

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.03.01 Химическая технология
Отделение школы (НОЦ): Отделение химической инженерии

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Моделирование процесса сульфирования линейных алкилбензолов

УДК 661.185.223.513

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Малецкий Виталий Юрьевич		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Долганов И.М.	к.т.н. доцент		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Якимова Т.Б.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД	Сечин А.А.	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

Томск – 2020 г.

Планируемые результаты обучения по ООП

18.03.01 Химическая технология

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС ВПО, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ПК-1, 2, 3, 19, 20), Критерий 5 АИОР (п. 1.1), CDIO (пп. 1.1, 4.1, 4.3, 4.8)
Р2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач.	Требования ФГОС (ПК-7, 11, 17, 18, ОК-8), Критерий 5 АИОР (пп. 1.1, 1.2), CDIO (пп. 1.1, 3.2, 4.2, 4.3, 4.5, 4.6)
Р3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии.	Требования ФГОС (ПК-1, 5, 8, 9, ОК-2,3), Критерий 5 АИОР (п. 1.2), CDIO (пп. 1.2, 2.1, 4.5)
Р4	Разрабатывать новые технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии, проектировать объекты химической технологии в контексте предприятия, общества и окружающей среды.	Требования ФГОС (ПК-11, 26, 27, 28), Критерий 5 АИОР (п. 1.3), CDIO (пп. 1.3, 4.4, 4.7)
Р5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий.	Требования ФГОС (ПК-4, 21, 22, 23, 24, 25, ОК-4,6), Критерий 5 АИОР (п. 1.4), CDIO (п. 2.2)
Р6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, выводить на рынок новые материалы , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.	Требования ФГОС (ПК-6, 10, 12, 13, 14, 15, ОК-6, 13, 15), Критерий 5 АИОР (п. 1.5), CDIO (пп. 4.1, 4.7, 4.8, 3.1, 4.6)
<i>Общекультурные компетенции</i>		
Р7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов	Требования ФГОС (ОК-5, 9, 10, 11), Критерий 5 АИОР (пп. 2.4, 2.5),

	профессиональной деятельности.	CDIO (п. 2.5)
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-1, 2, 7, 8, 12), Критерий 5 АИОР (п. 2.6), CDIO (п. 2.4)
P9	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.	Требования ФГОС (ОК-14), Критерий 5 АИОР (п. 2.2), CDIO (пп. 3.2, 3.3)
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, <i>демонстрировать лидерство в инженерной деятельности и инженерном предпринимательстве</i> , ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.	Требования ФГОС (ОК-3, 4), Критерий 5 АИОР (пп. 1.6, 2.3), CDIO (пп. 4.7, 4.8, 3.1)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа природных ресурсов
 Направление подготовки 18.03.01 Химическая технология
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Мойзес О.Е.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Малецкий Виталий Юрьевич

Тема работы:

Математическое моделирование синтеза метанола с учетом дезактивации катализатора	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	153-53/с от 01.06.2020 г.

Срок сдачи студентом выполненной работы:	03 июня 2020 г.
--	------------------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <i>(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.).</i></p>	<p>Данные для расчета выхода алкилбензолсульфокислоты с учетом расхода и температуры реакционного газа и смеси ЛАБ, с применением компьютерной программы процесса сульфирования разработанной в высокоуровневом языке программирования Delphi 7.</p> <p align="center">Таблица 1. Технологические параметры для расчета на программе</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th align="center">№</th> <th align="center">Параметр</th> <th align="center">Значение</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td align="center">1.</td> <td align="center">Расход ЛАБ в реактор сульфирования, кг/час</td> <td align="center">3497-3510</td> </tr> <tr> <td align="center">2.</td> <td align="center">Температура ЛАБ на входе в реактор, °С</td> <td align="center">30-32</td> </tr> <tr> <td align="center">3.</td> <td align="center">Средняя молекулярная масса ЛАБ, г/моль</td> <td align="center">241</td> </tr> <tr> <td align="center">4.</td> <td align="center">Давление газовой смеси на входе в реактор, кПа</td> <td align="center">25-45</td> </tr> <tr> <td align="center">5.</td> <td align="center">Расход SO₃ в реактор, кг/час</td> <td align="center">1155-1 75</td> </tr> <tr> <td align="center">6.</td> <td align="center">Температура газа на входе в реактор, °С</td> <td align="center">45-50</td> </tr> </tbody> </table>	№	Параметр	Значение	1.	Расход ЛАБ в реактор сульфирования, кг/час	3497-3510	2.	Температура ЛАБ на входе в реактор, °С	30-32	3.	Средняя молекулярная масса ЛАБ, г/моль	241	4.	Давление газовой смеси на входе в реактор, кПа	25-45	5.	Расход SO ₃ в реактор, кг/час	1155-1 75	6.	Температура газа на входе в реактор, °С	45-50
№	Параметр	Значение																				
1.	Расход ЛАБ в реактор сульфирования, кг/час	3497-3510																				
2.	Температура ЛАБ на входе в реактор, °С	30-32																				
3.	Средняя молекулярная масса ЛАБ, г/моль	241																				
4.	Давление газовой смеси на входе в реактор, кПа	25-45																				
5.	Расход SO ₃ в реактор, кг/час	1155-1 75																				
6.	Температура газа на входе в реактор, °С	45-50																				

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов (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).</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1) Введение. 2) Конструкции реакторов сульфирования по производству алкилбензолсульфоокислоты. Реактор смешения. Пленочный цилиндрический реактор. Реактор с вращающимся уплотненным слоем (RBM). Многотрубный реактор пленочного типа. ТО-реактор. 3) Математические модели процессов алкилирования и сульфирования 4) Современные технологии получения алкилбензолсульфоокислоты. Технологическая схема процесса алкилирования. Технологическая схема процесса сульфирования. 5) Химизм процесса сульфирования. Подготовка газовой смеси SO₃. Сульфирование линейных алкилбензолов ангидридом серной кислоты. Механизм реакции сульфирования. 6) Разработка математической модели процесса сульфирования. 7) Влияние входных параметров на выход алкилбензолсульфоокислоты применением специализированного программного обеспечения. Оценка адекватности математической модели. Определение оптимального времени контакта сырья в реакторе сульфирования. Влияние температуры на выход алкилбензолсульфоокислоты. Оптимальное мольное соотношение SO₃/ЛАБ. Подбор оптимальной конструкции многотрубного реактора сульфирования. 8) Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение». 9) Раздел «Социальная ответственность». 10) Заключение (выводы).
<p>Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1) Технологическая схема процесса сульфирования. 2) Влияние температуры на выход АБСК. 3) Зависимость температуры от концентрации высоковязкого компонента. 4) Подбор оптимального мольного соотношения SO₃/ЛАБ. 5) Влияние конструкции на продолжительность работы многотрубного реактора.
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)</p>	
<p>Раздел</p>	<p>Консультант</p>
<p>«Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»</p>	<p>Якимова Т.Б., к.э.н., доцент, отделение социально-гуманитарных наук ШБИП ТПУ</p>
<p>«Социальная ответственность»</p>	<p>Сечин А.А., ассистент, отделение общетехнических дисциплин ШБИП ТПУ</p>
<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>	
<p>—</p>	
<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	<p>02 марта 2020 г.</p>

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Малецкий Виталий Юрьевич

Школа	Отделение школы (НОЦ)	Направление/специальность	Химическая технология
Уровень образования	Бакалавриат		

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

1. Стоимость ресурсов исследования: материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Стоимость выполняемых работ, материальных ресурсов, согласно применяемой техники и технологии, в соответствии с рыночными ценами. Оклады в соответствии с окладами сотрудников «НИ ТПУ».
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	- районный коэффициент- 1,3; - коэффициент доплат – 0,3 - накладные расходы – 16%; - норма амортизации 25%.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления во внебюджетные фонды – 30,2 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Анализ потенциальных потребителей, анализ конкурентных технических решений, оценка готовности проекта к коммерциализации
2. Планирование и формирование бюджета проекта	Определение затрат на проектирование (смета затрат)
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Расчет интегрального показателя эффективности проекта

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Карта сегментирования рынка
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет проекта

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН	Якимова Татьяна Борисовна	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Малецкий Виталий Юрьевич		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2Д6В	Малецкий Виталий Юрьевич

Школа	ИШПР	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Химическая технология

Тема ВКР:

Моделирование эксплуатационных характеристик моторных топлив	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<p>1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</p>	<p>Объект исследования – технология сульфирования линейных алкилбензолов. Методика исследования - моделирование технологии сульфирования линейных алкилбензолов. Рабочая зона - компьютерный класс, технологическая зона. Область применения - промышленные предприятия нефтехимической отрасли.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>- Обеспечение безопасности на рабочем месте; - Режим труда и отдыха при работе с ПЭВМ.</p>
<p>2. Производственная безопасность:</p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<p>Опасные факторы:</p> <p>1. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека</p> <p>2. Вещества, обладающие острой токсичностью по воздействию на организм (ядовитые вещества / химикаты / химическая продукция)</p> <p>Вредные факторы:</p> <p>1. Недостаточная освещенность рабочей зоны</p> <p>2. Отклонение параметров</p>

	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
Ассистент ООД	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д6В	Малецкий Виталий Юрьевич		

Реферат

Дипломная работа содержит 100 страниц, 28 таблиц, 20 рисунков, 47 источников литературы, 4 приложения.

Выпускная квалификационная работа «Моделирование процесса сульфирования линейных алкилбензолов».

Ключевые слова: алкилбензолсульфокислота, процесс сульфирования, линейный алкилбензолы, ангидрид серной кислоты, математическая модель процесса сульфирования.

Объектом работы является технология сульфирования линейных алкилбензолов.

Цель работы – разработка математической модели процесса получения алкилбензолсульфокислоты и составление рекомендаций по изменению технологических параметров процесса сульфирования, для того чтобы повысить эффективность технологии производства алкилбензолсульфокислоты на производстве.

В данной работе выполнен термодинамический и кинетический анализ основных реакций процесса сульфирования линейных алкилбензолов.

Оглавление

Реферат	9
Введение.....	13
1 Литературный обзор	16
1.1 Конструкции реакторов сульфирования по производству АБСК.....	16
1.1.1 Реактор смешения	17
1.1.2 Пленочный цилиндрический реактор	19
1.1.3 Реактор с вращающимся уплотненным слоем (RBM)	21
1.1.4 Многотрубный реактор пленочного типа.....	22
1.1.5 ТО-реактор	25
1.2 Математические модели процессов алкилирования и сульфирования.....	27
2 Объект и методы исследования	35
2.1 Современные технологии получения алкилбензолсульфоокислоты.....	35
2.1.1 Технологическая схема процесса алкилирования	35
2.1.2 Технологическая схема процесса сульфирования.....	37
2.2 Химизм процесса сульфирования	39
2.2.1 Подготовка газовой смеси SO ₃	39
2.2.2 Сульфирование линейных алкилбензолов ангидридом серной кислоты... 40	
2.2.3 Механизм реакции сульфирования	41
3 Экспериментальная часть.....	44
3.1 Разработка математической модели процесса сульфирования	44
3.2 Влияние входных параметров на выход АБСК применением специализированного программного обеспечения.....	48
3.2.1 Оценка адекватности математической модели.....	48

3.2.2	Определение оптимального времени контакта сырья в реакторе сульфирования.....	49
3.2.3	Влияние температуры на выход АБСК.....	50
3.2.4	Оптимальное мольное соотношение SO ₃ /ЛАБ	52
3.2.5	Подбор оптимальной конструкции многотрубного реактора сульфирования.....	53
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	56
4.1	Предпроектный анализ	56
4.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования	56
4.1.2.	SWOT – анализ	57
4.1.3.	Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	59
4.2.	Планирование исследовательских работ в рамках ВКР	61
4.2.1	План проекта.....	61
4.2.2	Бюджет проводимого исследования	63
4.2.3	Оценка сравнительной эффективности исследования.....	67
5	Социальная ответственность	71
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	71
5.1.1	Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства	72
5.1.2	Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.....	73
5.2	Профессиональная социальная безопасность	73
5.2.1	Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования.....	73
5.2.2	Анализ вредных факторов при адаптации математической модели на производстве.....	75

5.2.3 Анализ опасных факторов на рабочем месте	78
5.3 Экологическая безопасность.....	83
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	84
Заключение	87
Список публикаций.....	88
Список использованных источников	89
Приложение А	95
Приложение Б.....	96
Приложение В.....	97
Приложение Г	99

Введение

Синтетические моющие средства (СМС) – это многокомпонентные смеси, где одними из основных компонентов являются поверхностно-активные вещества (ПАВ). Компоненты СМС, а именно ПАВ смачивают частицы загрязнений в водном растворе, тем самым разрушая их связь с поверхностью ткани, и раздробляют до мельчайших частиц коллоидных размеров, которые перемещаются в водный раствор в виде суспензии или эмульсии. В мыльном растворе сохраняются заряженные частицы загрязнений, а пена, которая образуется при этом и образующиеся пузырьки воздуха позволяют этим частицам всплывать на поверхность. Специальные вещества, входящие в состав СМС защищают ткани от повторного оседания частиц загрязнения – ресорбции [1].

