установить связи между конечным продуктом и, во-первых, непрерывно изменяющимся составом сырья, а также, во-вторых, технологическими параметрами. Затем, также, на ранних этапах, необходим термодинамический анализ побочных реакций. Результаты этого шага позволят сделать выводы о самой возможности присутствия данных побочных веществ, а также рассмотреть гидродинамический режим работы реактора сульфирования с целью того, чтобы показать какие изменения она претерпевает в ходе реакции сульфирования и во время накопления высоковязкого компонента внутри трубок реактора. В конечном итоге, результатом этих действий будет являться математическая модель процесса сульфирования линейных алкилбензолов для того, чтобы оперативно регулировать управляющие параметры системы.

Целью данной работы является разработка диффузионной математической модели процесса сульфирования и соответствующего приложения. Изучение закономерностей, полученных с помощью созданного программного обеспечения, поможет в выявлении проблем на производстве, а также разработать рекомендации для изменения технологических параметров исследуемого процесса с целью повышения эффективности, выраженной главным образом выходом алкилбензолсульфоокислоты необходимого качества, производства.

1. Литературный обзор

1.1. Конструкции реакторов производства синтетических моющих средств

Для применения в процессе сульфирования подбираются такие реакторы, конструкция которых отвечает многим требованиям, которые, в свою очередь, определяются тем, какой целевой продукт требуется получить на выходе из процесса. Поэтому в ходе выбора реактора главным образом следует принимать во внимание то, что реакция сульфирования газовой смесью органического вещества проходит в достаточно короткий промежуток времени. Одной из наиболее важных переменных процесса является парциальное давление газообразного серного ангидрида, поскольку именно данный параметр обуславливает движущую силу диффузии из газовой фазы в жидкую. Тем не менее, диапазон скоростей, при которой имеет место быть реакция с органическим компонентом, достаточно широк. Например, реакция сульфирования протекает гораздо быстрее между α -олефинами и триоксидом серы, чем по сравнению с алкилбензолами. Необходимо подчеркнуть, что в различных технологиях процесса сульфирования на сегодняшний день подразумевается протекание реакции в условиях пониженного давления. Тем не менее, для того чтобы увеличить интенсивность процесса, разрабатываются новые подходы к этой проблеме. Такие как, например, сульфирование посредством адсорбции SO_3 на поверхности активированного угля в условиях повышенного давления, в результате чего образуется сконденсированная фаза $\text{CO}_2\text{-SO}_3$ [4]. Важный момент состоит в том, чтобы газ вступал в контакт с жидким реагентом в как можно более сжатые сроки. Другим важным пунктом является то, что необходимо поддерживать интенсивное перемешивание внутри жидкой фазы в течение всего хода реакции для того, чтобы на границе раздела двух фаз мгновенно снижалась концентрация молекул уже вступивших в реакцию на этот момент с той целью, чтобы непрореагировавшие молекулы

поднялись на поверхность раздела, чтобы взаимодействовать с газовой смесью. В следствие того факта, что процесс сульфирования является экзотермическим – выделяется очень большое количество теплоты – необходимо очень быстро осуществлять отвод выделившейся энергии в целях поддержания оптимальной температуры внутри реактора, которая, в свою очередь, оказывает непосредственное влияние на значение вязкости целевого продукта данного процесса, которое необходимо также поддерживать на определенном уровне. Другой причиной, по которой необходимо поддерживать температуру в оптимальных пределах – предотвращение локальных перегревов, ведущих к поломкам в самом реакторе. Таким образом, в наши дни существует широкий спектр реакторов, предназначенных в том числе и для процесса сульфирования, отличающихся друг от друга с конструктивной точки зрения.

1.1.1 Реактор смешения

Активное использование данного типа реактора в промышленных целях началось раньше прочих типов.

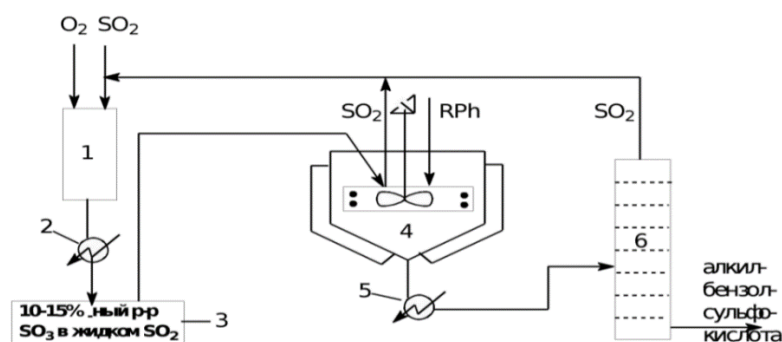


Рисунок 1.1 – Схема получения ЛАБСК в реакторе смешения

1 – блок конверсии SO_2 в SO_3 , 2 – холодильник, 3 – сборник емкостного типа, 4 – реактор сульфирования, 5 – нагреватель, 6 – испаритель

В блоке 1 конверсии SO_2 в SO_3 происходит частичное окисление диоксида серы в триоксид с помощью технического кислорода. После этого продукты процесса проходят холодильник 2, где происходит их охлаждение и

конденсация после чего они поступают в сборник емкостного типа 3 в виде 10-15% раствора триоксида серы в диоксиде. Данный раствор подается в реактор 4 – в центр тарелки на мешалку. Туда же, на мешалку реактора 4, подается смесь линейных алкилбензолов. С конструктивной точки зрения данный реактор представляет собой емкость, охлаждение которой осуществляется посредством рубашки с холодной водой. Внутри же емкости расположена тарелка с бортами, куда, собственно поступают реагенты, внутри которой, в свою очередь, расположены мешалка, а также змеевики для охлаждения реакционной зоны. Частично прореагировавшая смесь переливается через борта тарелки на стенки емкости, охлаждаемую водяной рубашкой. Таким образом, реакция завершается здесь, в стекающей пленке жидкости, в результате чего большая часть диоксида серы испаряется и отводится через верх реактора. Тем не менее, продуктовый поток, вытекающий из нижней части реактора содержит 5-7% диоксида серы в своем составе. Для удаления этих остатков поток сначала подогревается в нагревателе 5, после чего направляется в вакуумный испаритель 6. Готовая алкилбензолсульфокислота отправляется на дальнейшую переработку, а испарившийся диоксид серы отправляется на рецикл в блок конверсии 1.

Подобный способ производства был широко распространён в США, однако, на сегодняшний день реакторы такой конструкции уже практически не используются [5].

1.1.2 Реактор с вращающимся уплотненным слоем (RBM)

Данный тип реакторов используется в промышленности уже достаточно продолжительное количество времени. Среди областей его применения: катионная полимеризация, дистилляция и т.д. Тем не менее, на сегодняшний день в отдельных научных работах и в ходе некоторых исследований была высказана идея эксплуатации таких реакторов в процессе сульфирования с целью получения синтетических моющих средств [6,7].

Конструктивно данный тип реакторов представляет собой следующее. Закрытый корпус реактора установлен на роторе. Внутри корпуса находится слой уплотняющих сеток, которые также закреплены на роторе.

Принцип работы такого реактора состоит в том, что поток реагентов – линейных алкилбензолов и жидкого ангидрида серы – поступает на слой уплотняющих сеток. На входе в реактор установлен входной дозатор с помощью которого осуществляется разбрызгивание сырья на сетки, на поверхности которых и протекает реакция сульфирования. После этого капли целевого и побочных продуктов вместе с еще непрореагировавшими остатками сырья стекают на следующий уровень уплотняющих сеток, где уже происходит досульфирование веществ, еще не вступивших в реакцию путем коалесценции капель на поверхности сетки. За счет этого, а также вращения ротора улучшается смешение, что, в свою очередь, способствует интенсификации протекания реакции по сравнению с реакторами более традиционного смешения, описание которых приводилось ранее. Центробежные силы, вызванные вращением ротора, отбрасывают полученную алкилбензолсульфоокислоту к стенкам корпуса реактора, откуда она удаляется, стекая по стенкам под действием силы тяжести. Принципиальная технологическая схема приведена ниже, на рисунке 1.2 [6]:

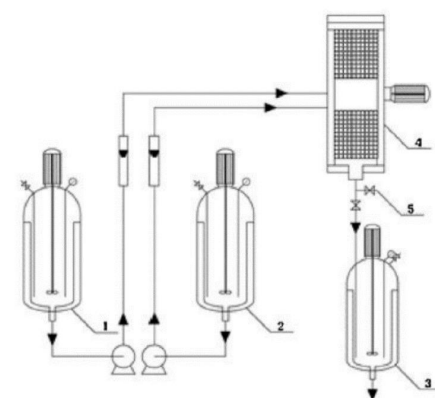


Рисунок 1.2 – Принципиальная схема экспериментальной установки для сульфирования алкилбензола

1, 2 – емкости хранения линейного алкилбензола и триоксида серы, 3 – емкость хранения готового продукта, 4 – RBM-реактор, 5 – место пробоотбора

Тем не менее, несмотря на всю новизну подобной идеи и конструкции в целом, выход алкилбензолсульфокислоты в точке пробоотбора, находящейся сразу на выходе из реактора составляет лишь 60-70% и он достигает значения немногим выше 88% только в случае хранения – в следствии досульфирования линейных алкилбензолов растворенными остатками триоксида серы. Это является значительным недостатком, поскольку в таком случае не всегда гарантирован выход продукта необходимого качества для потребителя [6].

1.1.3 Пленочный цилиндрический реактор

«Chemiton», компания, расположенная в США, специально разработала конструкцию таких реакторов для процесса сульфирования линейных алкилбензолов [8].

На рисунке 1.3 приведена конструкция данного типа реакторов. В основе работы данного реактора лежат два цилиндра, стакана, установленных один в другом. Таким образом, кольцевое пространство, ограниченное этими двумя стаканами, зазор между поверхностями которых составляет примерно 7,5-8 мм, является реакционным пространством, где и протекает процесс сульфирования [8].

С помощью насоса половина потока линейного алкилбензола подается через распределительную камеру в наружный цилиндр, в то время как другая половина – во внутренний. Из этих распределительных устройств линейные алкилбензолы поступают в реакционное кольцевое пространство между двумя стаканами в виде тонкой пленки. При этом они стекают по внутренней стенке наружного стакана, а также по внешней – внутреннего. Пленочный режим в данной конструкции обеспечивается специальными канавками-зазорами.

Газообразный триоксид серы поступает через верхнюю часть реактора, проходит в кольцевое реакционное пространство между стаканами, где почти

мгновенно протекает реакция сульфирования с алкилбензолсульфокислотой в качестве продукта этой реакции. Полученная кислота стекает под действием силы тяжести в нижнюю часть пленочного реактора. Выделившееся в результате реакции тепло отводится охлаждающей водой, проходящей через рубашки охлаждения каждого из двух цилиндров снизу-вверх. Дозировка линейных алкилбензолов необходимо постоянно поддерживать на определенном уровне для того, чтобы пленка была равномерно распределена по реакционной поверхности стаканов [8].

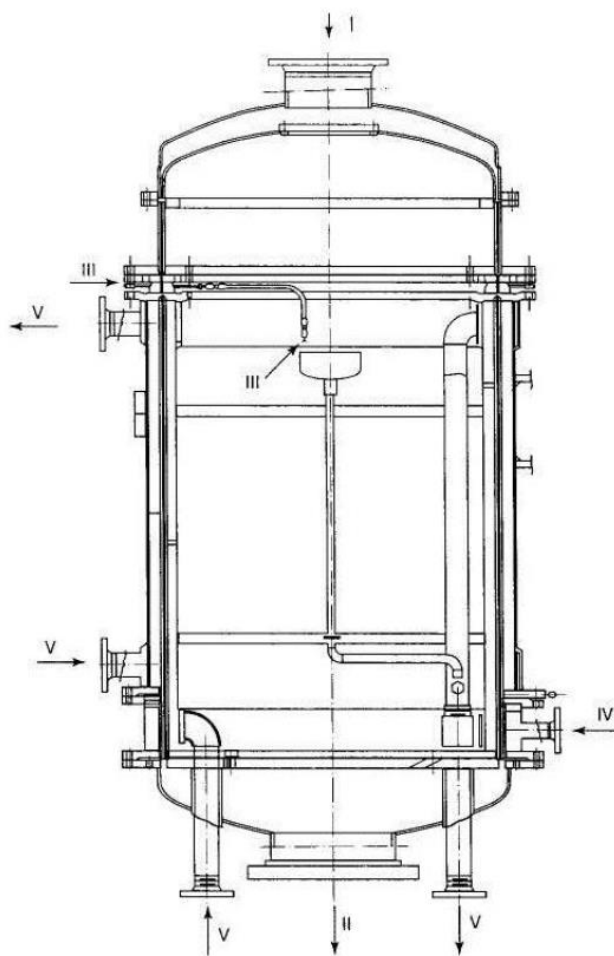


Рисунок 1.3 – Конструкция цилиндрического пленочного реактора.