На данный момент спрос на СМС возрастает как со стороны различных отраслей промышленности, так и со стороны бытового потребления, что приводит к наращиванию объемов производства данных веществ. Тенденция спроса ПАВ на мировом рынке за последние годы сильно возросла. Если в 2015 году мировой рынок ПАВ был оценен в 30,65 млрд. долл., то к 2021 году он достигнет 39,69 млрд. долл. [2].

За последние несколько лет производство ПАВ возрастает до 4,4 % в год. Одними из самых распространенных и востребованных на сегодняшний день являются синтетические моющие средства на основе анионных ПАВ. Данные ПАВ образуются в результате реакций сульфатирования или сульфирования. На сегодняшний день в мире работают около 800 заводов, которые используют данные технологии производства СМС. При этом их производственные мощности находятся в интервале от 3 до 50 тыс. т/год. Важным фактом является то, что около 20%, что соответствует 2,5 млн. т/год мирового производства находится в Японии, Соединенных Штатах и странах Западной Европы [3].

Наиболее распространенным и типичным представителем класса анионных поверхностно-активных веществ является алкилбензолсульфоокислота (АБСК). Данное соединение образуется в результате реакции сульфирования линейного алкилбензола (ЛАБ) ангидридом серной кислоты. АБСК используется в качестве СМС еще с середины 60-ых годов и до сегодняшних дней [4]. Но из-за возрастающего спроса на рынке промышленные мощности не справляются с производством нужного объема АБСК, который бы полностью покрыл нужды рынка. Из-за сложившейся ситуации присутствует дефицит АБСК на рынке синтетически моющих средств России, который восполняется следующим образом: АБСК заменяют на менее эффективные ПАВ или на более дорогостоящие зарубежные аналоги.

Чтобы восполнить дефицит АБСК необходимо увеличить эффективность производства АБСК, а для этого необходимо решить следующую задачу – найти причину, из-за которой селективность процесса сульфирования не достигает требуемого показателя. Для этого следует установить взаимосвязь между постоянно изменяющимся составом сырья и конечным продуктом, и технологическими параметрами. Также следует провести на ранних этапах термодинамический анализ побочных реакций. Исходя из результатов анализа, можно будет сделать заключения о возможностях присутствия побочных веществ, и рассмотреть гидродинамический режим работы многотрубного реактора сульфирования. Это необходимо для того, чтобы показать какие изменения происходят с гидродинамикой в ходе протекания реакции сульфирования и во время накопления высоковязкого компонента, который скапливается внутри трубок реактора. Основной целью этих действий является разработка математической модели процесса сульфирования линейных алкилбензолов для того, чтобы оперативно регулировать управляющие параметры данной системы.

Целью выполнения данной квалификационной работы является разработка математической модели процесса сульфирования ЛАБ ангидридом

серной кислоты. Полученные с помощью данной математической модели закономерности, а также их изучение поможет выявить основные проблемы, возникающие на производстве. Помимо этого на основе полученных закономерностей составить рекомендации по изменению технологических параметров процесса сульфирования, для того чтобы повысить эффективность технологии производства алкилбензолсульфокислоты на производстве.

1 Литературный обзор

Акилбензолсульфокислота (АБСК) – это ценный продукт органической химии, который образуется в результате сульфирования линейного алкилбензола. Алкилбензолсульфокислота является типичным представителем класса анионных поверхностно-активных веществ, которые используются в производстве синтетических моющих средств [4].

Получение АБСК можно разделить на следующие этапы:

- 1) Дегидрирование алканов на Pt-катализаторе с получением олефинов;
- 2) Гидрирование побочных продуктов (диенов);
- 3) Алкилирование бензола с получением линейных алкилбензолов (ЛАБ) с использованием HF в качестве катализатора;
- 4) Сульфирование ЛАБ с получением АБСК [1].

АБСК на производстве получают в специальных аппаратах – химических реакторах.

1.1 Конструкции реакторов сульфирования по производству АБСК

На производстве для процесса сульфирования осуществляется такой подбор реакторов, которые бы соответствовали многим требованиям, а это в свою очередь зависит от продукции, получаемой на выходе. Для того, чтобы подобрать реактор нужной конструкции нужно учесть то, что реакция сульфирования органического соединения ангидридом серной кислоты протекает за достаточно короткий промежуток времени. Важной переменной процесса сульфирования является парциальное давление ангидрида серной кислоты потому, что давление служит движущей силой диффузии в жидкую фазу из газовой. Однако данная реакция с органическим соединением может протекать в широком диапазоне скоростей. Если рассматривать процесс сульфирования α -олефинов ангидридом серной кислоты, то можно сказать, что

данная реакция протекает гораздо быстрее по сравнению с сульфированием алкилбензолов. На данный момент во всех существующих технологиях сульфирования реакции протекают при пониженном давлении. Однако с целью увеличения интенсивности процесса на сегодняшний день разрабатываются новые способы для решения данной проблемы. Одним из таких способов является сульфирование под высоким давлением с адсорбцией ангидрида серной кислоты на поверхности активированного угля, который является адсорбентом и на его поверхности конденсируются фазы $\text{CO}_2\text{-SO}_3$ [5]. Один из наиболее важных факторов заключается в том, чтобы газ как можно быстрее вступал во взаимодействие с жидким реагентом. Следующим важным фактором служит необходимость поддержания интенсивного перемешивания в жидкой фазе в процессе протекания всей реакции, чтобы на границе раздела фаз стремительно уменьшалась концентрация молекул, которые уже вступили в реакцию. Это делается для того, чтобы те молекулы, которые не прореагировали, поднимались на поверхность раздела фаз, чтобы вступить в контакт с газовым потоком. Так как процесс сульфирования идет с большим выделением тепла, т.е реакция является экзотермической нужно как можно быстрее осуществлять отвод выделяющейся в ходе реакции энергии для того, чтобы поддерживать оптимальную температуру в реакторе, от которой зависит вязкость целевого продукта исходного процесса, которую нужно поддерживать на определенном значении. Еще одной причиной поддержания температуры в оптимальном интервале является предотвращение локальных перегревов, которые непосредственно ведут к различным поломкам в реакторе. Исходя из этого, на сегодняшний день существует множество реакторов, которые предназначены для процесса сульфирования, которые отличаются лишь своей конструкцией.

1.1.1 Реактор смешения

Реактор данного типа является одним из первых, который начал использоваться в промышленном производстве АБСК.

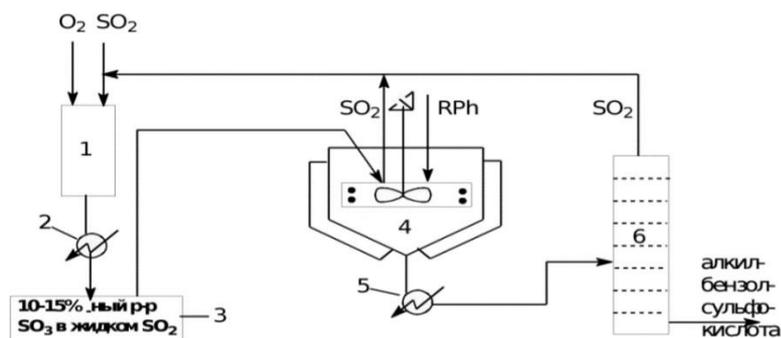


Рисунок 1.1 - Схема получения АБСК в реакторе смешения

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

В блоке конверсии 1 происходит окисление диоксида серы (SO_2) в триоксид серы (SO_3) в присутствии технического кислорода. Далее продукты данного процесса поступают в холодильник, где их охлаждают, а затем конденсируют, после этого их отправляют в сборник емкостного типа 3 в виде 10- 15% раствора триоксида серы, который растворен диоксиде серы. После этого раствор направляется в реактор 4, где раствор подается в центр тарелки, а именно на мешалку. На эту же мешалку поступает смесь ЛАБ. Если рассматривать реактор смешения 4 с точки зрения его конструкции, то он представляет собой резервуар, где охлаждение осуществляется за счет наличия рубашки, в которой циркулирует холодная вода. В данном резервуаре находится тарелка с бортами, на которую подаются реагенты, также внутри данного резервуара находятся мешалка и змеевики, которые необходимы для того, чтобы охлаждать реакционную зону. После того как смесь прореагировала она начинает переливаться через борта тарелки, а потом стекает по стенкам резервуара, который в свою очередь охлаждается водяной рубашкой. Исходя из этого, реакция сульфирования завершается в стекающей по стенке пленке жидкости, а основной объем SO_2 испаряется и выводится через верх реактора. В состав жидкости, которая отводится с нижней части реактора смешения входит

5-7% диоксида серы, и для того, чтобы удалить примеси SO_2 , данную жидкость нагревают и отправляют в вакуумный испаритель 5. После испарителя жидкость поступает в сборник 7 и оттуда отправляется на дальнейшую переработку, а диоксид серы возвращают в блок конверсии 1.

Раньше данный способ производства АБСК был распространен на территории Соединенных Штатов, но на настоящий момент реакторы с такой конструкцией практически не применяются [6].

1.1.2 Пленочный цилиндрический реактор

Специально были разработаны компанией “Chemiton”, которая находится в США реакторы данной конструкции для процесса сульфирования по производству АБСК [7].

Реактор данной конструкции представлен на рисунке 1.2. Основной особенностью конструкции данного реактора является наличие двух цилиндров, стаканов, причем один из них установлен в другом. Реакционным пространством, т.е. пространством в котором протекает процесс сульфирования в данном реакторе является кольцевое пространство между стаканами, где зазор между поверхностями составляет 7,5-8 мм [7].

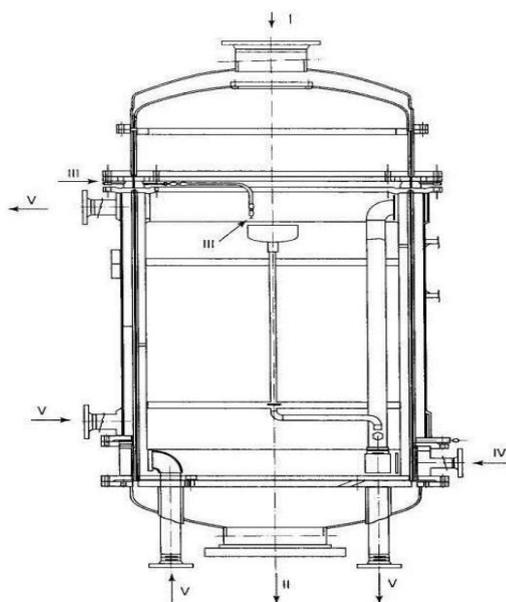


Рисунок 1.2 – Конструкция пленочного цилиндрического реактора

Потоки: I – газовая смесь ангидрида серной кислоты (SO_3); II – АБСК;
III – ЛАБ; IV – рециркулят; V – холодная техническая вода.

При помощи насоса одна из частей потока ЛАБ поступает в наружный цилиндр через распределительную камеру, а вторая часть потока поступает во внутренний. После данных распределительных устройств ЛАБ в виде тонкой пленки направляется в реакционное кольцевое пространство. После этого данная пленка стекает по внутренней поверхности стенки наружного стакана, и по внешней – внутреннего. Специальные канавки-зазоры обеспечивают пленочный режим в конструкции данного реактора.