Потоки: I – газовая смесь триоксида серы; II – алкилбензолсульфокислота; III – линейные алкилбензолы; IV – рециркулят; V – охлаждающая вода.

Значительное влияние на процесс сульфирования в реакторе такого типа оказывает температура воды охлаждения на входе в реактор. Ее значение не

должно превышать 30°C. Однако, уже при температуре 28°C и ниже происходит слишком сильное охлаждение стенок реакционного пространства, что ведет к повышению значения вязкости реакционной массы. Это, в свою очередь, снижает реакционную способность и глубину сульфирования жидкой фазы. Таким образом, полученный продукт может не соответствовать предъявляемым ему требованиям [8].

1.1.4 Многотрубный реактор пленочного типа

На сегодняшний день такая конструкция реакторов сульфирования считается наиболее эффективной и перспективной. Одним из лидирующих производителей установок такого типа является компания из Италии Ballestra S.p.A.

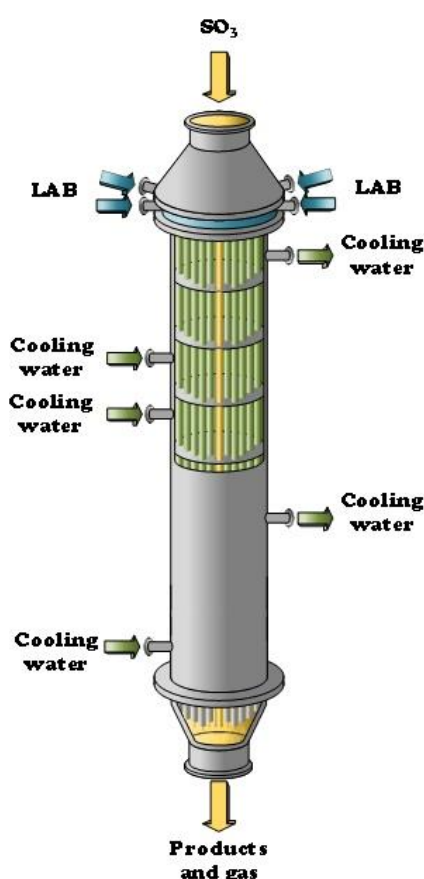


Рисунок 1.4 – Многотрубный реактор производства фирмы Ballestra S.p.A

Конструкция данного типа реакторов приведена на рисунке 1.4. Основными деталями реактора являются вертикальные реакторные трубы, расположение которых устроено как расположение оных внутри кожухотрубных теплообменников. Трубки имеют внутренний диаметр 25 мм при толщине стенок 1,5 мм и длине 6 м. Каждая отдельная трубка имеет пропускную способность до примерно 40 кг/ч алкилбензолсульфокислоты, в то время как газ подается со скоростью около 30 м/с [9]. Очевидно, что мощность реакторов подобного типа напрямую зависит от количества трубок внутри него.

В то время как описанный выше обычный пленочный реактор содержит в себе, по сути, только одну трубу и имеет, соответственно, более низкую производительность, многотрубный обладает большей за счет того, что количество труб может достигать 144 суммарной мощностью около 5,5 т/ч [9]. При этом, тем не менее, условия процесса сульфирования внутри реактора в целом могут быть изменены посредством регулировки массового расхода линейных алкилбензолов и серного ангидрида. Кроме того возможно регулировка температуры воды, поступающей на охлаждение реакционного пространства реактора, а также мольного соотношения серного ангидрида к поступающим линейным алкилбензолам. Тем не менее, необходимо избегать такого явления, как пересульфирование углеводородов, поскольку это становится причиной чрезмерного выхода побочного продукта и ухудшению такого показателя как цветность, что негативно влияет на качество конечного продукта [10].

Достаточно большим спросом уже пользуются реакторы производства компании Mazzoni S.r.l. По своей конструкции они похожи на реакторы фирмы Ballestra описанные выше, однако главное отличие заключается в том, что после основного сопла введения газо-воздушной смеси (триоксида серы) в их конструкции имеется также еще одно сопло для инъекции сухого воздуха. Данное конструкторское решение выполнено с той целью, что стабилизируется перепад давлений, который вызывают притоки новых порций серного ангидрида. Это делает режим движения газовой смеси близким к ламинарному.

Благодаря чему, в свою очередь, линейные алкилбензолы более равномерно подвергаются сульфированию [11].

Необходимо отметить внимание проблеме конструкции входных сопел, которое ей уделяют многие инженеры, занимающиеся разработкой реакторов сульфирования. Оно вызвано тем, что существует мнение о том, что правильный ввод газа в реакционное пространство имеет большое влияние на весь дальнейший процесс сульфирования внутри реактора. В ходе работы в этом направлении создано множество патентов, среди которых можно отметить некоторые, представляющие наибольший интерес с конструкционной точки зрения, поэтому заслуживающие отдельного внимания. К числу подобных можно отнести патент RU 2165788 Биргера Дахля. Данный документ заостряет внимание на том, что при создании любого реактора, предназначенного для процесса сульфирования, необходимо также принимать во внимание форму отверстий, через которые осуществляется подача линейных алкилбензолов. Важность этого момента в конструкции аппараты обуславливается тем, что это позволяет равномерно распределять пленку органического вещества по стенкам трубок внутри реакционного пространства. Помимо этого, в патенте имеется информация о том, что входное сопло предназначенное для ввода смеси воздуха и серного ангидрида и реакционное пространство должны быть разделены определенным расстоянием, поскольку это напрямую оказывает влияние на качество получаемой продукции [12].

Не меньшее внимание уделяют инженеры форме трубок реактора, внутри которых происходит стекание пленки линейных алкилбензолов. Таким образом, некоторые авторы в своих работах рассматривают возможность того, что трубки классической, гладкой, цилиндрической формы можно будет заменить на ребристые, как те, что показаны на рисунке 1.5 [11].

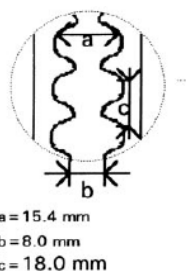


Рисунок 1.5 – Предлагаемое исполнение трубок реакционного пространства для реактора сульфирования

Тем не менее, стоит отметить, что такое исполнение трубок реактора сульфирования не обязательно универсально, поскольку сможет оказать положительный эффект на целевой продукт только при определенных условиях.

1.1.5 ТО-реактор

Данный тип реакторов разработан японским ученым-инженером Изуми Яманэ из «Lion Fat and Oil Co., Ltd.» – одной из лидирующих компаний Японии в области бытовой химии и косметики. Конструкция является экспериментальной, и автор акцентирует внимание на том, что в числе основных факторов, ведущих к повышению выхода продуктов целевой реакции являются постоянный контроль за температурой процесса, а также постоянство количества линейных алкилбензолов, подающихся в реактор. Тем не менее, следует отметить, что Яманэ-сан рассматривает не один вариант сульфирования. В числе целевых продуктов он также включает такие вещества как, например: α -олефинсульфонаты, линейные алкилбензосульфонаты, сульфозтоксилаты [13].

К основным отличиям ТО-реакторов от пленочных является можно отнести следующее:

- 1) В реакционном пространстве внутри реактора создаются все необходимые условия для идеального изотермического сульфирования. Для того, чтобы достичь одного необходимо создать, в свою очередь, условия для

возникновения инертного газового потока посредством того, что воздух будет подаваться между газообразным серным ангидридом и свободно стекающей по стенке реактора пленке линейных алкилбензолов. Таким образом, увеличивается доступ серного ангидрида к пленке органического вещества [8]. На рисунке 1.6 представлена схема движения газов внутри реактора.

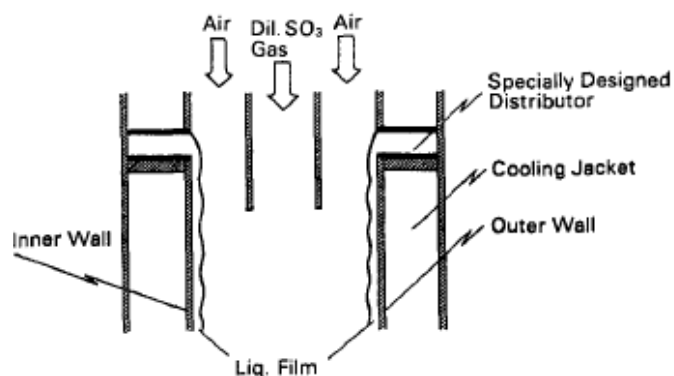


Рисунок 1.6 – Схема потоков в ТО-реакторе

2) Другим заметным отличием и преимуществом является наличие в конструкции реакторов данного типа специального устройства, предназначенного для распределения пленки органического вещества однородной толщины по стенке реактора [13].

Результаты процесса сульфирования в ТО-реакторе в сравнении с пленочным реактором представлены в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Сравнение ТО-реактора с обычным пленочным реактором

ПАВ	Тип реактора	Выход продукта, %	Цветность по Клетту
алкилбензосульфوناتы	Пленочный	93,1	154
	ТО	96,4	37
Сульфозтоксилаты	Пленочный	98,0	18
	ТО	98,3	10
α -олефинсульфонаты	Пленочный	98,0	26
	ТО	98,7	12

Таким образом, из таблицы можно наблюдать, что ТО-реактор имеет лучшие показатели. Это явление обусловлено, главным образом, как считает сам Яманэ-сан, равномерностью протекания самой реакции сульфирования, чего нельзя достичь в обычном реакторе пленочного типа вследствие слишком быстрой экзотермической реакции.

1.2. Математические модели процессов алкилирования и сульфирования

Учитывая современный уровень научно-технического развития можно с уверенностью сказать, что непрерывная и поддерживаемая в плановом режиме работа любого достаточно большого промышленного производства представляет собой довольно сложную и нетривиальную задачу. Таким образом, немаловажно не допустить или же, по крайней мере, свести к минимуму любые негативные факторы, могущие повлиять на сам непосредственно технологический процесс и нарушить режим работы установки на предприятии. Для этих целей дабы контролировать качество выпускаемой готовой продукции, а также для мониторинга самого его производства используется широкий спектр специализированного оборудования и программного обеспечения, созданного для подобных нужд.

При этом процесс производства алкилбензолсульфокислоты не является каким-либо исключением в данном вопросе. Сама по себе технология производства этого вещества является довольно сложной, поскольку зависит от многих, иногда несвязанных друг с другом, технологических параметров. По этой причине почти все компании заинтересованы в разработке различных мер для предотвращения получения некондиционной продукции и своевременного реагирования, чтобы предотвращать подобные случаи. Одним из самых распространенных и в то же время эффективных решений является подход с точки зрения математического моделирования всего технологического процесса. Целью подобных разработок является отработка и моделирование

разного рода вариантов развития событий с помощью специального программного обеспечения. Подобные события могут возникнуть в результате изменений в исходном составе сырьевых потоков, быстрого изменения различных технологических параметров и иных внешних возмущений, которым может быть подвержена система.

Данная работа как раз ставит перед собой цель оптимизации процесса производства алкилбензолсульфокислоты с использованием многотрубного пленочного реактора сульфирования путем разработки специальной математической модели под эти нужды. Главным образом это обусловлено тем, что вплоть до сегодняшнего дня не имелось полностью готового к эксплуатации подобного рода продукта, для которого имелась бы возможность реализации в виде законченного программного обеспечения для внедрения оного на реальное действующее производство. В виду этой причины перед тем, как начинать разработку необходимо: во-первых, выполнить анализ уже ранее выпущенных работ, касающихся данной темы, для того чтобы выявить основные концепции, к которым приходили ученые и инженеры для создания таких математических моделей, а во-вторых, провести ознакомление и разобраться с трудностями, с которыми они столкнулись.

Попытки первых разработок предпринимались такими учеными как Джонс и Кринес в 1974 году. Тогда они предложили простую одномерную модель, которая бы включала такие предположения и допущения, как [14]:

- отсутствие в пленке жидкой фазы каких-либо радиальных эффектов;
- также отсутствие диффузии серного ангидрида в жидкую фазу;
- постоянство толщины пленки жидкой фазы;
- вместе с этим — постоянство значения температуры воды для охлаждения;
- 20 других, физических и химических, параметров также были приняты постоянными;
- при всем при этом: мгновенное протекание реакции сульфирования в межфазе;

Несколько позже были предложены двумерные модели. Их разработчиками являлись Дэвис, в 1979 году, и Гутьеррес-Гонсалес, в 1988 году. Данные модели уже учитывали изменения толщины пленки жидкой фазы с помощью баланса импульсов с описанием температурного профиля и концентрации вещества по всей толщине пленки [14]. Тем не менее, такие модели имели некоторые ограничения, связанные, в основном, в определенными параметрами, для которых требовалась настройка. Это приводило к ограниченности в использовании модели, поскольку в таком случае требовались экспериментальные данные для каждого конкретного случая. Тем не менее, они выдвинули гипотезу о том, что реакция протекает не в межфазе, но исключительно в объеме жидкой пленки. Поэтому данные модели, кроме всего прочего, включают в себя кинетические выражения, которое бы исключало возможность протекания подобной мгновенной реакции в межфазовом пространстве.

В самом конце прошлого века – начале этого Таленс-Алессон, в 1999 году, и Аканкша, в 2007, предложили улучшенные и более универсальные двумерные модели [14]. Данные модели уже включали уравнения с частными производными второго порядка с несколькими расчетами внутри себя, как, например, итерации при расчете толщины пленки, что приводило к тому, что такие уравнения становились слишком сложными для решения. Тем не менее, были попытки использования различных видов численных методов для решения уравнений в данных моделях. Однако, в конечном итоге, все это сводилось к тому, что уравнения с частными производными второго порядка линеаризовались: как для продольных, так и для радиальных координат. Все это приводило к тому, что возникали численные ошибки, потому что линеаризация сама по себе включает в себя остаточную ошибку по теории Тейлора [14]. Тем не менее, данные модели сделали серьезный шаг: поскольку дискретизация пленки имеет огромную роль при выполнении расчетов массопереноса, поскольку использование в этом методе специальной распределительной сетки способствует уменьшению нагрузок на

вычислительные мощности, а также гарантирует относительно адекватные результаты. Беря за основу высказанную идею о делении пленки на отдельные сегменты, исследователями предпринимались попытки в области разработки различного программного обеспечения, которое бы позволило рассчитывать изменения толщины пленки с течением времени. К числу подобных программ можно причислить такие, как: «Comsol Multiphysics Software», «gPROMS Platform» и др. Тем не менее, в силу специфики данной технологии – длина промышленных реакторов может составлять от 3 до 6 метров, а толщина – около 1,5 мм – таким образом, соотношение между этими геометрическими параметрами аппарата может достигать 4000, что, в свою очередь, может потребовать значительных вычислительных мощностей и больших временных затрат, поэтому данные образцы программного обеспечения не могут в полной мере гарантировать адекватность получаемых результатов моделирования [14].

При рассмотрении самых последних исследований, проведенных за прошедшие 10 лет, можно отметить сразу множество работ, представляющих определенный интерес. Некоторые из них позволяли проводить симуляции процесса сульфирования в целом, другие – моделировали работу самого пленочного реактора сульфирования в газожидкостной среде. При этом каждая из данных работ включала в себя тепловые и массовые балансы, а также уравнения для описания сохранения импульса в реакторе. Единственными отличиями данных моделей были только подходы в предложенных взглядах на решение проблемы. Таким образом, например, в исследованиях, проведенных рабочей группой Н.Мендосы, газожидкостная среда внутри реактора моделируется в качестве двумерной системы, имеющей две координатные оси: из них z соответствует продольному направлению, в то время как y – радиальному [14]. Схема координат, которые используются в этой модели приведена на рисунке 1.7.

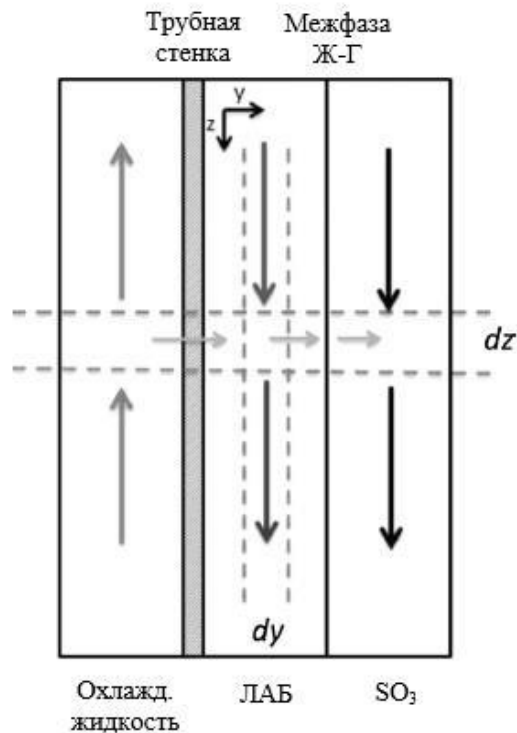


Рисунок 1.7 – Система координат, использующихся в математической модели
Н.Мендосы

В данной модели тепловой баланс выражается уравнением 1, представленным ниже, и описывает как связаны свойства жидкости и гидродинамические условия системы.

$$u_z \cdot \frac{\partial T_L}{\partial z} = \alpha \cdot \frac{\partial^2 T_L}{\partial y^2} - \frac{\Delta H_{rxn} \cdot r}{\rho_L \cdot Cp_L} \quad (1)$$

Температура жидкой фазы в виде пленки контролируется с помощью системы охлаждения в виде водяной рубашки, влияние которой может учитываться в различных моделях согласно формуле 2.

$$K_{c,L} \cdot \frac{\partial T_L}{\partial y} \Big|_0 = J \cdot U_W \cdot (T_L|_0 - T_W) \quad (2)$$

Если же рассматривать материальный баланс, то становится очевидным, что массоперенос между фазами главным образом имеет место быть в следствие разницы концентраций отдельного компонента между этими двумя фазами. Данный градиент концентраций компонентов является причиной диффузионного переноса частиц из фазы с большей концентрацией компонента

в фазу, где она меньше для того, чтобы достичь равновесия в системе. Таким образом, сразу несколько факторов являются причинами, влияющими на перенос частиц газа и частиц жидкости в реакторах, использующих пленочный принцип. К таковым относятся: условия эксплуатации, такие как, например, расход газовой смеси и жидкости, а также конструктивные параметры реактора – к примеру, площадь реакционной поверхности и толщина стекающей пленки. В основном, как правило, модели необходимо включать в себя такие два взаимосвязанных уравнения, как 3 и 4, зависящие от концентраций каждого из реагентов: смеси линейных алкилбензолов и серного ангидрида [14].

$$u_z \cdot \frac{\partial C_{SO_3}}{\partial z} = D_{SO_3} \cdot \frac{\partial^2 C_{SO_3}}{\partial y^2} - r \quad (3)$$

$$u_z \cdot \frac{\partial C_{TDB}}{\partial z} = D_{TDB} \cdot \frac{\partial^2 C_{TDB}}{\partial y^2} - r \quad (4)$$

Стоит также отметить, что в данном случае переход линейных алкилбензолов в газовую фазу не учитывался.

Уравнение описывающее явление сохранения импульса жидкой пленки органического вещества можно записать в следующем виде [14]:

$$u_z = \frac{\rho_L \cdot g}{\mu_L} \cdot \left(\delta \cdot y - \frac{y^2}{2} \right) + J \cdot \frac{\tau_G \cdot y}{\mu_L} \quad (5)$$

Это уравнение позволяет рассчитать толщину пленки органического вещества вдоль трубок реактора и ее профили скорости. При этом толщина этой пленки может быть посчитана с использованием и иного уравнения [15]:

$$\bar{\delta} = \left(\frac{0.0512 \cdot Re^{0.875} \nu}{\sqrt{\frac{2}{3} g \sin \varphi}} \right)^{2/3} \quad (6)$$

Приведенное в этом уравнении число Рейнольдса может быть выражено как:

$$Re = \frac{4\Gamma}{\mu} \quad (7)$$

где Γ – массовый расход линейного алкилбензола.

Двумя важнейшими и наиболее критическими факторами при описании поведения жидкой пленки органического вещества являются скорость ее

стекания, а также ее толщина. Данные факторы имеют самое непосредственное влияние в целом на гидродинамический режим работы реактора сульфирования. Необходимо также отметить, что при этом в реакторе помимо типичных для жидкости режимов движения – ламинарного и турбулентного, может также наблюдаться довольно специфический – волновой.

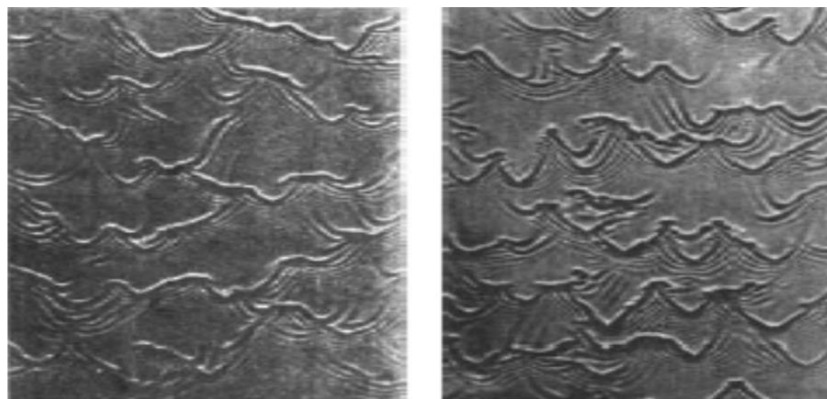


Рисунок 1.8 – Волновой режим стекания жидкости в пленочном реакторе

Если рассматривать распределение профилей скоростей при различных режимах стекания пленки жидкости, то их можно проиллюстрировать таким образом [16]:

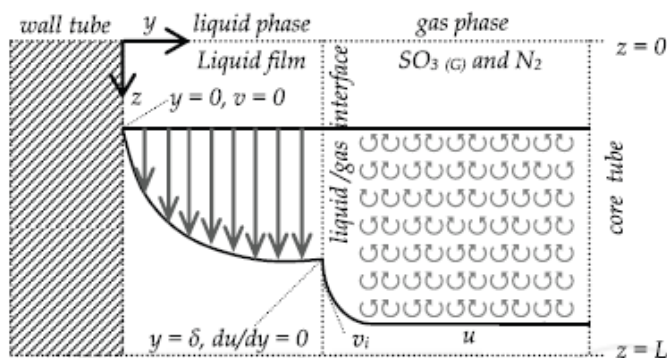


Рисунок 1.9 – Схематическое изображение распределения профилей скоростей при ламинарном и турбулентном режимах для жидкой пленки органического вещества и для газовой смеси

Заключая все вышеописанное становится очевидно, что многие исследователи неоднократно предпринимали различные попытки в создании оптимальной и адекватной математической модели для того, чтобы точно

описывать работу реактора пленочного типа для процесса сульфирования. Необходимо отметить, тем не менее, что во всех работах по данной тематике крайне малое внимание уделяется такому моменту, как влияние образования различных побочных продуктов реакции сульфирования и пересульфирования на изменения в самом процессе и выход целевого продукта – алкилбензолсульфоокислоты. Таким образом, данное упущение является существенным с точки зрения понимания и описания технологии производства данного вещества.

1.3. Компьютерные моделирующие системы для исследования химико-технологических процессов

На сегодняшний день, с развитием вычислительной техники и программного обеспечения на высоких уровнях абстракции, моделирование в химико-технологической области промышленности с целью описания различных процессов заключается, во многом, в использовании специальной компьютерной программы.

Моделирование данных процессов используется, главным образом, с целью проектирования и разработки технологических линий в химическом и нефтехимическом производстве, а также для их и уже существующих анализа и оптимизации.

Таким образом, для нефтехимической промышленности в частности были созданы различные программные пакеты для подобного рода задач

1.3.1. Aspen HYSYS

В программном комплексе HYSYS расчеты реализованы посредством генерации псевдокомпонентов на основе введенных данных, как если бы это были заданные свойства. Помимо этого в HYSYS реализованы встроенные менеджеры, выполняющие организацию данных отдельно для

псевдокомпонентов. Данное программное обеспечение также имеет функционал для организации эффективного рабочего процесса в целях проектирования производства, определения примерных размеров оборудования и предварительной оценки стоимости проекта и его составляющих[17].

ASPEN HYSYS также предоставляет достаточно гибкую и удобную многоуровневую архитектуру сред моделирования. Кроме того, интерактивность реализации графического и аппаратного интерфейсов HYSYS дает возможность пользователям в короткие сроки создавать и эффективно применять созданные модели.

В ASPEN HYSYS реализована комплексная термодинамическая платформа, использующаяся для точного расчета физических свойств, расчетов, которые необходимо учитывать при транспортировке веществ, а также для описания поведения фаз многофазных систем в нефтяной, газовой и нефтеперерабатывающей промышленности.

Внутри комплексной библиотеки моделей модульного проектирования и эксплуатации находятся модели многокомпонентной дистилляции и иные модели разделения, реакторы различного гидродинамического и теплового режимов, модели теплопередачи, аппараты создания дополнительного давления: насосы и компрессора, контроллеры, как для статического режима среды, так и для динамического[18].