Ангидрид серной кислоты вводится в реактор через его верхнюю часть, далее он поступает в кольцевое реакционное пространство, где реакция сульфирования протекает с большими скоростями. В ходе реакции образуется алкилбензолсульфо кислота, которая затем стекает в нижнюю часть данного реактора. Тепло, которое выделяется в ходе реакции сульфирования, отводится рубашками охлаждения, по которым циркулирует холодная техническая вода снизу-вверх. Уровень подачи ЛАБ должен постоянно поддерживаться на определенном значении, чтобы распределение пленки было равномерно по всей реакционной поверхности данных стаканов.

Температура охлаждающей воды, которая входит в реактор, должна поддерживаться на определенном значении, так как именно ее температура оказывает большое влияние на процесс сульфирования. Значение температуры не должно достигать выше 30 °C. При 28 °C и более низких температурах, осуществляется слишком сильное охлаждение поверхности реакционного пространства, это приводит к увеличению вязкости реакционной массы. К тому же снижается реакционная способность и глубина сульфирования жидкой фазы. Из-за этого продукт, который получается в результате процесса сульфирования может не удовлетворять требования предъявляемые к его качеству [7].

1.1.3 Реактор с вращающимся уплотненным слоем (RBM)

Реактор данной конструкции применяется в промышленном производстве уже довольно долгое время, в том числе для дистилляции, катионной полимеризации и т.д. Однако на данный момент представлены некоторые научные работы, в которых были проведены исследования, где высказывались идеи эксплуатации реакторов данного типа в процессе сульфирования для производства СМС [8,9].

Реактор данного типа состоит из закрытого корпуса, который установлен на роторе. В корпусе реактора расположен слой уплотняющих сеток, закрепленных на роторе.

Принцип работы реактора данного типа состоит в том, что поток реагентов, а именно ЛАБ и жидкого ангидрида серной кислоты вводится на слой из уплотняющих сеток. При помощи входного дозатора установленного на входе реактора, осуществляется распределение сырья, а именно разбрызгивание на сетки, на поверхностях которых и идет реакция сульфирования. Далее остатки непрореагировавшего сырья вместе с каплями целевого и побочных продуктов стекают на один из следующих уровней уплотняющих сеток, именно там осуществляется досульфирование веществ, которые еще не прореагировали с помощью коалесценции капель находящихся на поверхности сетки. Исходя из этого и того, что ротор вращается, происходит улучшение смешения, а это приводит к интенсификации реакции в сравнении с другими более типичными реакторами смешения. Вращение ротора приводит к возникновению центробежных сил, из-за чего полученная АБСК отбрасывается к стенкам данного типа реактора, после чего она выводится, путем стекания по стенкам под действием гравитационных сил. Принципиальная схема экспериментальной установки процесса сульфирования линейного алкилбензола представлена на рисунке 1.3 [8]:

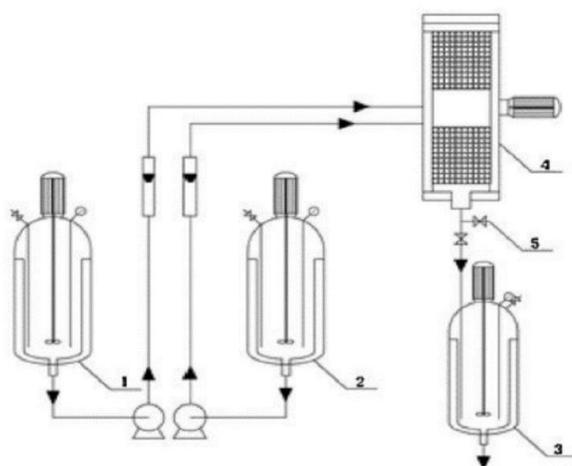


Рисунок 1.3 – Принципиальная схема экспериментальной установки для сульфирования линейного алкилбензола

1, 2 – емкости, в которых хранится линейный алкилбензол и триоксид серы; 3 – емкость, в которой хранится, готовый продукт; 4 – RBM-реактор; 5 – зона для отбора проб

Несмотря на всю целесообразность применения реакторов данной конструкции, которая была описана в научных работах, выход АБСК в зоне отбора проб, которая находится на выходе из реактора составил около 60-70% и данное значение может достигать 88% только при досульфировании ЛАБ, растворенными остатками ангидрида серной кислоты. Данный факт, является большим недостатком потому, что выход алкилбензолсульфокислоты не всегда будет соответствовать определенным требованиям по качеству [8].

1.1.4 Многотрубный реактор пленочного типа

На данный момент реакторы сульфирования, имеющие данную конструкцию, широко применяются на промышленных производствах потому, что они являются наиболее эффективными и перспективными. Компания “Ballestra S.p.A.” расположенная на территории Италии является лидирующим производителем реакторов данного типа.

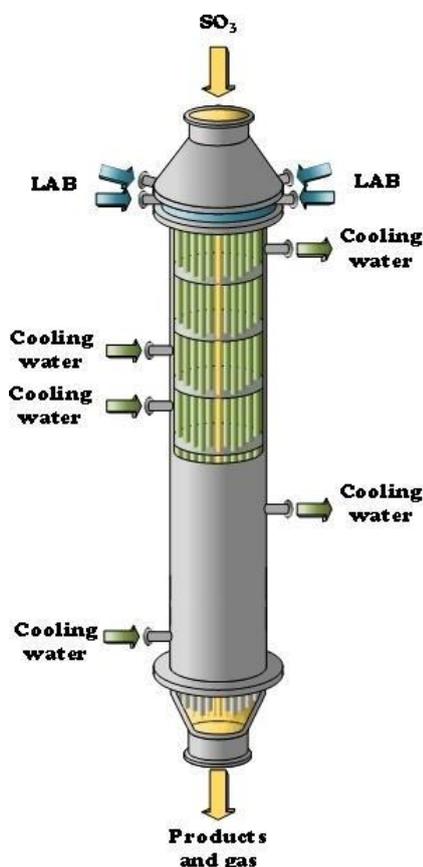


Рисунок 1.4 – Многотрубный реактор фирмы “Ballestra S.p.A”

Реактор данной конструкции представлен на рисунке 1.4. Данный реактор состоит из вертикальных реакторных труб, причем расположение этих труб такое же, как в кожухотрубном теплообменнике. Внутренний диаметр реакторных трубок составляет 25 мм, при длине равной 6 м и толщине стенок 1,5 мм. Пропускная способность каждой трубке достигает около 40 кг/ч АБСК, а скорость подачи газовой смеси равна 30 м/с [10]. От количества трубок находящихся внутри зависит мощность данного многотрубного реактора.

Типичный пленочный реактор состоит из одной трубы и соответственно обладает низкой производительностью, а многотрубный реактор сульфирования обладает высокой производительностью за счет наличия 144 трубок, мощность которых достигает 5,5 т/ч [10]. С помощью регулирования массового расхода ангидрида серной кислоты и линейных алкилбензолов, условия процесса сульфирования в реакторе данного типа могут быть изменены. К тому же можно регулировать температуру воды, которая

поступает на охлаждение реакционного пространства многотрубного реактора, и мольное соотношение ангидрида серной кислоты к ЛАБ. Но необходимо не забывать о таком явлении как пересульфирование потому что данное явление является причиной избыточного выхода побочного продукта, и приводит к ухудшению такого товарного показателя качества, как цветность [11].

На сегодняшний день помимо реакторов компании “Ballestra S.p.A.”, набирают популярность в промышленном производстве реакторы компании “Mazzoni S.r.l”. Реакторы данной компании по своей конструкции схожи с реакторами фирмы “Ballestra S.p.A.”, но присутствует одно значительное отличие, а именно в конструкции данных многотрубных реакторов помимо сопла для подачи газо-воздушной смеси (ангидрида серной кислоты) присутствует еще одно сопло для подачи сухого воздуха. Присутствие данного сопла сделано для того, чтобы стабилизировать перепад давлений, причиной которого являются притоки ангидрида серной кислоты. Это приводит к ламинарному режиму движения газовой смеси, из-за этого смесь ЛАБ подвергается более равномерному сульфированию [12].

Необходимо подчеркнуть, что большинство инженеров уделяют большое внимание проблеме конструкции входных сопел. Это связано с тем, что существует гипотеза, о том, что при правильном вводе газовой смеси в реакционное пространство реактора осуществляется более равномерное и интенсивное сульфирование. Поэтому существует огромное количество патентов написанных в данном направлении, среди которых заслуживают отдельное внимание работы, в которых огромный интерес уделяется конструкции реактора. К одному из таких патентов относится патент Биргера Дахля RU 2165788. В данном патенте заостряется внимание на том, что при создании реактора сульфирования необходимо также учитывать форму отверстий, по которым происходит подача смеси ЛАБ. Это необходимо учитывать для того, чтобы пленка органического вещества равномерно распределялась по стенкам трубок, что приводит к равномерному

сульфированию смеси ЛАБ. К тому же в данном патенте упоминается о том, что входное сопло по которому осуществляется ввод ангидрида серной кислоты и смеси воздуха, и реакционное пространство должны находиться на определенном расстоянии друг от друга, потому что это сильно влияет на качество производимой продукции [13].

Помимо формы отверстий по которым осуществляется подача смеси ЛАБ, инженеры-конструкторы уделяют внимание и форме трубок реактора, по которым происходит стекание пленки смеси ЛАБ. К тому же авторы некоторых патентов предлагают заменить трубки цилиндрической, гладкой, классической формы на ребристые, которые представлены на рисунке 1.5 [12].

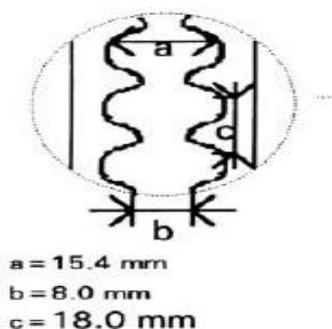


Рисунок 1.5 – Новое предлагаемое исполнение трубок реактора сульфирования

Необходимо отметить, что представленное выше исполнение реакционных трубок реактора нельзя считать всегда универсальным и то, что данное исполнение оказывает всегда положительный эффект на продукт получаемый в результате процесса сульфирования, только при определенных режимах технологического процесса выполняются данные критерии.

1.1.5 ТО-реактор

Данный класс реакторов был разработан в ведущей компании в области косметики и бытовой химии находящейся в Японии “Lion Fat and Oil Co., Ltd. ”, японским ученым-инженером Изуми Яманэ. Данная конструкция реактора является экспериментальной, и автор уделяет большое внимание таким важным факторам как постоянный контроль за температурой процесса и равномерная

постоянная подача смеси ЛАБ в реактор, именно эти факторы ведут к увеличению выхода целевого продукта реакции. Однако создатель данного типа реактора Изуми Яманэ рассматривает не только один из вариантов сульфирования, а несколько, где в качестве целевых продуктов для процесса сульфирования используются такие вещества, как: линейные алкилбензосульфونات, сульфозтоксилаты и α -олефинсульфонаты [14].

По своей конструкции ТО-реакторы отличаются от пленочных реакторов, к основным отличиям относятся:

1) С целью проведения идеального изотермического сульфирования, в реакторе, а именно в реакционном пространстве создаются необходимые для этого условия. Для начала нужно создать условия для возникновения инертного потока газа таким образом, чтобы воздух подавался между пространством ангидрида серной кислоты и стекающей пленке ЛАБ по внутренней стенке реактора. Из-за этого доступ ангидрида серной кислоты к пленке смеси ЛАБ увеличивается [7]. На рисунке 1.6 представлена схема движения потоков газа внутри реактора.