1.3.2. PRO/II

PRO/II Process Engineering позволяет оптимизировать производительность производства посредством совершенствования рабочего процесса проектирования и анализа технологического процесса и его исследования с инженерной точки зрения. Созданный для точных расчетов тепловых и материальных балансов для решения широкого спектра задач и проблем в химико-технологическом производстве, PRO/II предлагает большое

количество термодинамических моделей практически для любой области данной отрасли промышленности. Таким образом, все вышеперечисленное делает данное программное обеспечение средством повышения экономической эффективности, что означает снижение как капитальных, так и эксплуатационных расходов [19].

С помощью встроенной системы Cleopatra Cost Engineering данное программное обеспечение позволяет сравнивать и анализировать затраты, уходящие на реализацию проекта. Данная функция позволяет ускорить процесс проектирования из-за применения точных, всесторонних оценок затрат и оценки возможных альтернативных путей решения проблем на всем протяжении цикла разработки проекта.

1.3.3. UniSim Design

UNISIM, производства компании Honeywell Process Solutions, предоставляет пользователю возможность реализовать моделирование производственных процессов с помощью интуитивно понятного и интерактивного подхода к, собственно, моделированию процессов и их оптимизации.

Посредством полностью интерактивного графического интерфейса UNISIM, предоставляет доступ к различным уровням настройки геометрических параметров аппаратов, характеристикам, имеющих влияние на их производительность, а также возможность полной настройки проектируемой симуляции с использованием масштабируемости.

Одна из главных и основополагающих концепций заключается в том, что архитектура UNISIM состоит из сред различного уровня. Базовая среда моделирования позволяет вводить данные или же предоставляет доступ к полученной в результате расчетов информации в менеджере данной среды моделирования, в то время как другие среды системы временно

приостановлены, во избежание излишнего использования вычислительных мощностей [20].

После того, как в среде моделирования будут все необходимые данные, все изменения, вызванные этим, вступят в силу сразу же после этого. Верно и обратное: все данные о термодинамических условиях системы будут зафиксированы и не будут подвержены изменениям, если манипуляции над технологической схемой будут происходить внутри среды моделирования.

1.3.4. VMGSim

VMGSim используется на многих производствах как для моделирования уже существующих технологических процессов, так и проектирования совершенно новых объектов с самого начала.

Имея в своем каталоге более 20000 веществ, более чем 80 пакетов термодинамических моделей и сотни моделей аппаратов и производственных установок, VMGSim позволяет проводить расчеты разной степени сложности с высокой точностью [21].

Тем более, что данное программное обеспечение проводит построение моделей, беря за основу строго определенные термодинамические соотношения, поэтому нуждается только в информации, необходимой исключительно для этих целей, что позволяет сэкономить время и вычислительные мощности.

2. Теоретическая часть.

2.1. Технологическая схема процесса алкилирования

На рисунке 2.1 представлена принципиальная технологическая схема процесса получения линейных алкилбензолов – алкилирования бензола неразветвленными насыщенными углеводородами.

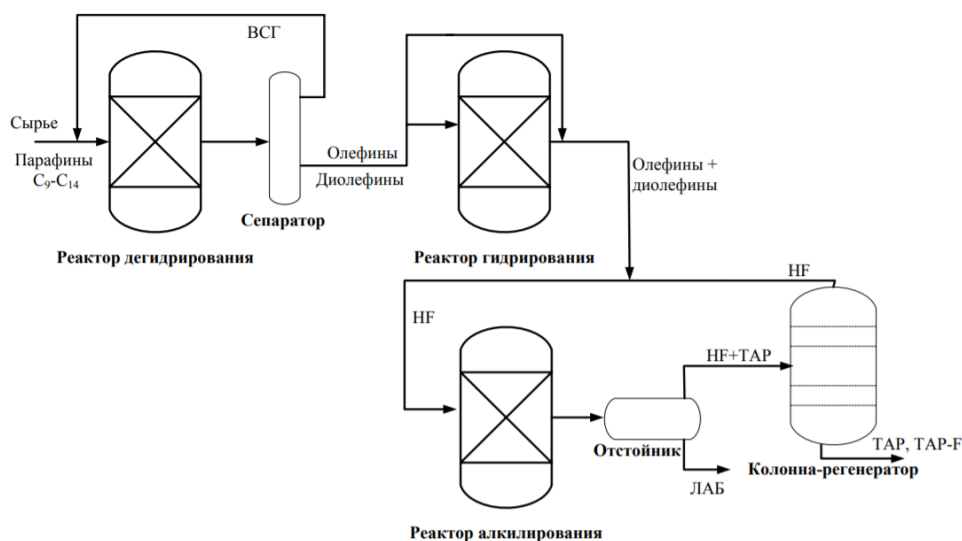


Рисунок 2.1 - Принципиальная технологическая схема процесса алкилирования

Установка производства линейных алкилбензолов представляет собой совокупность протекающих одна за другой этапов дегидрирования неразветвленных алканов до диолефинов, селективного гидрирования полученных диенов с последующим алкилированием ими бензола [22].

Таким образом, первым этапом к получению линейных алкилбензолов становится дегидрирование неразветвленных насыщенных углеводородов с длиной углеродной цепи от 9 членов до 14 в реакторе дегидрирования на платиносодержащих катализаторах [23].

Выходящий из этого реактора поток содержит в себе водородсодержащий газ и диолефины. Таким образом, на следующей стадии – в сепараторе, газовый поток и поток органического вещества должны быть

разделены. При этом, водородсодержащий газ, выделенный на данном этапе, отправляется на рецикл, для того, чтобы поддерживать уровень выхода диолефинов на требуемом уровне.

Следующим шагом является селективное гидрирование диенов в реакторе гидрирования на никелевом катализаторе – таким образом, в результате соответствующей реакции получают неразветвленные олефины [24].

Выходящие из реактора гидрирования олефины смешиваются с жидким катализатором алкилирования – фтороводородной кислотой.

Наконец, заключительным этапом является алкилирование бензола в соответствующем реакторе. В ходе данного процесса возможно также образование тяжелых ароматических соединений. По этой причине, а также для того, чтобы произвести регенерацию фтороводородного катализатора, выходной поток реактора алкилирования направляется в отстойник. В данном отстойнике имеются два выходных потока: собственно, целевой, состоящий из смеси линейных алкилбензолов, а также другой, содержащий отработанный катализатор и смесь тяжелых ароматических соединений. Последний отправляется, в свою очередь в колонну-регенератор.

Таким образом, необходимо отметить, что помимо описанных выше стадий технология алкилирования предусматривает также и ряд вспомогательных этапов. Их важность, тем не менее, можно сопоставить с оных основных процессов, поскольку благодаря ним определяется рабочее состояние данного технологического процесса в целом. Одной из подобных стадий и является регенерация жидкого кислотного катализатора HF в ректификационной колонне-регенераторе, упомянутой выше. Как уже говорилось до этого, данная колонна-регенератор используется для удаления из потока кислотного катализатора ненасыщенных продуктов, имеющих высокую температуру кипения – таких как, например, тяжелых ароматических соединений, накапливающихся в фтороводородном потоке по причине их высокой растворимости в кислоте.

2.2. Технологическая схема процесса сульфирования

В Приложении А представлена технологическая схема узла сульфирования линейных алкилбензолов триоксидом серы, предназначенного для производства алкилбензолсульфокислоты.

Сначала необходимо подготовить газообразное сырье для процесса сульфирования – получить серный ангидрид. Для этого, вначале, очищенный от влаги воздух подается в печь сжигания серы. В то же время туда же поступает из емкости Е-609 жидкая сера. Таким образом, из данной печи, в следующий на линии аппарат – теплообменник типа «труба в трубе» - выходит газовая смесь, содержащая в себе SO_2 , которая охлаждается в этом теплообменнике до 420-450°C воздухом. Далее данная охлажденная газовая смесь направляется в конвертер С-2111 для того, чтобы там диоксид серы окислился до триоксида. На выходе из третьей полки этого реактора конверсии газовый поток направляется в очередной теплообменник – Е-2114, после прохождения которого он охлаждается до 220°C. Затем охлажденный таким образом в теплообменнике Е-2114 газовый поток поступает в другой холодильник Е-2115 для того, чтобы подвергнуться окончательному охлаждению до температуры 40°C [25].

Непосредственно сам процесс сульфирования линейных алкилбензолов происходит в специальном пленочном многотрубном реакторе. Органическое жидкое сырье – смесь линейных алкилбензолов – подается в дозировочный сосуд V-2211. Из данной дозировочной емкости смесь линейных алкилбензолов поступает на распределительное устройство многотрубного пленочного реактора R-2211. Триоксид серы, при этом, подводится через верх реактора, после чего проходит в распределительное устройство, попадая оттуда в трубки реактора, где происходит реакция сульфирования с образованием алкилбензолсульфокислоты, стекающей в нижнюю часть многотрубного пленочного реактора. Реакция сульфирования является экзотермической,

поэтому выделяющееся тепло отводится с помощью охлаждающей воды, проходящей в межтрубном пространстве.

Из сборной камеры, расположенной в нижней части реактора, поток продуктов реакции отводится к циклону CV-2211, где происходит разделение газовой и жидкой фаз. Также перед циклоном оборудован предварительный сепаратор SE-2212, внутри которого производится выделение алкилбензолсульфокислоты из потока газовой смеси в нижней части циклона. При этом газообразный поток отводится на узел адсорбции, в то время как жидкая фаза откачивается и разделяется на два потока. Первый из них направляется в теплообменник пластинчатого типа E-2211, в то время как второй поток алкилбензолсульфокислоты отводится на стабилизацию внутри емкостей V-2212-2215 соединенных последовательно. Таким образом, в дальнейшем кислота поступает в мешалку SM-2211, где ангидриды сульфоновой кислоты подвергаются гидролизу. При этом, также диминерализованная вода подводится к мешалке. После проведения гидролиза качество полученной алкилбензолсульфокислоты проверяется в лабораторных условиях. Следующим этапом является ее отправка на хранение в качестве готового к отгрузке потребителям продукта, либо из нее можно также получить натриевую соль сульфоновой кислоты.

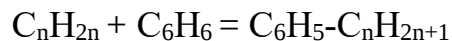
Таким образом, целевым продуктом всего производства является алкилбензолсульфокислота, требования к которой представлены в Приложении Б [26].

2.3. Химизм процесса алкилирования

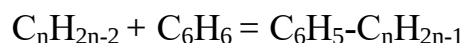
2.3.1 Алкилирование бензола алкенами

Внутри реактора алкилирования жидкое органическое сырье, которым является смесь неразветвленных алкенов с формулой C_nH_{2n} , где n является длиной углеродной цепи молекулы данного неразветвленного алкена, значение

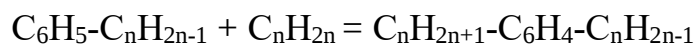
которого лежит в пределах от 9 до 14, вступает во взаимодействие с бензолом в присутствии фтороводородного катализатора. В результате данной реакции происходит образование молекул линейных алкилбензолов по следующей реакции:



Тем не менее, помимо представленной реакции алкилирования возможно, также, протекание побочных реакций в числе которых реакция, приводящая к образованию непредельных линейных алкилбензолов, что имеет место быть, вследствие неполного гидрирования – остатки непрореагировавших диолефинов попадают в реактор гидрирования с предыдущего этапа производства.



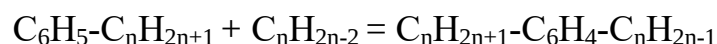
При этом, процесс алкилирования подобных непредельных алкилбензолов может пойти и дальше. Вступая во взаимодействие с олефинами, данные вещества образуют, соответственно, непредельные диолефины по следующей реакции:



Аналогично этому процессу может также происходить дальнейшее алкилирование целевого продукта – предельных линейных алкилбензолов, с образованием, в результате этой реакции, линейных диалкилбензолов.



Помимо этого, становится уже очевидно, что линейные алкилбензолы могут также вступить в реакцию и с диолефинами. Продуктами данной реакции также являются непредельные алкилбензолы.

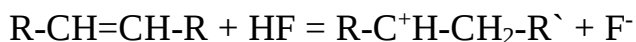


2.3.2 Механизм реакции алкилирования

Как уже было указано ранее, в качестве катализатора реакции алкилирования бензола в рассматриваемом процессе используется

фтороводородная кислота. Тем не менее, на практике возможно также применение и других катализаторов на базе кислот Льюиса, как, например, фторида бора или хлорида алюминия [27].

Первым этапом алкилирования бензола олефинами является, при объяснении механизма данной реакции, обычно считается образование карбокатиона, в следствие протонирования алкена кислотой, в данном случае - фтороводородной:



Следом за этим происходит реакция присоединения карбокатиона к бензолу:

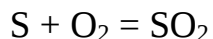


Таким образом, в рассматриваемых в данной работе случаях, при алкилировании бензола высшими алкенами, механизм реакции практически идентичен оному для случаев алкилирования низшими олефинами. Тем не менее, существуют значительные отличия в ходе протекания вторичных взаимодействий. Таким образом, в результате реакции алкилирования бензола различными высшими линейными олефинами среди продуктов реакции статистически почти всегда будут присутствовать любые возможные изомеры линейных алкилбензолов. Необходимо также отметить, что возникновение данного явления ни коим образом не находится в зависимости от того, где изначально была расположена двойная связь в исходном алкене. Найти объяснение подобному образованию изомеров среди линейных алкилбензолов можно в том, что двойная связь в алкенах осуществляет свою миграцию до, собственно, вступления в реакционное взаимодействие непосредственно с бензолом. Другим же возможным объяснением возникновения данного явления может служить начало реакции изомеризации или трансалкилирования среди уже образовавшихся к тому моменту линейных алкилбензолов.

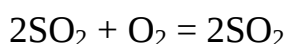
2.4. Химизм процесса сульфирования

2.4.1. Подготовка газовой смеси SO₃

На начальном этапе подготовки газовой смеси жидкая сера подвергается сжиганию в избытке осушенного воздуха. В результате данной операции образуется сернистый ангидрид – диоксид серы, по следующей реакции:



Полученный таким образом диоксид серы в дальнейшем подвергается каталитическому окислению в среде с избытком воздуха, очищенного от влаги, на поверхности катализатора, содержащем в своем составе пятиокись ванадия (V₂O₅). В результате этой реакции уже образуется серный ангидрид – триоксид серы, по следующей реакции:



При этом значение температуры газовой смеси при поступлении на первый слой катализатора в реакторе должно находиться в пределах 420-450°C, в то время как содержание SO₂ должно быть не более 7,5% об. Таким образом, в данном слое катализатора большая часть диоксида серы окисляется до триоксида. Заданный интервал температур существует по той причине, что, если температура будет ниже 420°C, то будет наблюдаться резкое падение скорости реакции, тогда как превышение отметки в 450°C недопустимо, поскольку температура растет до 600°C после прохождения первого слоя. При этом необходимо отметить, что с увеличением температуры степень превращения уменьшается. Помимо этого, слишком высокие температуры отрицательно сказываются на структуре твердого катализатора.

Обе реакции являются экзотермическими, и для отвода выделившегося тепла предусмотрены теплообменники. В конвертерах после первого слоя катализатора поток направляется в теплообменный аппарат, где охлаждается от 590°C до 440°C перед поступлением во второй слой катализатора. Охлаждение

потока после второго слоя катализатора осуществляется подачей осушенного воздуха.

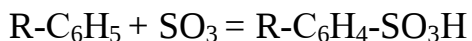
Чем выше концентрация триоксида серы, тем выше скорость реакции сульфирования, тем больше тепла выделяется в единицу времени. Поэтому не следует превышать концентрацию серного ангидрида выше 5,5 % об.

В связи с наличием некоторого количества влаги в осушенном воздухе, SO_3 и H_2O при взаимодействии образуют серную кислоту по следующей реакции:



2.4.2 Сульфирование линейных алкилбензолов серным ангидридом

Внутри многотрубного пленочного реактора жидкое органическое сырье, которым является смесь линейных алкилбензолов с формулой $\text{R-C}_6\text{H}_5$, где R является радикалом молекулы неразветвленного алкана с числом углеродных атомов от 9 до 14, вступает во взаимодействие с триоксидом серы. В результате данной реакции происходит образование молекул алкилбензолсульфокислоты по следующей реакции [25]:



Тем не менее, помимо представленной реакции сульфирования возможно, также, протекание побочных реакций в числе которых реакция, приводящая к образованию ангидрида сульфоновой кислоты или, что тоже имеет место быть, реакция образования, собственно, одного из видов сульфоновой кислоты, такой как, например, пиросульфоновая кислота.

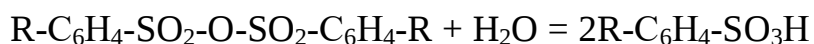
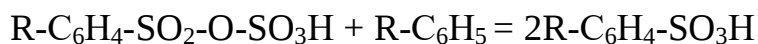


Кроме того, в процессе сульфирования образуются сульфоны. Их количество в сульфоновой кислоте мало зависит от параметров технологического режима и составляет около 1 % масс., но при превышении мольного соотношения $\text{SO}_3/\text{ЛАБ}$ более 1,08 происходит резкое увеличение

скорости их образования. В АБСК сульфоны входят в несульфированную часть. Сульфоны имеют следующую структурную формулу:



В процессе образования сульфоновой кислоты вышеуказанные соединения, кроме сульфонов, разлагаются или реагируют непосредственно с остаточным ЛАБ, или при перемешивании гидролизуются водой по следующим реакциям:



Высокая концентрация SO_3 , и высокое молярное соотношение SO_3 : ЛАБ приводят, кроме того, к деалкилированию алкилбензола с образованием непредельных углеводородов (олефинов), которые полимеризуются, образуя смолистые соединения и, тем самым, ухудшают цвет сульфоновой кислоты.

2.4.3 Механизм реакции сульфирования

На сегодняшний день существуют несколько отличающихся друг от друга гипотез о протекании реакции сульфирования органических веществ.

Например, одна из них заключается в следующем:

1) Сульфирование само по себе относится, по сути, к достаточно типичным реакциям электрофильного замещения. При этом оно также следует всем присущим такому типу реакций закономерностям и законам [28].

Первая стадия сульфирования ароматических углеводородов, в данном случае линейных алкилбензолов, триоксидом серы, согласно данной гипотезе, заключается в электрофильной атаке атома углерода молекулой серного ангидрида с промежуточным образованием σ - и π -комплексв, как представлено на рисунке 2.2.

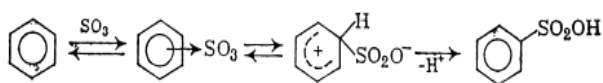


Рисунок 2.2 - Сульфирование ароматических углеводородов с промежуточным образованием σ - и π -комплексв

Реакция протекает практически мгновенно, поскольку имеет первый порядок как по ароматическому соединению, так и по серному ангидриду. При этом скорость самой реакции зависит от диффузионных параметров, так и, в большей степени, от интенсивности перемешивания и, в то же время, своевременного отвода, выделяющегося в больших количествах тепла экзотермической реакции [29].

2) Тем не менее, гипотеза о механизме протекания реакции сульфирования, отраженном на рисунках 2.3 и 2.4, получила наиболее широкое распространение. Согласно данной теории, считается, что процесс сульфирования органического вещества берет начало с реакции, где во взаимодействие вступают триоксид серы и линейные алкилбензолы (ЛАБ), в результате чего образуются алкилбензолсульфокислоты и просульфокислоты, выступающих, в данном случае, как промежуточные соединения (рисунок 2.3). Таким образом, на данном этапе, пиросульфоновая кислота вступает во взаимодействие с линейными алкилбензолами (1), для того чтобы в результате образовались 2 моль эквивалентной алкилбензолсульфокислоты (6), как это проиллюстрировано на рисунке 2.3. При этом, один из подобных мольных эквивалентов можно рассматривать с той позиции, что это, по сути, является заменой одного потребляемого на первом этапе, в то время как другой может рассматриваться в качестве фактора увеличения конверсии [9,10].

К известным на данный момент побочным реакциям можно отнести такие реакции, как: образование различных сульфонов, которые обычно на практике рассматриваются как неактивные побочные продукты, ангидридов целевой сульфоновой кислоты, а также серной кислоты.

При этом, пиросульфоновая кислота, а также ангидрид сульфоновой кислоты вступают в дальнейшую реакцию с линейными алкилбензолами или водой, соответственно, будучи побочными продуктами, для получения, собственно, целевого продукта – алкилбензолсульфокислот [30].

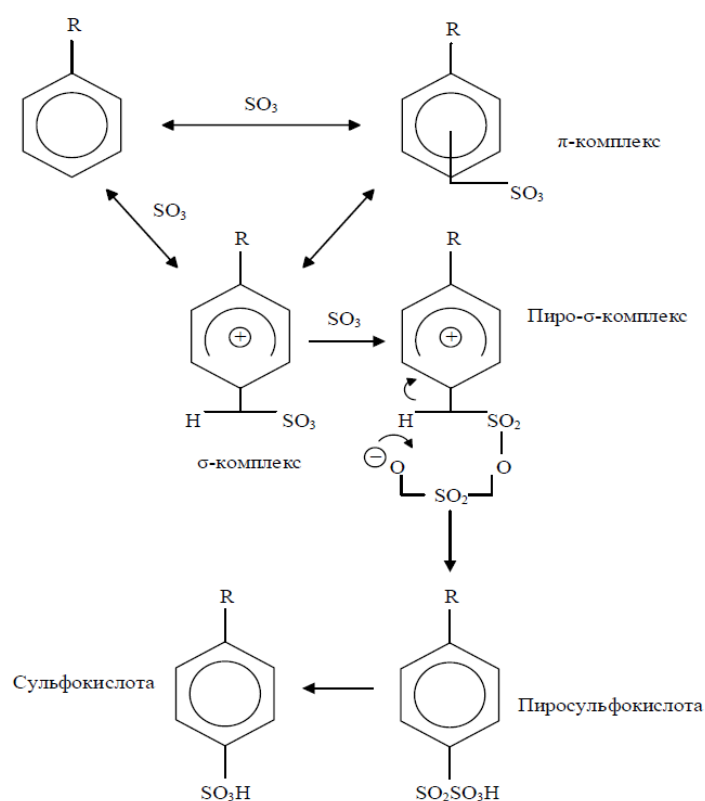


Рисунок 2.3 - Первичная реакция взаимодействия линейных алкилбензолов с серным ангидридом

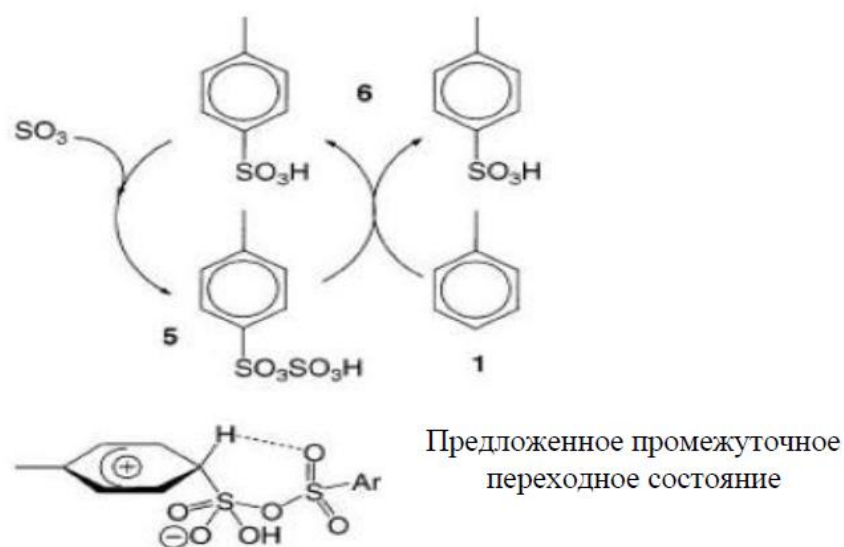


Рисунок 2.4 – Основная реакция: в данном случае пиросульфоновая кислота выполняет роль сульфлирующего реагента

Таким образом, становится очевидно, что, имея представление о механизме протекания целевой реакции, становится возможно предотвратить протекание побочных реакций, с помощью воздействия на внешние

макропараметры, такие как, например: температура, мольное соотношение и т.п.

2.5. Кинетические модели

В таблице 2.1 представлены термодинамические параметры существующих реакций, протекающих в процессе сульфирования линейных алкилбензолов при температуре 25°C и давлении 0.04 Мпа.