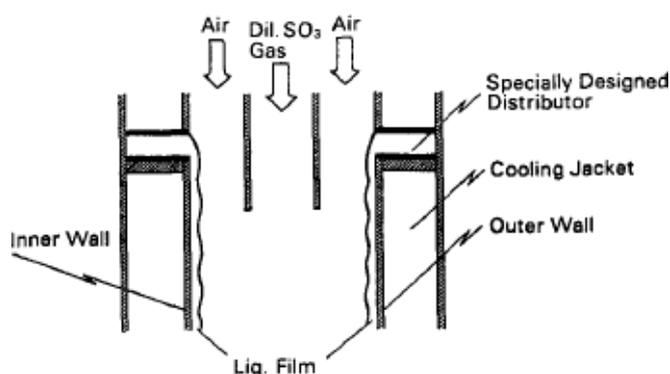


Рисунок 1.6 – Схема потоков движения газа в ТО-реакторе

2) Наличие специального устройства в конструкции реактора данного типа, которое предназначено для распределения пленки смеси ЛАБ однородной толщины по внутренней стенке реактора является еще одним существенным отличием и преимуществом [14].

Сравнение результатов процесса сульфирования в ТО-реакторе с пленочным реактором приведены в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Сравнение ТО-реактора с пленочным реактором

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

Исходя из показателей, представленных в таблицы, можно сказать, что в ТО-реакторе процесс сульфирования осуществляется лучше, чем в пленочном реакторе. Как считает сам ученый это связано с равномерностью протекания реакции сульфирования в ТО-реакторе, которая в пленочном реакторе не достигается из-за протекания быстрой экзотермической реакции.

1.2 Математические модели процессов алкилирования и сульфирования

В связи с достаточно высоким уровнем научно-технического развития стоит подчеркнуть тот факт, что работа какого-либо крупномасштабного промышленного производства в непрерывном и регулярно поддерживаемом плановом режиме является крайне сложной задачей. Поэтому стоит вопрос о том, чтобы минимизировать или еще лучше исключить всевозможные отрицательные факторы, влияющие на технологический режим работы многих установок на производстве. Из-за этого на производстве с целью контроля качества производимой продукции, и на этапе ее получения используются различные виды спецоборудования и программного обеспечения (ПО), которое разрабатывается специально для этих целей.

Так как производство АБСК является крупномасштабным промышленным процессом, то соответственно тоже не является исключением из правил. Непосредственно технология получения АБСК зависит от довольно многих технологических параметров и поэтому является довольно сложной технологией. Из-за этого большая часть компаний-производителей проявляют большой интерес к разработке различных мер, по предотвращению получения продукции имеющей нетоварные характеристики. К таким мерам, относится математическое моделирование всего технологического процесса, которое является наиболее эффективным решением. Разработка математической модели всего техпроцесса необходима для отработки и моделирования множества комбинаций развития событий с помощью определенного ПО. События, приводящие к получению нетоварной продукции, возникают из-за изменения разных технологических параметров, состава сырьевых потоков и внешних возмущений, которым подвергается система.

Целью данной работы является разработка математической модели и оптимизация процесса получения АБСК с применением пленочного многотрубного реактора сульфирования. Это необходимо для того, чтобы ввести готовое к реализации ПО на реальное действующее производство, т.к. на данный момент нет завершено и готового к эксплуатации продукта. Однако перед тем как приступить к разработке, необходимо сначала проанализировать уже ранее выпущенные работы, по данной тематике, затем чтобы определить к каким основным концепциям приходили инженеры и ученые при разработке математических моделей, а затем ознакомиться и разобраться с основными трудностями, которые возникали при создании данных моделей.

Известными учеными Джонсом и Кринесом в 1974 году были предприняты первые попытки по разработке математических моделей. Именно тогда они разработали довольно простую одномерную модель, в которую были включены следующие предположения и допущения [15]:

- толщина пленки постоянна;

- в жидкой пленке отсутствуют радикальные эффекты;
- диффузия ангидрида серной кислоты в жидкую фазу отсутствует;
- температура, охлаждающей жидкости постоянна;
- было принято, что около 20 параметров являются постоянными, к ним относятся химические и физические свойства и др.

- к тому же реакция сульфирования мгновенно протекает в межфазе;

После одномерной модели были предложены двумерные учеными Дэвисом в 1979 году и Гутьерресом-Гонсалесом в 1988 год. В предложенных моделях использовали баланс импульсов для учета изменений толщины жидкой пленки и описывали профиль температур и концентрацию вещества по всей толщине пленки [15]. Однако в данных моделях присутствовали определенные ограничения, которые связаны с конкретными регулируемыми параметрами. Из-за этого применение модели ограничивалось, т.к. для определенного случая требовались свои экспериментальные данные. Однако учеными была выдвинута гипотеза, в которой упоминалось о том, что реакция исключительно протекает в объеме жидкой пленки, а не в межфазе. Ценность моделей заключалась в том, что в них входили кинетические выражения, исключавшие возможность протекания мгновенной реакции в межфазном пространстве.

В конце XX и начале XXI века были предложены улучшенные и наиболее универсальные двумерные модели таким учеными, как Таленс-Алессоном в 1999 году, и Аканшей в 2007 году [15]. В данных моделях использовались уравнения второго порядка с производными, которые содержали в себе некоторые расчеты, например, итерации при расчете толщины пленки, из-за этого данные уравнения получались довольно сложными для решения. Но все же проводились попытки решения уравнений использованных в данных моделях, с помощью различных видов численных методов. Однако, в окончательном результате все сводилось к линеаризации уравнений с частными производными второго порядка: как для радиальных, так и для продольных координат. Данные манипуляции приводили к возникновению численных

ошибок, из-за того, что по теории Тейлора в линеаризацию входит остаточная ошибка [15]. Впрочем, в реакторе при расчетах массопереноса играет важную роль дискретизация пленки, и для того, чтобы уменьшить вычислительные усилия и улучшить гарантируемые результаты используется специальная распределительная сетка. Были предприняты меры по разработке различного ПО, на основе идей по делению пленки на определенные сегменты, чтобы с помощью данного ПО можно было рассчитать изменение толщины пленки во времени в реакторе сульфирования. К данным программным комплексам относятся такие решения, как: “gPROMS Platform”, “Comsol Multiphysics Software” и др. Тем не менее т.к. данная технология довольно специфична, а именно длина реакторов используемых на производстве составляет от 3 до 6 метров, при толщине около 1,5 мм, то соотношение между данными геометрическими параметрами может достигать 4000, что требует внушительных вычислительных мощностей и больших временных затрат, из-за этого данные программные комплексы не могут полностью гарантировать адекватность полученных в ходе моделирования результатов [15].

За последние 10 лет было проведено множество исследований, и много из представленных работ вызывают определенный интерес. В одних работах можно было провести симуляцию процесса сульфирования, а в других смоделировать работу в газожидкостной среде пленочного реактора сульфирования. Вместе с тем в представленных работах учитывались материальные и тепловые балансы, и уравнения, которые бы описывали сохранение импульса в реакторе. Однако в данных моделях присутствовали некоторые отличия, которые заключались в различных подходах решения проблем. Например, в приведенных исследованиях научно-исследовательской группы Н.Мендосы, двумерной системой представлена газожидкостная среда внутри реактора, которая имеет две оси координат, где ось z соответствует продольному направлению, а ось y – радиальному [15]. Схема координат, которые применяются в данной модели, представлены на рисунке 1.7.

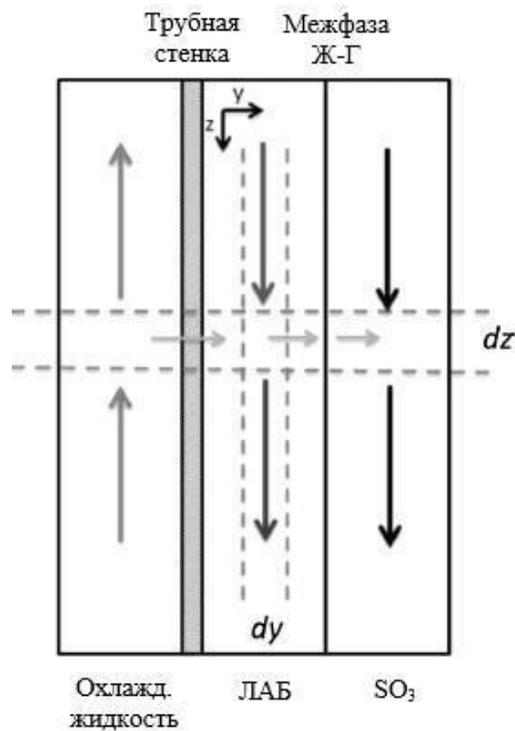


Рисунок 1.7 – Система координат, которая применяется в математической модели Н.Мендосы

Тепловой баланс данной модели представлен уравнением 1, которое описывает как взаимосвязаны гидродинамические условия системы со свойствами жидкости.

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

В реакторе система охлаждения представлена в виде водяной рубашки, и с помощью данной системы контролируется температура жидкой пленки, влияние которой учитывается в различных математических моделях согласно уравнению 2.

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

При изучении материального баланса, становится понятным, что между фазами массоперенос возникает из-за разницы концентраций одного компонента между двумя фазами. Причиной, по которой возникает диффузионный перенос частиц из фазы с большей концентрацией компонента в

фазу, где концентрация его меньше для достижения равновесия в системе, является данный градиент концентраций компонентов. В пленочных реакторах на перенос частиц газа и жидкости оказывают влияние несколько определенных факторов. В перечень данных факторов входят: условия эксплуатации, а именно расход жидкости и газовой смеси, и конструктивные параметры реактора, такие как толщина стекающей пленки и площадь поверхности катализатора, на которой протекает реакция сульфирования. В большинстве случаев в модель всегда должны входить два взаимосвязанных уравнения 3 и 4, в которых учитывается зависимость данных уравнений от концентраций реагентов, т.е. смеси ЛАБ и ангидрида серной кислоты [15].

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

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

В представленных уравнениях переход смеси ЛАБ в газовую фазу не был учтен.

Уравнение, в котором описывается явление сохранения импульса для жидкой пленки органического вещества, может быть представлено в виде [15]:

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

С помощью данного уравнения можно рассчитать профили скоростей пленки и ее толщину вдоль трубок реактора. К тому же существует отдельное уравнение для расчета толщины пленки [16]:

$$\delta = \left(\frac{0,0512 \cdot Re^{0,875} \nu}{\sqrt{\frac{2}{3}} g \sin \varphi} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (6)$$

Критерий Рейнольдса, который используется в предыдущем уравнении,

может быть рассчитан по формуле:

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

откуда G - массовый расход смеси ЛАБ.

К двум основным и наиболее критическим факторам с помощью, которых можно описать поведение жидкой пленки органического вещества относятся толщина пленки и ее скорость стекания. Данные параметры оказывают прямое влияние на гидродинамический режим работы реактора сульфирования. Кроме того в реакторе сульфирования помимо привычных режимов движения жидкости, а именно турбулентного и ламинарного режимов, наблюдается довольно специфичный – волновой.

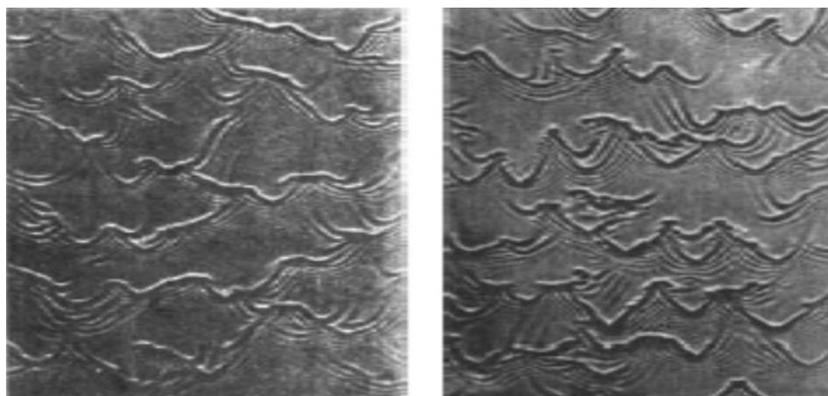


Рисунок 1.8 – Волновой гидродинамический режим стекания пленки в реакторе

При различных режимах стекания пленки, распределение профилей скоростей можно представить следующим образом [17]:

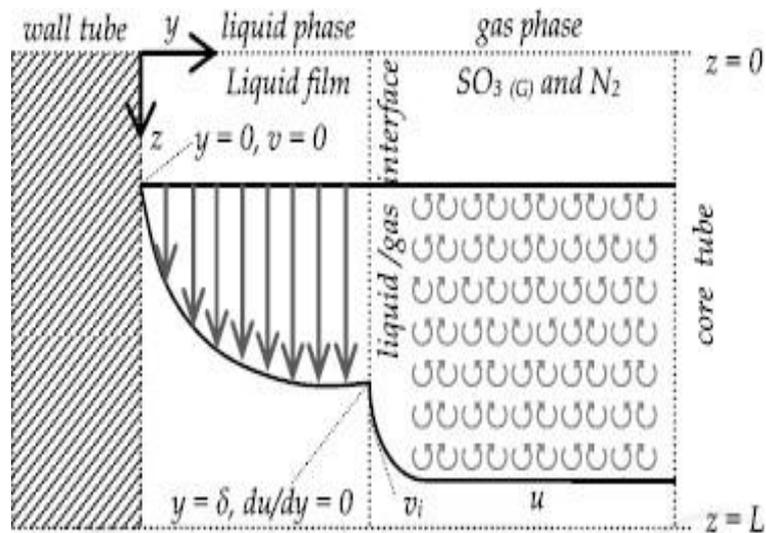


Рисунок 1.9 – Схематическое изображение распределения профилей скоростей для жидкой пленки органического вещества и для газа при ламинарном и турбулентном режимах

Исходя из всего вышеприведенного, очевидным является тот факт, что многие учения на протяжении долгих лет предпринимали усилия для создания оптимальной математической модели, которая бы описывала работу пленочного реактора. Важным фактом в представленных работах является то, что крайне малое внимание уделялось влиянию побочных соединений на процесс сульфирования, и в свою очередь на выход продукта - АБСК. Однако, данное упущение является значительным с точки зрения понимания процесса сульфирования и технологии получения АБСК.

2 Объект и методы исследования

2.1 Современные технологии получения алкилбензолсульфонокислоты

АБСК получают не на всех нефтеперерабатывающих заводах (НПЗ), а лишь на НПЗ средней и крупной мощности, где целесообразно получать данную продукцию. Один из крупнейших заводов по производству АБСК в России находится в Ленинградской области. Рассмотрим технологические схемы процессов алкилирования и сульфирования потому, что с помощью данных процессов получают АБСК на НПЗ.

2.1.1 Технологическая схема процесса алкилирования

На рисунке 2.1 изображена принципиальная технологическая схема процесса алкилирования, т.е. процесса с помощью которого получают на производстве линейные алкилбензолы (ЛАБ) путем алкилирования бензола неразветвленными насыщенными углеводородами.

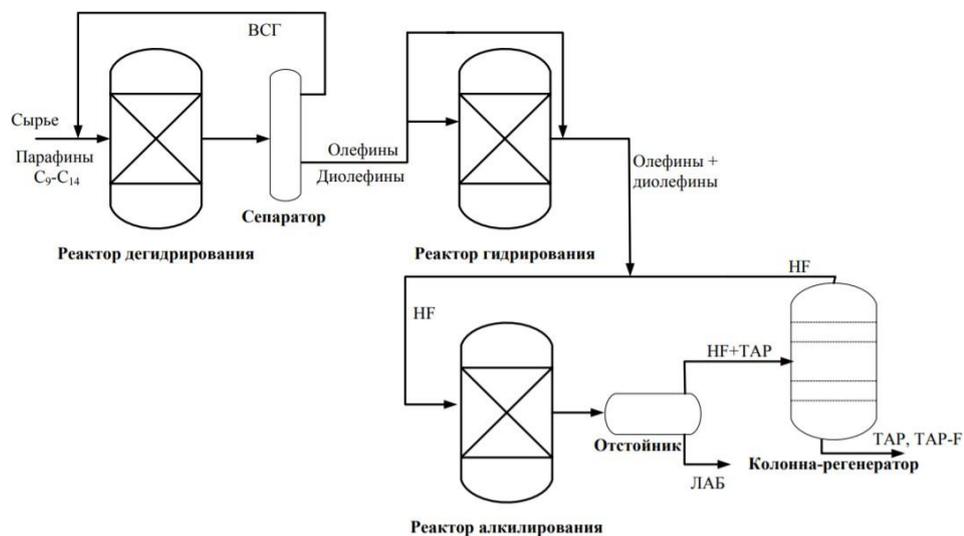


Рисунок 2.1 - Принципиальная технологическая схема процесса алкилирования

Установка по получению ЛАБ представляет из себя совокупность протекающих друг за другом этапов дегидрирования парафинов до этиленовых углеводородов. Следующим этапом является селективное гидрирование диенов, с последующим алкилированием бензола диенами [18].

Другими словами, на первом этапе для получения линейных алкилбензолов осуществляют дегидрирование парафинов с количеством от 9 до 14 атомов углерода в цепи, данный процесс протекает в реакторе дегидрирования на Pt-катализаторах [19].

В выходящем из данного реактора потоке содержатся диеновые углеводороды и водородсодержащий газ (ВСГ). Следующим этапом следует разделение потоков, а именно органического вещества и газа в сепараторе. При этом, ВСГ, который выделился на этой стадии отправляют на рециркуляцию, чтобы постоянно поддерживать уровень выхода диеновых углеводородов на необходимом для их получения уровне.

На следующей стадии получают неразветвленные олефины путем селективного гидрирования диеновых углеводородов в реакторе гидрирования на Ni-катализаторе [19].

При этом неразветвленные олефины, которые выходят из реактора гидрирования смешивают с жидким катализатором алкилирования, а именно фторводородной кислотой (HF).

Итак, на финальной стадии протекает процесс алкилирования бензола в реакторе алкилирования. Но в ходе представленного процесса, возможно образование побочных продуктов, а именно тяжелых ароматических соединений. Из-за этого поток, который выходит из реактора алкилирования, направляют в отстойник, а также это делается еще для того, чтобы осуществить регенерацию фтороводородного катализатора. В свою очередь, из этого отстойника выходят два потока: первый, который является целевым, состоит из смеси линейных алкилбензолов, а второй поток состоит из тяжелых ароматических соединений и отработанного катализатора. Далее поток отработанного катализатора отправляют на регенерацию в колонну-регенератор.

Помимо приведенных ранее стадий, в процесс алкилирования входит целый ряд вспомогательных этапов. Однако они являются важными наравне с

основными стадиями, потому что при помощи данных вспомогательных этапов определяют рабочее состояние данного технологического процесса. Одним из таких побочных этапов является регенерация катализатора алкилирования, фтороводородной кислоты в колонне-регенераторе. Данную колонну используют для удаления ненасыщенных продуктов из потока кислотного катализатора, т.к. они имеют высокую температуру кипения. Например тяжелые ароматические соединения имеющие высокую температуру кипения, накапливаются в потоке фтороводородной кислоты из-за их высокой растворимости в кислоте.

2.1.2 Технологическая схема процесса сульфирования

В приложении А представлена принципиальная технологическая схема процесса сульфирования ЛАБ ангидридом серной кислоты, с помощью данного процесса получают алкилбензолсульфо кислоты.

На первом этапе нужно получить ангидрид серной кислоты, который является основным газообразным сырьем для процесса сульфирования. Для этого предварительно обезвоживают воздух от влаги, который затем подается в печь для сжигания серы. Одновременно в печь из емкости Е-609 поступает жидкая сера. После этого, газовая смесь, в которой содержится SO_2 выходит из печи и поступает в следующий аппарат, а именно в теплообменник типа “труба в трубе” в котором происходит охлаждение газовой смеси воздухом до температуры 420-450 °С. Затем газовая смесь после охлаждения поступает в конвертер С-2111, это осуществляется для того, чтобы получить триоксид серы с помощью окисления диоксида. Далее поток, который выходит с третьей полки реактора конверсии поступает в теплообменник Е-2114, в котором данный поток охлаждается до температуры 220 °С. После этого газовый поток, который предварительно был охлажден в теплообменнике Е-2114 поступает в холодильник Е-2115 для окончательного охлаждения до 40 °С [20].

Основным процессом получения АБСК является процесс сульфирования линейных алкилбензолов, который осуществляется в пленочном многотрубном реакторе. Основным сырьем для получения АБСК является смесь ЛАБ, которая на начальном этапе поступает в дозировочный сосуд V-2211. Далее смесь линейных алкилбензолов поступает в распределительное устройство многотрубного пленочного реактора R-2211. При этом, триоксид серы подается через верх реактора, и поступает в распределительное устройство, где оттуда попадает в трубки реактора, именно в данных трубках происходит процесс сульфирования с получением алкилбензолсульфокислоты, которая затем стекает в нижнюю часть многотрубного пленочного реактора. Данная реакция протекает с выделением тепла, т.е она является экзотермической и для того чтобы отводить выделяющееся в ходе реакции тепло в межтрубное пространство реактора подается холодная техническая вода.

Поток продуктов реакции сульфирования со сборной камеры, которая находится в нижней части реактора, поступает в циклон CV-2211, где происходит разделение жидкой и газовой фаз. В оборудованном предварительном сепараторе SE-2212, который расположен перед циклоном, осуществляется отделение АБСК от потока газовой смеси в нижней части циклона. Затем, газовый поток отправляют на линию адсорбции, одновременно с этим жидкую фазу откачивают и разделяют на два потока. Один из потоков поступает в теплообменник пластинчатого типа E-2211, в котором осуществляется гидролиз ангидридов сульфоновой кислоты, а второй поток АБСК поступает в емкости V-2212-2215 на стабилизацию, данные емкости соединены последовательно. Далее образовавшаяся кислота отправляется в мешалку SM-2211, в которой осуществляется гидролиз ангидридов сульфоновой кислоты. Также к данной мешалке подводится техническая вода. После того как гидролиз проведен, качество полученной, в процессе сульфирования АБСК определяют в лабораторных условиях. Завершающим этапом служит отправка алкилбензолсульфокислоты на хранение в качестве

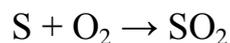
готового продукта для потребителей, а также из нее получают натриевую соль сульфоновой кислоты.

Исходя из этого, основным продуктом процесса сульфирования является АБСК, но чтобы контролировать качество данного продукта существуют определенные требования, которые представлены в Приложении Б [21].

2.2 Химизм процесса сульфирования

2.2.1 Подготовка газовой смеси SO₂

Жидкая сера сжигается в печи в избытке осушенного воздуха, в результате чего образуется сернистый ангидрид SO₂ по следующей реакции:



Сернистый ангидрид подвергается каталитическому окислению в избытке осушенного воздуха на катализаторе, содержащем пятиокись ванадия (V₂O₅), в результате чего образуется серный ангидрид SO₃ по следующей реакции:



Температура газовой смеси на входе в первый слой катализатора должна быть 420-450°C, а содержание SO₂ - не более 7,5 % об. В этом слое катализатора большая часть SO₂ окисляется в SO₃. Температура на входе газовой смеси не должна быть ниже 420°C, так как при этом резко падает скорость реакции и выше 450°C, так как повышается температура на выходе газовой смеси после первого слоя выше 600°C. С повышением температуры степень превращения уменьшается. Кроме того, высокая температура отрицательно сказывается на структуре 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.

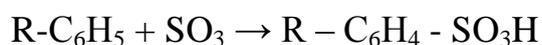
Чем выше концентрация SO_3 , тем выше скорость реакции сульфирования, тем больше тепла выделяется в единицу времени. Поэтому не следует превышать концентрацию SO_3 выше 5,5 % об.

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



2.2.2 Сульфирование линейных алкилбензолов ангидридом серной кислоты

Органическое сырье - линейный алкилбензол (ЛАБ) с формулой $\text{R}-\text{C}_6\text{H}_5$, где R является радикалом молекулы *n*-парафина с числом углеродных атомов от 10 до 13, взаимодействует в реакторе с серным ангидридом, в результате чего образуется сульфоновая кислота по следующей реакции [22]:



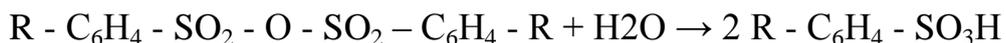
Наряду с указанной, возможны побочные реакции, в результате которых образуется ангидрид сульфоновой кислоты, или один из видов сульфоновой кислоты, такой как пиросульфоновая кислота.