Таблица 2.1 - Термодинамические параметры реакций

№	Реакция	ΔG , кДж/моль	ΔH , кДж/моль
1	$R-C_6H_5 + SO_3 = R-C_6H_4-SO_3H$	-233,3	-209,8
2	$R-C_6H_5 + 2SO_3 = R-C_6H_4-SO_2-O-SO_3H$	-92,6	-181,2
3	$R-C_6H_5 + SO_3 = \text{эфиры} + H_2O$	-34,8	-161,9
4	$R-C_6H_5 + R-C_6H_4-SO_2-O-SO_3H = 2ABCK$	-37,1	-140,7
5	$R-C_6H_5 + ABCK = R-C_6H_4-SO_2-C_6H_4-R' + H_2O$	-1,3	-227,6
6	$2R-C_6H_4-SO_3H + SO_3 = R-C_6H_4-SO_2-O-SO_2-C_6H_4-R + H_2SO_4$	-47,7	-162,9
7	$\text{эфиры} + H_2O = \text{спирты}$	-92,6	-181,2
8	$C_6H_5-C_nH_{2n-1} + SO_3 = C_6H_5-C_nH_{2n-2}-SO_3H$	-274,5	-197,8
9	$C_6H_5-C_nH_{2n-1} + SO_3 = R-C_6H_4-SO_2-C_6H_4-R'$	-253,1	-168,9
10	$R-C_6H_4-SO_2-O-SO_2-C_6H_4-R + H_2O = 2R-C_6H_4-SO_3H$	-191,5	-153,2

Как можно заметить в данной таблице, термодинамическая вероятность прохождения реакции сульфирования непредельных линейных алкилбензолов, то есть, алкилирование по боковой цепи, содержащей двойную связь, выше, чем она для реакции сульфирования по, собственно, бензольному кольцу, то есть, непосредственно целевой реакции. Данное обстоятельство объясняется тем, что алкеновый радикал имеет более высокую реакционную способность. Таким образом, можно сделать вывод, что повышенное содержание в составе сырья непредельных линейных алкилбензолов становится причиной того, что течение побочных реакций становится более интенсивным.

Также стоит обратить внимание, что при термобарических параметрах проведения процесса сульфирования в промышленных условиях абсолютно все рассматриваемые здесь реакции осуществимы с термодинамической точки

зрения. Стоит отметить при этом, что ангидриды алкилбензолсульфокислот и пиросульфокислот в данном случае являются, по сути, веществами-интермедиатами в реакциях образования, собственно, алкилбензолсульфокислот, в то время как реакция, в которой образуются сульфоны является обратимой при данных условиях.

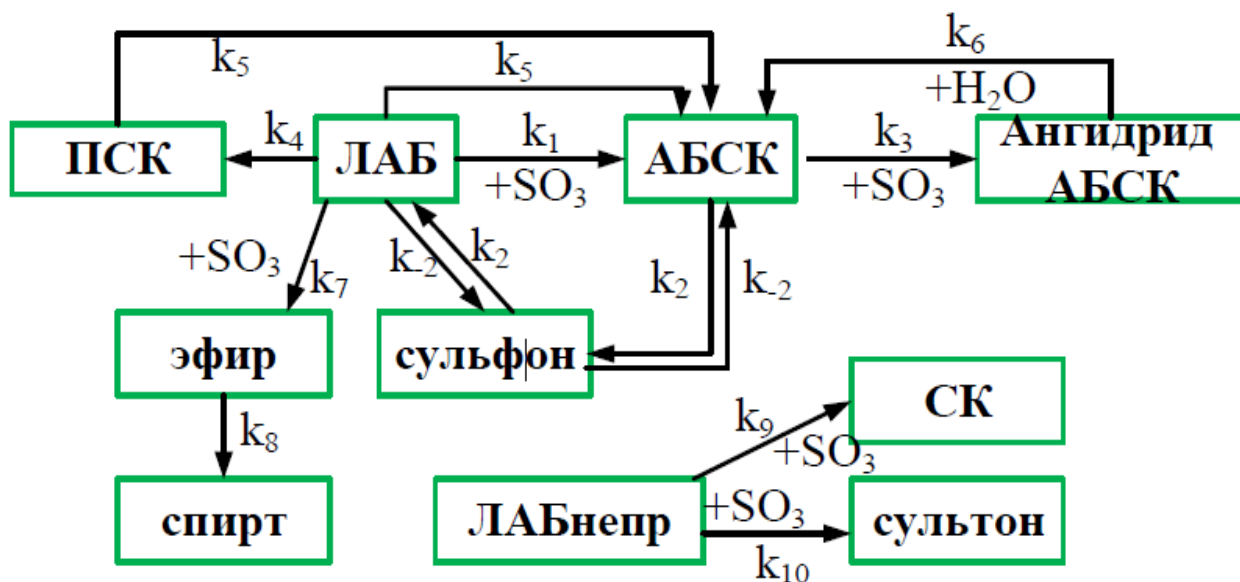


Рисунок 2.5 – Превращения углеводородных соединений в ходе процесса сульфирования

Сульфоны являются кристаллическими веществами: так, температура плавления таких соединений, как дифенилсульфоны составляет примерно 128-130°C. При этом, для них характерна как высокая химическая стабильность, так и термическая [4,11]. Вместе с тем, находясь одновременно в смеси с алкилбензолсульфокислотами и серной кислотой они могут переходить в раствор.

Необходимо также обратить внимание, что такие компоненты, как: эфиры, спирты, сульфоны и кислоты по боковой цепи рассматривались под обобщающим понятием «несульфированные соединения», поскольку выделение каких-то конкретных веществ, которые входят в состав данной несульфированной части алкилбензолсульфокислот не видится достаточно целесообразным.

С учетом всего вышеперечисленного, конечная готовая формализованная схема взаимодействий углеводородных соединений в ходе процесса сульфирования линейных алкилбензолов серным ангидридом будет выглядеть, как это представлено на рисунке 2.6.

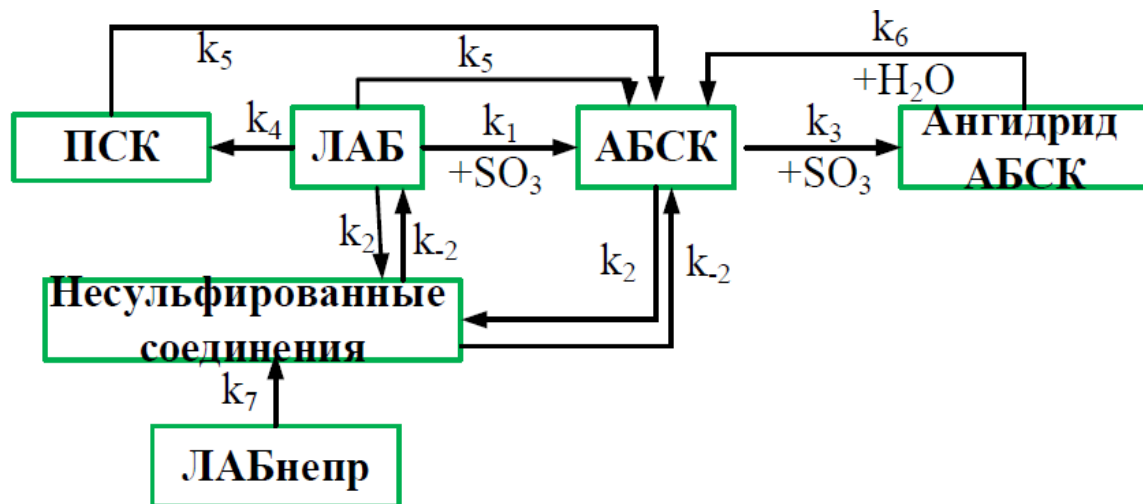


Рисунок 2.6 – Формализованная схема превращений углеводородных соединений в ходе процесса сульфирования

Таким образом, основываясь на выработанной формализованной схеме превращений углеводородных соединений были составлены выражения скоростей реакций, составляющих процесс сульфирования:

$$W_1 = k_1 \cdot C_{\text{ЛАБ}} \cdot C_{\text{SO}_3}$$

$$W_2 = k_2 \cdot C_{\text{АБСК}} \cdot C_{\text{ЛАБ}}$$

$$W_{-2} = k_{-2} \cdot C_{\text{несульф.соед}} \cdot C_{\text{H}_2\text{O}}$$

$$W_3 = k_3 \cdot C_{\text{АБСК}}^2 \cdot C_{\text{SO}_3}$$

$$W_4 = k_4 \cdot C_{\text{ЛАБ}} \cdot C_{\text{SO}_3}^2$$

$$W_5 = k_5 \cdot C_{\text{ПСК}} \cdot C_{\text{ЛАБ}}$$

$$W_6 = k_6 \cdot C_{\text{ангидр.АБСК}} \cdot C_{\text{H}_2\text{O}}$$

$$W_7 = k_7 \cdot C_{\text{ЛАБнепр}} \cdot C_{\text{SO}_3}$$

Следовательно, сама кинетическая модель процесса сульфирования будет иметь следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_{\text{ЛАБ}}}{dt} = -W_1 - W_2 + W_{-2} - W_4 - W_5 \\ \frac{dC_{\text{АБСК}}}{dt} = W_1 - W_2 + W_{-2} - 2W_3 + 2W_5 + 2W_6 \\ \frac{dC_{\text{SO}_3}}{dt} = -W_1 - W_3 - 2W_4 - W_7 \\ \frac{dC_{\text{несульф}}}{dt} = W_2 - W_{-2} + W_7 \\ \frac{dC_{\text{ангидрид}}}{dt} = W_3 - W_6 \\ \frac{dC_{\text{ПСК}}}{dt} = W_4 - W_5 \\ \frac{dC_{\text{H}_2\text{SO}_4}}{dt} = W_3 \\ \frac{dC_{\text{H}_2\text{O}}}{dt} = W_2 - W_{-2} + W_6 \\ \frac{dC_{\text{ЛАБнепред}}}{dt} = -W_7 \end{array} \right.$$

Тогда, если сделать допущение о режиме работы, как о режиме идеального вытеснения, математическая модель процесса сульфирования будет иметь следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} G \frac{\partial C_i}{\partial Z} + G \frac{\partial C_i}{\partial V} = \sum_j W_j \alpha_j \\ G \frac{\partial C_i}{\partial Z} + G \frac{\partial C_i}{\partial V} = \frac{1}{C_p} \sum_j W_j \cdot \Delta H_j \cdot \alpha_j, \end{array} \right.$$

где G – массовый расход, кг/ч;

C_i – концентрация i -го компонента, моль/л;

W_j – скорость химической реакции, м³/(моль·с);

C_p – массовая теплоемкость реакционной смеси, Дж/(кг·К);

T – температура, К;

ΔH_j – тепловой эффект химической реакции, Дж/моль;

α_j – активность реакционной среды в реакторе.

Начальные условия при этом следующие: $Z = 0$, $V = 0$, $C_i = C_i^{\text{in}}$, $T = T^{\text{in}}$.

Таким образом, модель предоставляет расчетные выходные данные, перечисленные в таблице 2.2. В данной таблице также представлены

экспериментальные входные данные, полученные с производства, необходимые для проведения расчетов.

Таблица 2.2 - Входные и выходные параметры математической модели

Входные параметры модели	Выходные параметры модели
- расход и состав ЛАБ (содержание компонентов определенной длины цепи и наличие непредельных соединений); - расход серы (соотношение расхода SO_3 к ЛАБ); - температура потока охлаждающей воды.	- выработка АБСК (выход кислоты, % масс.); - расход серной кислоты; - массовая доля несulfированных соединений в сульфокислоте.

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Предпроектный анализ

Нефтехимическая промышленность – важнейшая отрасль, формирующая экономику страны. Углеводороды нефти находят широкое применение в виде источника сырья для производства необходимых в хозяйстве веществ. Различными способами из них получают компоненты, необходимые для производства пластмасс, синтетического текстильного волокна, синтетического каучука, спиртов, кислот, синтетических моющих средств (СМС) и т.д.

Целевой рынок – нефтехимические предприятия, на которых будет продаваться в будущем разработка. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга) [x].

4.1.1 Потенциальные потребители

Для анализа целевой аудитории, будущих возможных потребителей результатов исследования, необходимо рассмотреть необходимую нишу целевого рынка и сегментировать его.

Целевым рынком называются те сегменты рынка, где в дальнейшем будет производиться реализация разработки. Таким образом, сегментом рынка является обособленная часть рынка, внутри которой потребители имеют какие-либо общие признаки внутри нефтехимической промышленности.

В свою очередь, сегментированием называется дифференциация потребителей однородные на группы, внутри которых покупатели имеют одинаковые или похожие запросы на товары или услуги.

Результат НИР – применение имитационной динамической модели процесса производства АБСК, достижение оптимальных показателей качества продукта. Для данной работы целевым рынком являются предприятия нефтеперерабатывающей отрасли различных размеров, образовательные учреждения, научно-исследовательские институты и проектные организации.

На рисунке 4.1 представлена карта сегментирования рынка по виду оказываемой услуги с применением математической модели процесса производства АБСК [31,32,33].