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 несulfированную 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 мольное 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. Реакция сульфирования является экзотермической, и выделяющееся тепло отводится при помощи охлаждающей воды, подаваемой в рубашку реактора.

2.2.3 Механизм реакции сульфирования

На данный момент существует множество разных гипотез о протекании реакции сульфирования. Одна из гипотез заключается в следующем:

1) Реакция сульфирования представляет самую типичную реакцию электрофильного замещения, и соответственно в ней соблюдаются все закономерности, которые характерны для данного типа реакций [23].

На первой стадии механизма сульфирования аренов ангидридом серной кислоты происходит электрофильная атака атома углерода молекулой SO_3 , что ведет к образованию промежуточных π - и σ - комплексов, которые представлены на рисунке 2.2.

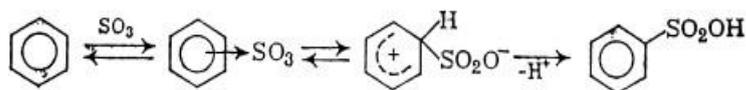


Рисунок 2.2 - Сульфирование аренов с промежуточным образованием π - и σ - комплексов

Данная реакция относится к реакциям первого порядка и протекает с достаточно быстро. Скорость данной реакции зависит от диффузионных факторов и, в большей степени, от интенсивности перемешивания и отвода выделяющегося тепла [24].

2) Самая распространенная гипотеза, в которой описывается механизм реакции сульфирования, изображен на рисунках 2.3 и 2.4. Известно, что реакция сульфирования начинается со взаимодействия SO_3 со смесью ЛАБ, что ведет к образованию алкилбензолсульфокилот и пиросульфокилот, как промежуточных соединений (рисунок 2.3). На данном этапе, пиросульфоновая кислота реагирует со смесью ЛАБ (1) для получения 2-х моль АБСК (6), как показано на рисунке 2.3. Один из этих мольных эквивалентов можно рассматривать как замену одного потребляемого на первом этапе, а другой может рассматриваться как вклад в увеличение конверсии [10,11].

К известным побочным реакциям относится образование сульфона (соединение, которое рассматривается в качестве инертного побочного продукта), серной кислоты и ангидрида сульфоновой кислоты.

Промежуточные продукты, а именно ангидрид сульфоновой кислоты и пиросульфоновая кислота, затем вступают в реакцию со смесью ЛАБ или водой для получения целевого продукта – сульфоновой кислоты [25].

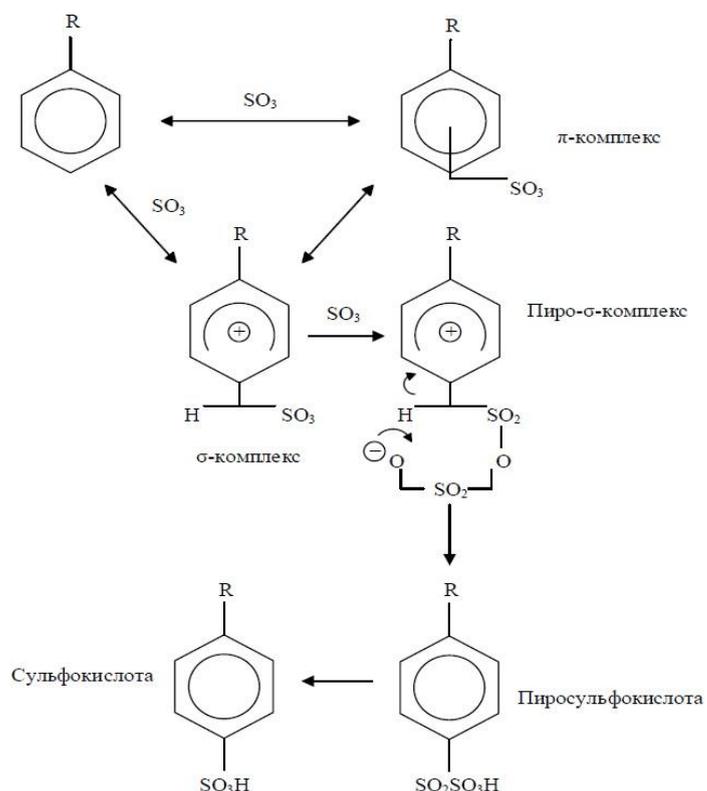


Рисунок 2.3 – Первичная реакция взаимодействия смеси ЛАБ с SO_3

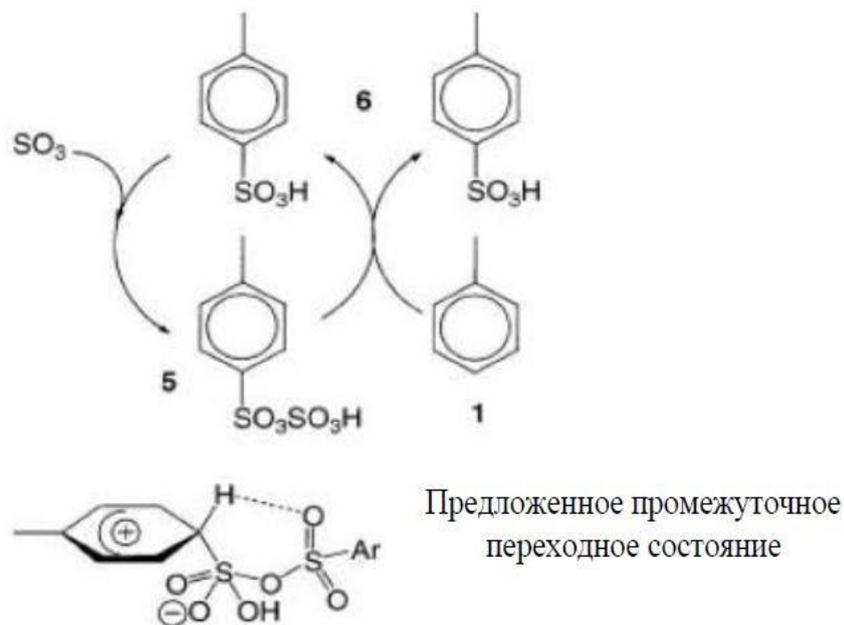


Рисунок 2.4 – Основная реакция: в качестве сульфорирующего агента выступает пиросульфоновая кислота

Как известно, знание механизма протекания целевой реакции позволяет предотвратить протекание побочных реакций, с помощью воздействия на внешние параметры, такие как: температура, мольное соотношение и т.д.

3 Экспериментальная часть

3.1 Разработка математической модели процесса сульфирования

Термодинамические параметры реакций протекающих в процессе сульфирования смеси ЛАБ при температуре 298К и давлении 0,04 МПа приведены в таблице 3.1.

Таблица 3.1 – Термодинамические параметры реакций процесса сульфирования смеси ЛАБ (при T – 298 К, P – 0,04 МПа)

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

Откуда, $R-C_6H_5$ - ЛАБ, $R-C_6H_4$ - SO_3H -АБСК, $R-C_6H_4-SO_2-O-SO_3H$ -пиросульфоновая кислота, $R-C_6H_4-SO_2-C_6H_4-R`$ - сульфон.

По представленной выше таблицы, можно сделать вывод о том, что термодинамическая вероятность протекания реакции сульфирования в боковую цепь по двойной связи гораздо выше, протекания реакции сульфирования в бензольное кольцо. Это происходит из-за того, что олефиновый радикал обладает более высокой реакционной способностью. Другими словами в реакционной смеси повышенное содержание непредельных линейных алкилбензолов является причиной интенсификации побочных реакций.

Со стороны законов термодинамики, протекание всех представленных реакций возможно при термобарических условиях проведения промышленного процесса сульфирования. Промежуточными веществами в процессе получения АБСК являются пиросульфокислоты и ангидриды алкилбензолсульфокислот, а реакция в ходе, которой образуются сульфоны, при данных условиях является обратимой.

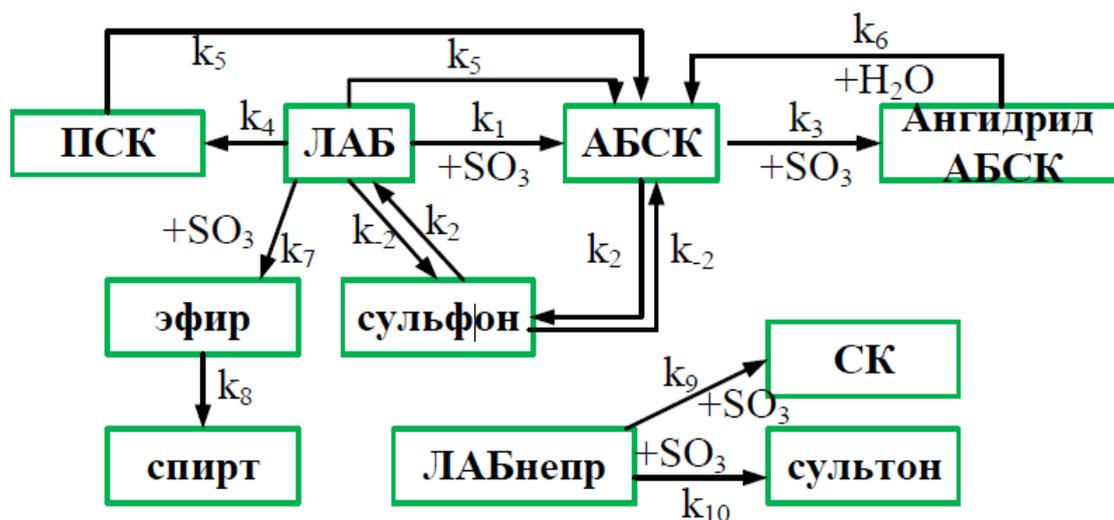


Рисунок 3.1 – Схема превращений углеводородов в процессе сульфирования

Сульфоны представляют кристаллические вещества (температура, при которой происходит плавление дифенилсульфонов, составляет 128-130 °С). Сульфоны обладают высокой термической и химической стабильностью, к тому же в смеси с АБСК, серной кислотой они находятся в жидком агрегатном состоянии [5,12].

Такие соединения как: эфиры, сультоны, сульфоны, спирты и СК рассматриваются под общим понятием “несульфированные соединения”, из-за того, что выделение каких-то определенных веществ, входящих в состав данной несульфированной части АБСК является недостаточно целесообразным.

Исходя из всего вышеописанного, формализованная схема взаимодействия углеводородов в процессе сульфирования ЛАБ ангидридом серной кислоты может быть представлена рисунком 3.2.