Потребитель	Вид услуги		
	Продажа программного продукта	Оказание услуг по мониторингу и оптимизации	Продажа тренажера
Крупные НПЗ			
Средние НПЗ			
Мелкие НПЗ			
Образовательные учреждения			
Проектные организации			

Aspen Tech.
 Chemstations
 Invensys

Рисунок 4.1 – Карта сегментирования рынка услуг

Поскольку разрабатываемая технология имеет значение в области промышленности, целесообразно также провести сегментирование по критериям, характерным для B2B рынков, где потребителями являются юридические лица, как то: промышленные предприятия, компании и фирмы. В таблицах 4.1 и 4.2 представлены макро и микропеременные для сегментирования, а также их возможные значения.

Таблица 4.1 – Макропеременные критерии сегментирования целевого B2B рынка

Отрасль народного хозяйства по ОКВЭД ОК 029-2014 (КДЕС Ред.2)	Все предприятия входящие подраздел 06 — «Добыча сырой нефти и природного газа» (кроме 06.10.2 «Добыча горючих (битумозных) сланцев, песка и озокерита»); 09.10.4 – Сжижение и обогащение природного газа на месте добычи для последующей транспортировки; 09.10.9 – Предоставление прочих услуг в области добычи нефти и природного газа;
Размер организации	Представители крупного и среднего бизнеса
Географическое расположение	Международные, национальные и областного значения;
Характеристика производственных мощностей	Высокая или средняя степень автоматизации и производительности; Без привязки к возрасту оборудования и географическому положению;
Интенсивность потребления	Постоянный клиент, поскольку программа предусматривает постоянную модернизацию;
Тип потребляемой продукции	Продукты и услуги

Таблица 4.2 – Микропеременные критерии сегментирования целевого B2B рынка

Стратегия закупок	Стратегия гарантии поставок и стратегия обеспечения конкурентноспособности
Важность закупки	Высокая и средняя
Стиль принятия решения	Риск-принимающие

Таким образом, нишей для реализуемого проекта являются предприятия крупного и среднего бизнеса в области ТЭП, имеющие высокую степень компьютеризации производства и готовые обучать персонал к применению новой технологии. Также предприятие должно нуждаться в какой-то степени в данной технологии в целях поддержания конкурентоспособности и пойти на

определенные риски, поскольку разрабатываемая модель пока еще не апробирована в условиях реального эксперимента.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам. Важно реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения.

Был проведен сравнительный анализ различных программных обеспечений, позволяющих смоделировать процесс нефтепереработки.

Лидирующие позиции в настоящее время занимают продукты компаний – Aspen Technologies, Chemstations, Invensys. Программные продукты перечисленных компаний дают возможность выполнять расчеты основных конструктивных характеристик, оценку стоимости оборудования, разрабатывать и отлаживать схемы регулирования процессов и т.д. Программы DESIGN II (WinSim), КОМФОРТ (ChemFort), GIBBS (Топэнеробизнес) предоставляют значительно меньше возможностей и позволяют рассчитывать лишь ограниченный круг задач инженера – технолога. Главным недостатком таких систем является то, что они лишены прогнозирующей способности, и не являются чувствительными к составу перерабатываемого сырья. А для моделирования процессов с участием химических превращений необходим набор кинетических параметров, которые

определяются с использованием разрабатываемой системы. Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений представлена в таблице 4.3.

Таблица 4.3 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Выход продукта	0,25	5	5	4	1,25	1,25	1,0
2. Энергоемкость процессов	0,05	5	4	4	0,25	0,2	0,2
3. Качество продукта	0,3	4	5	3	1,2	1,5	0,9
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Цена	0,2	5	3	4	1,0	0,6	0,8
2. Конкурентоспособность продукта	0,1	4	4	3	0,4	0,4	0,3
3. Финансирование научной разработки	0,1	2	5	4	0,2	0,5	0,4
Итого	1				4,3	4,45	3,6

Б_ф – продукт проведенной исследовательской работы;

Б_{к1} – DESIDNI II;

Б_{к2} – КОМФОРТ;

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i \quad (19)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i-го показателя.

Оценочная карта позволяет сделать вывод, что продукт исследовательской работы относительно конкурентоспособен на российском рынке. Модель является чувствительной к составу сырья, адаптируется под изменение условий процесса. Цена на данный продукт значительно ниже цены, конкурентов. Однако, ее функциональность значительно ограничена, в то время

как другие программные пакеты позволяют рассчитывать гораздо большее число процессов. Также не стоит забывать о высоком авторитете рассматриваемых компаний, который присутствуют на рынке не один год.

4.1.3 Диаграмма Исикавы

Диаграмма «рыбьей кости», профессора Токийского Университета Каору Исикавы (Cause-and-Effect-Diagram) - это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

Областями применения диаграммы являются:

- Выявление причин возникновения проблемы;
- Анализ и структурирование процессов на предприятии;
- Оценка причинно-следственных связей.

Построение диаграммы начинают с формулировки проблемной области и/или темы, которая является объектом анализа и наносится на центральную горизонтальную стрелку диаграммы. Затем выявляются факторы и/или группы факторов, влияющие на объект анализа. Часто, для выявления таких факторов используется прием 6М:

- персонал (Manpower);
- оборудование (Machine);
- сырье, материалы, комплектующие (Material);
- технология проведения работ (Method);
- средства измерения и методы контроля (Measurement);
- производственная среда (Media).

Выявленные факторы подводят к стрелкам диаграммы первого уровня. Далее к каждой стрелке подводят стрелки второго уровня, к которым, в свою очередь, подводят стрелки третьего уровня и т. д. до тех пор, пока на диаграмму

не будут нанесены все стрелки, обозначающие факторы, оказывающие заметное влияние на объект анализа.

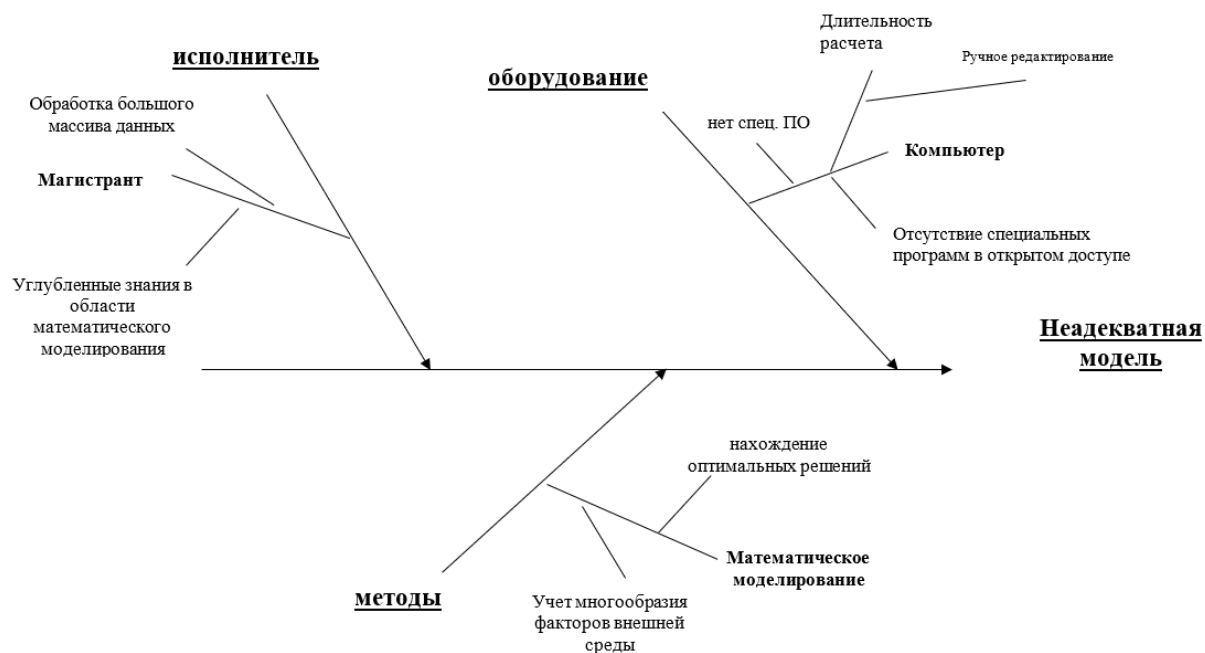


Рисунок 4.2 – диаграмма Исикавы

Исходя из данных диаграммы на рисунке 4.2, можно сделать вывод, что для эффективного использования разработки необходимо минимизировать погрешность при расчетах, детально изучить механизмы процесса.

4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На любой стадии жизненного цикла научной разработки полезно оценивать степень ее готовности к коммерциализации и уровень собственных знаний для ее проведения.

В Таблице 4.4 приведены показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта.

Таблица 4.4 - Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	2	3	4
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	2	4
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	3	4
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	3
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	2	3
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	3
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	3
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	3	4
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	3
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	3
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	4
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	3	3
	ИТОГО БАЛЛОВ	47	52

Оценка готовности научного проекта к коммерциализации (или уровень имеющихся знаний у разработчика) определяется по формуле:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i, \quad (20)$$

где $B_{\text{сум}}$ – суммарное количество баллов по каждому направлению;

B_i – балл по i -му показателю

В результате было определено, что перспективность научно-технической разработки выше среднего (47 баллов). Для дальнейшего

повышения ее эффективности необходимо универсализация дальнейших разрабатываемых тренажеров, привлечение высококвалифицированных специалистов в команду проекта.

4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Проанализировав перечисленные методы коммерциализации, наиболее эффективным для данной разработки является инжиниринг.

Инжиниринг – самостоятельный вид коммерческих операций, предполагающий предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной, именуемой консультантом, другой стороне, именуемой заказчиком, комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием, строительством и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика, усовершенствованием имеющихся производственных процессов вплоть до внедрения изделия в производство и даже сбыта продукции.

На данной стадии уже имеется предприятие по производству, заинтересованное в разработке новых технологий, а также усовершенствовании технологического процесса. Уже проводилась работа по повышению эффективности процесса сульфирования АБСК и хранению данного продукта.

Такой выбор связан с тем, что исследования проводятся на основе экспериментальных данных, взятых непосредственно с цеха предприятия. Поэтому разработка является актуальной лишь для одного определенного предприятия, что связано с различными условиями проведения процесса. Владелец предприятия и работники, выполняющие исследования, заранее договариваются о предоставлении последними услуг по повышению эффективности процесса, а производитель в свою очередь предоставляет данные для НТИ. Такой метод коммерциализации является единственным подходящим в данном случае.

4.2 Инициация проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы существующего. В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта.

4.2.1 Цели и результат проекта

Целью данного проекта является установление влияния свойств сырья и технологических параметров процесса на выход и качество алкилбензол сульфокислоты. Информация по заинтересованным сторонам проекта представлена в таблице 4.5.

Таблица 4.5 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Нефтехимические предприятия	Разработка рекомендаций по ограничению содержания примесей в сырье, ухудшающих выход и качество
Национально-исследовательский Томский политехнический университет	Сотрудничество, развитие партнёрских отношений для достижения общих экономических и стратегических

Таблица 4.6 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Разработка математической модели для оптимизации процесса сульфирования линейного алкилбензола
Ожидаемые результаты проекта:	Повышение эффективности процесса на стадии сульфирования ЛАБ, путем разработки рекомендаций по оперативной регулировки технологических параметров.
Критерии приемки результата проекта:	Адекватность полученной модели должна составлять не менее 95%, что обеспечит соответствие качества АБСК технологическому регламенту и ТУ 2414-028-05766480-2006
Требования к результату проекта:	Выход основного вещества не менее 96%, при массовой доле несulfированных соединений и серной кислоты не более 2% каждый

4.2.2 Организационная структура проекта

На данном этапе работы необходимо решить, кто будет входить в рабочую группу данного проекта, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте.

Таблица 4.7 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо- затраты , час.
1	Долганов И.М., НИ ТПУ, доцент	Руководитель рабочей группы разработки модели сульфирования	Координирует деятельность рабочей группы	120
2	Солопова А.А., НИ ТПУ, студент	Аспирант	Исполнитель работы по проекту	340
3	Бунаев А.А., НИ ТПУ, студент	Магистрант	Исполнитель работы по проекту	340
4	Пасюкова М.А., НИ ТПУ, студент	Бакалавр	Исполнитель работы по проекту	340
ИТОГО:				1140

4.2.3 Ограничения и допущения проекта.

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта.

Таблица 4.8 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	300000 рублей
3.1.1. Источник финансирования	НИ ТПУ
3.2. Сроки проекта:	Сентябрь 2018 – Май 2019
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	12.09.2018
3.2.2. Дата завершения проекта	31.05.2019

4.3 Планирование управления научно-техническим проектом

4.3.1 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта.