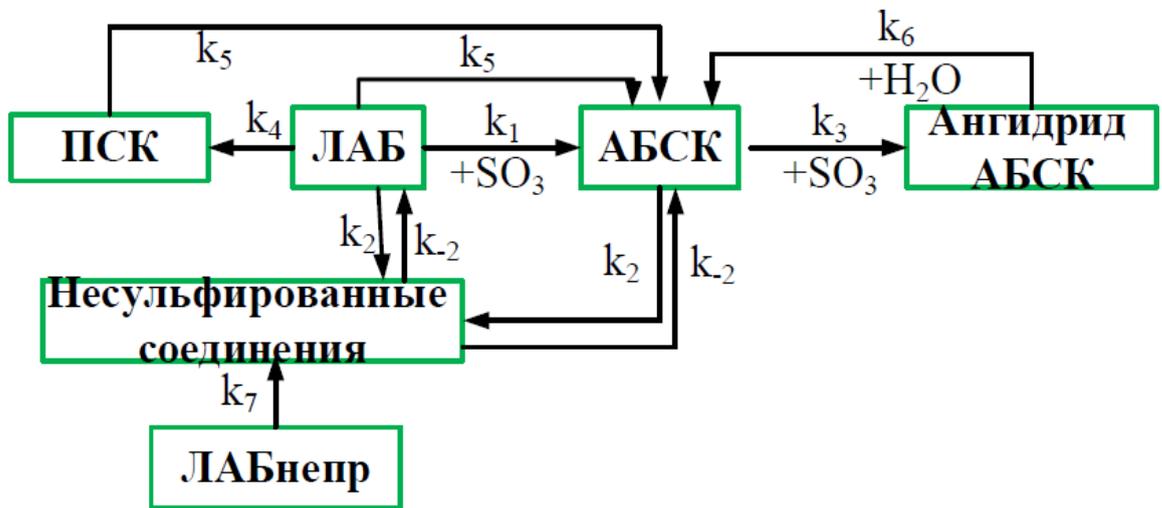


Рисунок 3.2 – Формализованная схема превращений углеводов в ходе процесса сульфирования

Основываясь на формализованной схеме превращений углеводов, были составлены основные выражения скоростей реакций для процесса сульфирования:

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

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

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

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

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

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

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

$$W_7 = k_7 \cdot C_{\text{ЛАБ.непред}} \cdot C_{\text{SO}_3}$$

Кинетическая модель процесса сульфирования имеет следующий вид:

$$\frac{dC_{\text{ЛАБ}}}{dt} = -W_1 - W_2 + W_{-2} - W_4 - W_5$$

$$\frac{dC_{\text{АБСК}}}{dt} = W_1 - W_2 + W_{-2} - 2W_3 + 2W_5 + 2W_6$$

$$\frac{dC_{\text{SO}_3}}{dt} = -W_1 - W_3 - 2W_4 - W_7$$

$$\frac{dC_{\text{несульф}}}{dt} = W_2 - W_{-2} + W_7$$

$$\frac{dC_{\text{ангидрид}}}{dt} = W_3 - W_6$$

$$\frac{dC_{\text{ПСК}}}{dt} = W_4 - W_5$$

$$\frac{dC_{\text{H}_2\text{SO}_4}}{dt} = W_3$$

$$\frac{dC_{\text{ЛАБ.непред}}}{dt} = -W_7$$

$$\frac{dC_{\text{H}_2\text{O}}}{dt} = W_2 - W_{-2} + W_6$$

Примем допущение о том, что режим работы данного реактора соответствует режиму идеальному вытеснения, тогда математическая модель процесса сульфирования может быть представлена следующим образом:

$$\begin{cases} G \frac{\partial C_i}{\partial Z} + G \frac{\partial C_i}{\partial V} = \sum_j W_j \cdot \alpha_j \\ G \frac{\partial C_i}{\partial Z} + G \frac{\partial C_i}{\partial V} = \frac{1}{C_p} \sum_j W_j \cdot \Delta H_j \cdot \alpha_j \end{cases}$$

Откуда C_i - концентрация i -го компонента, моль/л; G - массовый расход, кг/ч; W_j - скорость химической реакции, $\text{м}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$; C_p - массовая теплоемкость реакционной смеси, $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$; ΔH_j - тепловой эффект химической реакции, $\text{Дж}/\text{моль}$; T - температура, К ; α_j - активность реакционной среды в реакторе.

При этом начальные условия для данной модели следующие: $Z = 0$, $V = 0$, $C_i = C_i^{in}$, $T = T^{in}$.

В таблице 3.2 представлены входные экспериментальные данные и выходные расчетные параметры математической модели процесса сульфирования.

Таблица 3.2 – Входные и выходные параметры математической модели

Входные параметры	Выходные параметры
Состав и расход смеси ЛАБ	Выход АБСК, %масс.
Температура охлаждающего агента, в данном случае воды	Массовая доля несulfированных соединений в алкилбезолсульфокислоте.
Расход серы (соотношение расхода SO_3 к смеси ЛАБ)	Расход серной кислоты

3.2 Влияние входных параметров на выход АБСК применением специализированного программного обеспечения

В высокоуровневом языке программирования, а именно в Delphi 7 была разработана математическая модель процесса сульфирования (Приложение В).

С помощью данного ПО можно составлять прогнозы изменения таких технологических параметров, как: время контакта, температура, мольное соотношение и т.д., которые зависят от состава сырья подающегося в многотрубный реактор сульфирования. Это выполняется для того, чтобы оптимизировать процесс получения АБСК, а именно повысить качество и выход целевого продукта.

3.2.1 Оценка адекватности математической модели

Для оценки адекватности данной модели, были сопоставлены экспериментальные данные с предприятия, и данные рассчитанные в данной

программе, к тому же приведены погрешности расчетов за один рабочий цикл 2019 года, данная таблица представлена в приложении Г.

Из приведенной таблицы следует, что средние рассчитанные значения погрешностей (Δ) составляют:

- 1) по массовому содержанию несulfулируемого остатка – 4,64%;
- 2) по массовому содержанию алкилбензолсульфокислоты – 0,44%;
- 3) по массовому содержанию серной кислоты – 5,11 %;

На основе полученных данных, можно сделать заключение о том, что данная математическая модель процесса сульфирования является адекватной, т. к. средняя расчетная погрешность не превышает 10%, и поэтому дальнейшее использование данной программы целесообразно для дальнейших численных исследований.

3.2.2 Определение оптимального времени контакта сырья в реакторе сульфирования

Время контакта относится к параметрам, влияющим на выход и качество АБСК, с этой целью, в программе описывающей процесс сульфирования были проведены расчеты при разном времени контакта, результаты приведены в таблице 3.3.

Таблица 3.3 – Расчет оптимального времени контакта

Технологический параметр	Время контакта, с.							
	5	10	15	20	25	30	35	40
Дол. АБСК, %масс.	96,19	97,14	97,34	97,37	97,36	97,34	97,31	97,28
Дол. несulf., %масс.	3,35	2,28	1,98	1,86	1,80	1,77	1,75	1,73
Дол. H ₂ SO ₄ , %масс.	0,25	0,41	0,53	0,63	0,71	0,78	0,83	0,88

Из приведенной таблицы следует, что оптимальное время контакта находится в диапазоне 15-40 с., т.к. выход АБСК удовлетворяет требованиям предъявляемым к АБСК, т.е. выход АБСК должен превышать 96 %масс., и количество несulfурируемого остатка не должно превышать 2 %масс. и концентрация серной кислоты также не должна превышать 2 %масс. (Приложение Б). Однако самое оптимальное время контакта лежит в диапазоне 20-25 с., т.к. именно на это время приходится достаточно высокий выход АБСК: 97,37 %масс. для 20 с. и 97,36 для 25 с., а доля несulfурируемого остатка не превышает максимально допустимой концентрации 2 % масс.

3.2.3 Влияние температуры на выход АБСК

Одним из основных параметров, влияющих на выход и качество АБСК, является температура. В верхнюю часть реактора поступает смесь ЛАБ нагретая в интервале температур 25-45 °С, именно температура смеси ЛАБ влияет на выход и качество АБСК. В данной программе было исследовано влияние температуры смеси ЛАБ на выход и качество АБСК, результаты одного из рабочих циклов приведены на рисунке 3.3.

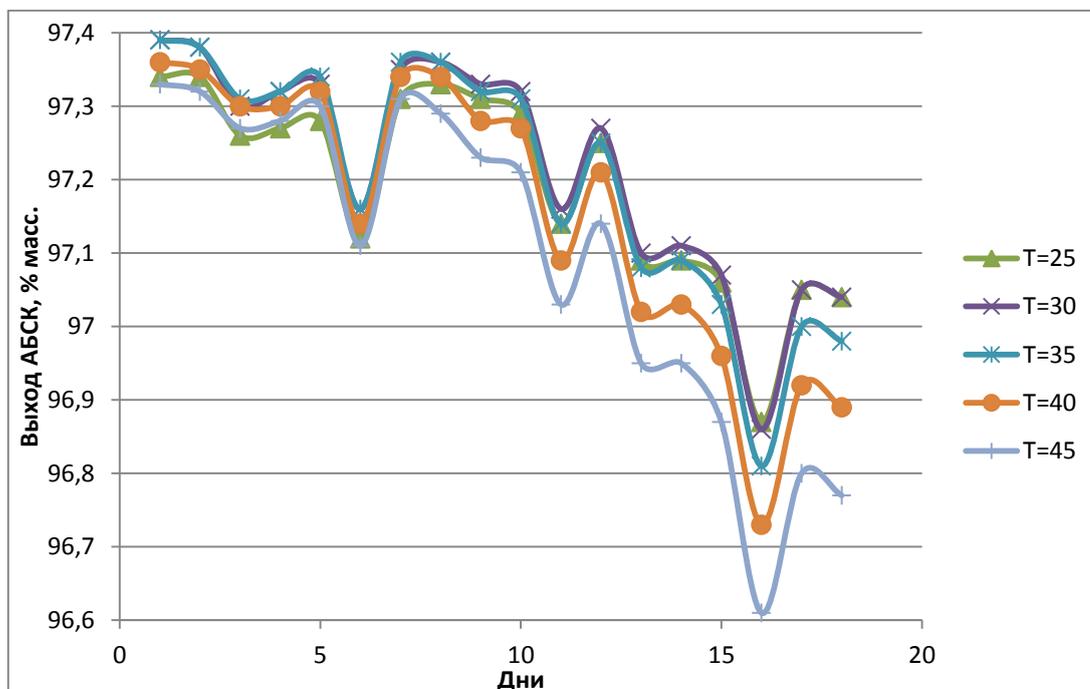


Рисунок 3.3 – Влияние температуры на выход АБСК

Из данного графика видно, что оптимальная температура находится в интервале температур 30-35°C, далее в данной программе были выполнены расчеты, для нахождения оптимальной температуры в данном интервале, результаты приведены в таблице 3.4.

Таблица 3.4 – Расчет оптимальной температуры для процесса сульфирования

День	Дол.АБСК, %масс. Т=30°C	Дол.АБСК, %масс. Т=31°C	Дол.АБСК, %масс. Т=32°C	Дол.АБСК, %масс. Т=33°C	Дол.АБСК, %масс. Т=34°C	Дол.АБСК, %масс. Т=35°C
1	97,39	97,39	97,39	97,39	97,39	97,39
2	97,38	97,38	97,38	97,38	97,38	97,38
3	97,30	97,31	97,31	97,31	97,31	97,31
4	97,32	97,32	97,32	97,32	97,32	97,32
5	97,33	97,33	97,33	97,34	97,34	97,34
6	97,16	97,16	97,16	97,16	97,16	97,16
7	97,35	97,35	97,36	97,36	97,36	97,36
8	97,36	97,37	97,37	97,37	97,36	97,36
9	97,33	97,33	97,33	97,33	97,32	97,32
10	97,32	97,32	97,32	97,32	97,31	97,31
11	97,16	97,16	97,15	97,15	97,14	97,14
12	97,27	97,27	97,27	97,26	97,26	97,25
13	97,1	97,1	97,09	97,09	97,08	97,08
14	97,11	97,11	97,11	97,10	97,09	97,09
15	97,07	97,06	97,06	97,05	97,04	97,03
16	96,86	96,85	96,85	96,84	96,82	96,81
17	97,05	97,04	97,03	97,02	97,01	97,00
18	97,04	97,03	97,02	97,01	97,00	96,98
Ср. знач.	97,21667	97,21556	97,21389	97,21167	97,205	97,20167

Как видно из таблицы самой оптимальной температурой является 30 °С, при среднем выходе АБСК равном 97,21667 % масс.. Кроме выхода АБСК, необходимо учитывать концентрацию высоковязкого компонента (ВВ),

т. к. при его накоплении происходит закупоривание трубок реактора, что приводит к остановке реактора и проведению промывочных работ. На рисунке 2.4 представлена зависимость концентрации высоковязкого компонента от температур.