Рисунок 4.3 – Иерархическая структура работ по проекту

4.3.2 Контрольные события проекта

№ п/п	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Получение задания и составление плана работ	08.02.2019-08.02. 2019	Отчет о плане работ
2	Ознакомление с экспериментальными данными	9.02. 2019-18.02. 2019	Отчет
3	Изучение теоретических материалов	19.02.2019-27.02.2019	Отчет
4	Работа с литературой	28.02.2019-10.03.2019	Литературный обзор
5	Расчёт параметров на моделирующей программе	11.03.2019-1.04.2019	Отчет
6	Обработка результатов	2.04.2019-15.04.2019	Отчет
7	Оформление таблиц данных, графиков	16.04.2019-30.04-2019	Отчет
8	Обсуждение результатов	1.05.2019-6.05.2019	Отчет о результатах НТИ

9	Оформление пояснительной записки	6.05.2019-21.05.2019	Пояснительная записка
10	Разработка презентации и раздаточного материала	22.05.2019-30.05.2019	Презентация, раздаточный материал

4.3.3 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный график проекта. Линейный график представляется в виде таблицы 4.9.

Таблица 4.9 – Календарный план проекта

Код работы	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Получение задания и составление плана работ	12	01.09.2017	18.09.2017	Долганов И.М., Бунаев А.А.
2	Расчёт термодинамических параметров	146	19.09.2017	23.04.2018	Солопова А.А., Бунаев А.А., Пасюкова М.А.
3	Разработка математической модели	218	24.04.2018	04.03.2019	Долганов И.М., Солопова А.А., Бунаев А.А., Пасюкова М.А.
4	Оптимизация работы программы	19	05.03.2019	01.04.2019	Бунаев А.А.,
5	Оформление таблиц данных, графиков	20	02.04.2019	29.04.2019	Солопова А.А., Бунаев А.А., Пасюкова М.А.
6	Обсуждение результатов	8	30.04.2019	13.05.2019	Долганов И.М., Бунаев А.А.,
7	Оформление пояснительной записки	14	14.05.2019	31.05.2019	Бунаев А.А.
Итого:		437			

На основе таблицы 4.9 построим календарный план-график в таблице 4.10 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени дипломирования.

Таблица 4.10 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

Код работ	Исполнители	Тк, раб. дн	Продолжительность выполнения работ						
			01.09. 2017	19.09. 2017	24.04. 2018	05.03. 2019	02.04. 2019	30.04. 2019	14.05.2019
			-	-	-	-	-	-	-
			18.09. 2017	23.04. 2018	04.03. 2019	01.04. 2019	29.04. 2019	13.05. 2019	31.05. 2019
1	Руководитель Магистрант	12	////////// //////////						
2	Магистрант	146		//////////					
3	Руководитель Магистрант	218			////////// //////////				
4	Магистрант	19				//////////			
5	Магистрант	20					//////////		
6	Руководитель Магистрант	8						////////// //////////	
7	Магистрант	14							//////////
Итого:		437							

////////// - Руководитель

////////// - Магистрант

4.4 Бюджет научного исследования

Расчёт стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. В стоимость материальных затрат включают транспортно-заготовительные расходы (3-5 % от цены). Результаты по данной статье занесём в таблицу 4.11.

Таблица 4.11 – Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Ед. Измерения	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Бумага	пачка	2	300	600
Ручка	шт	4	60	240
Картридж для принтера	шт	1	600	600
Тетрадь для записей	шт	2	50	100
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				77
Итого:				1617

Для выполнения данного проекта необходимо приобретение персонального компьютера для четырех участников проекта, ПО Microsoft Office 365 для создания документов, лицензионного программного пакета Embarcadero RAD Studio 10.3 Community Edition для компьютерной реализации модели. Также необходимо иметь экспериментальные данные с завода, которые могут быть получены двумя способами: 1) запросить данные с лаборатории завода; 2) провести необходимые исследования в лаборатории кафедры.

Стоимость оборудования, используемого при выполнении конкретного научного проекта и имеющегося в данной научно-технической организации, учитывается в виде амортизационных отчислений. Так, стоимость персонального компьютера при сроке амортизации 25 месяцев и его использовании в течение 9 месяцев составит 28 тысяч рублей.

Таблица 4.12 – Затраты на оборудование

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во ед. оборудования	Цена ед. оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, т.р.
1	Персональный компьютер	4	28	112
2	Принтер	1	3	3
3	Microsoft Office 2016 Home and Business RU x32/x64	4	10	40
4	Лицензия на IDE Embarcadero RAD Studio 10.3 Community Edition	1	0	0
Итого:				155

4.4.1 Основная заработная плата

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату.

$$C_{\text{зп}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата;

$Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (21)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника;

$T_{\text{р}}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (табл. 19);

$Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (22)$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 4.13 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студенты	Аспирант
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней			
- выходные дни	44	48	48
- праздничные дни	14	14	14
Потери рабочего времени			
- отпуск	56	28	28
- невыходы по болезни	0	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251		

$$Z_{\text{дн}}^{\text{рук}} = \frac{49970 \cdot 10,4}{247} = 2104 \text{ р/дн}$$

$$Z_{\text{дн}}^{\text{асп}} = \frac{9924 \cdot 10,4}{247} = 417.85 \text{ р/дн}$$

$$З_{\text{дн}}^{\text{маг/бак}} = \frac{2477 \cdot 10,4}{247} = 104.29 \text{ р/дн}$$

Месячный должностной оклад работника [34]:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}$$

где $З_{\text{б}}$ – базовый оклад, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, (определяется Положением об оплате труда);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: определяется Положением об оплате труда);

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Таблица 4.14 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$З_{\text{б}}$, руб.	$k_{\text{пр}}$	$k_{\text{д}}$	$k_{\text{р}}$	$З_{\text{м}}$, руб	$З_{\text{дн}}$, руб.	$T_{\text{р.}}$ раб. дн.	$З_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	33664	0,6	-	1,3	49970	2104	40	84160
Аспирант	7634	-	-	1,3	9924	417,85	90	37606.50
Магистрант	1906	-	-	1,3	2477	104,29	90	9386,10
Бакалавр	1906	-	-	1,3	2477	104,29	90	9386,10
Итого:								140538.30

4.4.2 Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10 - 15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} \quad (23)$$

где $З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.;

$k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплат;

$Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

В табл. 4.15 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 4.15 – Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Аспирант	Студенты
Основная зарплата	84160	37606.50	9386,10
Дополнительная зарплата	12624	5640.98	1407,91
Итого по статье $C_{\text{зп}}$	96784	43247.48	10794,01

4.4.3 Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (24)$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Таблица 4.16 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	84160	12624
Аспирант	37606.5	5640.98
Магистрант	9386,1	1407,91
Бакалавр	9386,1	1407,91
Коэффициент отчисления во внебюджетные фонды [35]	27,1 %	
Отчисления, руб.	38085,99	3162,12
Итого	41248,11	

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (25)$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

$$C_{\text{накл}} = 0,8 \cdot 154686,85 = 129295,60$$

Таблица 4.17 – Группировка по статьям

Сырье, материалы(за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты, руб.	1617
Специальное оборудование для научных работ, руб.	155000
Основная заработная плата, руб.	200538,70
Дополнительная заработная плата, руб.	21080,80
Отчисления на социальные нужды, руб.	41248,11
Накладные расходы, руб.	129295,60
Итоговая себестоимость, руб.	548780,21

4.5 Организационная структура проекта

Наиболее подходящая организационная структура проекта имеет вид:

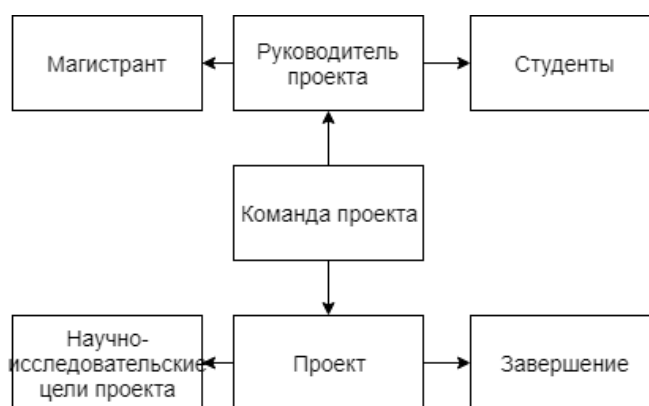


Рисунок 4.4 – Организационная структура проекта

4.6 Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты.

Уровень риска может быть: высокий, средний или низкий в зависимости от вероятности наступления и степени влияния риска. Риски с наибольшей вероятностью наступления и высокой степенью влияния будут иметь высокий

уровень, риски же с наименьшей вероятностью наступления и низкой степенью влияния соответственно низкий уровень.

Таблица 4.18 – Реестр рисков

№	Риск	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска*	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Прекращение финансирования	4	4	Средний	Привлечение инвестиций	Отсутствие интереса со стороны потенциальных потребителей
2	Трудности внедрения продукта на рынок	5	4	Высокий	Провести анализ рынка	Отсутствие рекламы, высокая конкуренция в области моделирующих программ.

4.7 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Эффективность научного ресурсосберегающего проекта включает в себя социальную эффективность, экономическую и бюджетную эффективность. Показатели общественной эффективности учитывают социально-экономические последствия осуществления инвестиционного проекта как для общества в целом, в том числе непосредственные результаты и затраты проекта, так и затраты, и результаты в смежных секторах экономики, экологические, социальные и иные внеэкономические эффекты.

4.8 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его

нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Таблица 4.19 – Группировка затрат по статьям аналогов разработки

Вид работ	Стоимость разработки	Аналог 1	Аналог 2
Сырье, материалы(за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты, руб.	1617	1817	2217
Специальное оборудование для научных работ, руб.	243000	243000	243000
Основная заработная плата, руб.	134510.3	134510.3	134510.3
Дополнительная заработная плата, руб.	20176.55	20176.55	20176.55
Отчисления на социальные нужды, руб.	46309.73	46309.73	46309.73
Накладные расходы, руб.	123749.48	123749.48	123749.48
Итоговая себестоимость, руб.	569363.06	569563.06	575363.06

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{p1}}{\Phi_{max}} = \frac{569363,06}{575363,06} = 99,8$$

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{p2}}{\Phi_{max}} = \frac{569563,06}{575363,06} = 99,9$$

$$I_{\Phi}^p = \frac{3}{\Phi_{max}} = \frac{575363,06}{575363,06} = 1$$

где I_{Φ}^p - интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} – стоимость i-го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a, \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p \quad (26)$$

где I_m – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов;

a_i – весовой коэффициент i-го параметра;

b_i^a , b_i^p – бальная оценка i-го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Таблица 4.20 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	I_m^p	Аналог 1	I_m^{a1}	Аналог 2	I_m^{a2}
1. Адекватность разработки	0,4	5	2	4	1,6	4	1,6
2. Простота применения	0,3	4	1,2	4	1,2	3	0,9
3. Универсальность	0,3	3	0,9	4	1,2	4	1,2
ИТОГО	1	12	4,1	11	4,0	10	3,7

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{финр}^p$) и аналога ($I_{финр}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p} = \frac{4,1}{0,998} = 4,14$$

$$I_{финр}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_\phi^{a2}} = \frac{4,0}{0,999} = 4,01$$

$$I_{финр}^{a2} = \frac{I_m^{a2}}{I_\phi^{a2}} = \frac{3,7}{1} = 3,7$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта. Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a1}} = \frac{4,14}{4,01} = 1,03$$

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a2}} = \frac{4,14}{3,7} = 1,12$$

где $\mathcal{E}_{cp}$ – сравнительная эффективность проекта;

$I_{тэ}^p$ – интегральный показатель разработки;

$I_{тэ}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 4.21 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Аналог 1	Аналог 2	Разработка
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,999	1	0,998
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,0	3,7	4,1
3	Интегральный показатель эффективности	4,01	3,7	4,14
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения (разработка относительно аналога)	1,03	1,12	1

Вывод: Сравнение значений интегральных показателей эффективности вариантов исполнения разработки показало, что наиболее эффективным вариантом решения технической задачи, поставленной в магистерской работе с позиции финансовой и ресурсной эффективности, является данная разработка.

Список публикаций

1 Irena O. Dolganova, Igor M. Dolganov, Ajur A. Bunaev, Maria A. Pasyukova Nature of highly viscous component in the alkylbenzene sulfonic acid technology and its influence on the process efficiency // Petroleum and Coal. - 2019 - Vol. 61 - №. 1. - p. 25-31.

2 Солопова А.А., Пасюкова М.А., Бунаев А.А., Долганова И.О., Долганов И. М. Разработка компьютерной моделирующей системы процессов переработки линейных алкилбензолов с целью исследования влияния накопления высоковязкого компонента на продолжительность межпромывочного цикла // Неделя науки СПбПУ: материалы научной конференции с международным участием. Институт передовых производственных технологий (ИППТ), Санкт-Петербург, 19-24 Ноября 2018. - СПб: Политех-Пресс, 2018 - С. 12-14