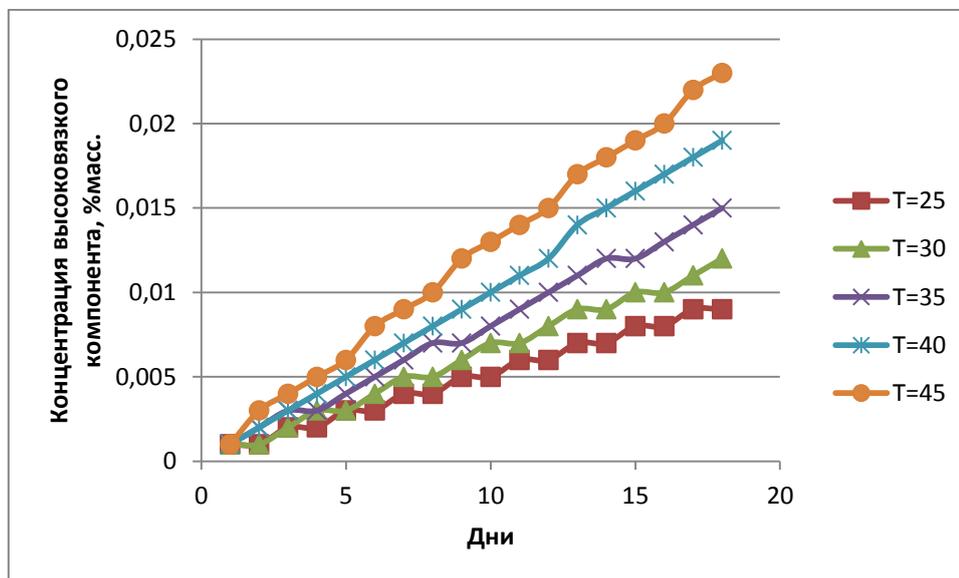


Рисунок 3.4 – Зависимость температуры от концентрации ВВ

Из приведенного графика следует, что при температуре 45°C концентрация ВВ превышает максимально допустимое значение равное 0,022% масс. и составляет 0,023% масс., что означает остановку реактора и начало проведения промывочных работ. Исходя из графика, можно сказать, что при остальных температурных режимах работу реактора можно продолжать, что в свою очередь приводит к увеличению рабочего цикла.

3.2.4 Оптимальное мольное соотношение $\text{SO}_3/\text{ЛАБ}$

Мольное соотношение $\text{SO}_3/\text{ЛАБ}$ является одним из важнейших критериев, т.к. данное соотношение оказывает непосредственное влияние на характер протекания как целевых, так и побочных реакций протекающих внутри реактора сульфирования. Следовательно, важной задачей является подбор такого соотношения, при котором выход АБСК был максимальным, а выход побочных продуктов являлся бы минимальным и соответствовал

требованиям качества предъявляемых к АБСК. В таблице 3.5 приведен подбор оптимального соотношения SO₃/ЛАБ.

Таблица 3.5 – Подбор оптимального мольного соотношения SO₃/ЛАБ

Технологический параметр	Мольное соотношение SO ₃ /ЛАБ									
	0,96	0,97	0,98	0,99	1	1,01	1,02	1,03	1,04	1,05
Расход ЛАБ, кг/ч	3500									
Дол. АБСК, %масс.	97,17	97,31	97,39	97,41	97,39	97,34	97,27	97,17	97,06	96,9
Дол. несульф., %масс.	2,26	2,08	1,96	1,88	1,85	1,84	1,86	1,9	1,95	2,02
Дол. H ₂ SO ₄ , %масс.	0,4	0,45	0,51	0,57	0,62	0,69	0,75	0,81	0,87	0,94

Из приведенной таблицы следует, что при любом соотношении SO₃/ЛАБ в диапазоне 0,96-1,05 выход АБСК удовлетворяет требованиям предъявляемым к АБСК, т.е. выход АБСК должен превышать 96 %масс., однако по данным требованиям количество несульфированного остатка не должно превышать 2 %масс. и концентрация серной кислоты также не должна быть выше 2 %масс. (Приложение Б). Исходя из всего приведенного можно сделать вывод, что оптимальное соотношение SO₃/ЛАБ находится в интервале 0,98-1,04.

3.2.5 Подбор оптимальной конструкции многотрубного реактора сульфирования

Исходя из того, что процесс получения АБСК на производстве осуществляется в многотрубных реакторах сульфирования, то возникает такая проблема как закупорка трубок из-за накопления высоковязкого компонента

(ВВ), когда концентрация достигает максимально допустимого значения ВВ, осуществляется остановка реактора и начинается проведение промывочных работ. Поэтому основной задачей является подбор оптимальной конструкции многотрубного реактора сульфирования для того, чтобы увеличить срок работы реактора и уменьшить межпромывочный цикл.

Как известно, что на современных промышленных предприятиях АБСК получают в многотрубных реакторах, в конструкцию которых входит пучок из 120 труб. Однако в данной программе были произведены расчеты, и оптимальным количеством труб входящих в конструкцию реактора является 40, для этого были взяты 2 рабочих цикла, в которых средний выход АБСК составил 97 % масс.

Таблица 3.6 – Характеристики основных параметров и режимов протекающих многотрубных реакторах

Количество трубок n	120	40
Диаметр трубки d, м	0,025	0,043
Объем трубного пространства V, м	0,353	0,353
Площадь поверхности S, м ²	56,52	32,63
Время контакта τ, с	27,65	19,31
Толщина пленки δ, мм	0,57	0,69
Объем ЛАБ, м ³ /сек	9,53·10 ⁻⁶	2,86·10 ⁻⁵
Re пленки	96,0	166,3
Re газа	1,05·10 ⁵	1,85·10 ⁵

Таблица 3.7 – Влияние конструкции на продолжительность работы многотрубного реактора

Цикл	1		2	
Количество трубок	120	40	120	40
Продолжительность, сутки	18	27	22	32
Концентрация высоковязкого компонента приходящаяся на последний день, %масс.	0,021	0,021	0,024	0,024

Основываясь на данных из таблицы 3.7, можно сделать заключение о том, что накопление ВВ протекает медленнее в реакторе с 40 трубками, что приводит к увеличению периода работы, а именно продолжительность первого цикла возросла на 9 суток и составила в целом 27 дней по сравнению с 18 сутками в реакторе со 120 трубками, а продолжительность второго цикла возросла на 10 суток и составило в целом 32 дней по сравнению с 22 сутками в реакторе со 120 трубками.

На основе данных представленных в таблице 3.6 можно сделать вывод, что при увеличении диаметра трубок площадь поверхности контакта снижается, что приводит к возрастанию объемного расхода жидкости, приходящегося на каждую трубку, это в свою очередь ведет к увеличению толщины пленки и линейной массовой плотности орошения. Исходя из этого, средняя скорость течения пленки жидкости увеличивается и также критерий Рейнольдса увеличивается. При возрастании критерия Рейнольдса осуществляется рост диффузии, что приводит к снижению накопления высоковязкого компонента.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение перспективности и успешности исследовательского проекта в рамках ВКР, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации.

Достижение цели обеспечивается решением задач:

- разработка общей экономической идеи проекта, формирование концепции проекта;
- организация работ по исследовательскому проекту;
- определение возможных альтернатив проведения исследований;
- планирование исследовательских работ;
- оценки коммерческого потенциала и перспективности проведения исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения;
- определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Нефтяная промышленность является важнейшей отраслью, которая формирует экономику страны. Углеводороды широко используются как основной источник химического сырья. Различными способами из них получают вещества, необходимые для производства пластмасс, синтетического текстильного волокна, синтетического каучука, спиртов, кислот, синтетических моющих средств (СМС) и т.д. Производство синтетических моющих средств относится к крупнотоннажной промышленности и потребность в данного рода веществ растёт из года в год. Основным компонентом моющих средств

является алкилбензосульфокислота (АБСК), одним из крупнейших производителей этого соединения в России является ООО «КИНЕФ».

Основные потребители – это предприятия по производству синтетических моющих средств. Производство СМС с высокими показателями качества определяет не только высокий спрос, но и конкурентные возможности предприятия на внутреннем и мировом рынках. Основными сегментами данного рынка являются крупные и мелкие компании нефтехимической промышленности, предприятия по производству бытовой химии. Именно они и являются наиболее перспективным сегментом для формирования спроса.

Проведем сегментирование рынка по приведенным признакам и составим карту сегментирования [26,27,28]:

Таблица 4.1 – Карта сегментирования рынка АБСК

		Содержание основных веществ, %		
		90-95%	95-98%	Выше 98%
Размер завода	Малый завод			
	Средний завод			
	Крупный завод			



– ООО «НПП Спецавиа»



– ООО «Кинеф»



– «Норкем» Норвегия

4.1.2. SWOT – анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) анализ применяется для комплексной оценки исследовательского проекта. Результатом анализа является описание сильных и слабых сторон проекта, выявление возможностей

и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде. Итоговая матрица SWOT-анализа представлена в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны: <i>С1.</i> Энергоэффективность и экономичность технологии. <i>С2.</i> Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями. <i>С3.</i> Значимость промышленной технологии. <i>С4.</i> Достаточно квалифицированный персонал. <i>С5.</i> Наличие бюджетного финансирования.</p>	<p>Слабые стороны: <i>Сл1.</i> Недостаточное количество необходимого оборудования для проведения исследования. <i>Сл2.</i> Неточность результатов. <i>Сл3.</i> Необходимость в материалах, комплектующих и новой информации для проведения научного исследования. <i>Сл4.</i> Высокая стоимость оборудования.</p>
<p>Возможности: <i>В1.</i> Использование инновационной структуры ТПУ. <i>В2.</i> Использование отечественного сырья. <i>В3.</i> Появление дополнительного спроса на продукт. <i>В4.</i> Повышение стоимости конкурентных разработок. <i>В5.</i> Возможность модернизации технологии. <i>В6.</i> Снижение цены на сырье.</p>	<p>С и В: 1. Контроль качества продукции в данный период времени, что имеет особую значимость в ситуации изменения качества сырья. 2. Исследование позволяет дальнейшее направление разработки процесса получения алкилбензолсульфокислоты. 3. Невысокая затратность даст возможность привлечь значительное количество исполнителей.</p>	<p>Сл и В: 1. Преобретение нового оборудования. 2. Создание инжиниринговой услуги для обучения персонала работе с готовой продукцией. 3. Вовлечение новых интеллектуальных ресурсов.</p>

<p>Угрозы: У1. Развитие конкуренции производства. У2. Введение новых государственных требований к сертификации продукции. У3. Истощение природных ресурсов. У4. Использование альтернативных компонентов для получения синтетических мощных средств (СМС).</p>	<p>С и У: 1.Создание конкурирующей готовой продукции. 2. Стандартизация и сертификация продукта. 3. Усовершенствование программы для увеличения спроса на продукт. 4. Применение данных методов к альтернативным компонентам СМС.</p>	<p>Сл и У: 1.Закупка необходимого оборудования. 2. Вовлечение новых интеллектуальных ресурсов. 3. Усовершенствование программы для увеличения спроса на продукт. 4. Стандартизация и сертификация продукта. 5. Создание конкурирующей готовой продукции.</p>
---	---	---

4.1.3. Оценка готовности проекта к коммерциализации

На любой стадии развития цикла полезно оценить степень готовности научной разработки к коммерциализации. Для этого необходимо заполнить специальную форму, содержащую показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта.

Таблица 4.3 – Оценки степени готовности проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	4

3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	4
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	4
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	3
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	4	4
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	5	4
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	4	4
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	5	4
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	4
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	4	4
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	5	4
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	5	5
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	4
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
	ИТОГО БАЛЛОВ	69	61

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

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

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

B_i – балл по i -ому показателю.

Значение $B_{\text{сум}}$ говорит о мере готовности научной разработки и к ее коммерциализации. В данном случае $B_{\text{сум}}$ составляет 69 и 61, т.е. от 75 до 60 оба направления входят в данный интервал. Такая научная разработка считается перспективной, а знания разработчика достаточными для коммерциализации. Успешное развитие производства алкилбензол-сульфокислоты (АБСК) составит хорошую конкуренцию зарубежным разработкам. Для этого необходимо вкладывать большие ресурсы в разработку, а также необходимо финансирование государства.

4.2. Планирование исследовательских работ в рамках ВКР

4.2.1 План проекта

В рамках планирования исследовательской работы необходимо построить календарный график проекта.

Таблица 4.4 – Календарный план проекта

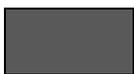
№	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников (ФИО ответственных исполнителей)
1	Получение задания и составление плана работ	7	01.09.2019	08.09.2019	Долганов И.М., Малецкий В.Ю.
2	Расчёт термодинамических параметров	90	09.09.2019	09.12.2019	Малецкий В.Ю.

3	Разработка математической модели	60	09.01.2020	09.03.2020	Долганов И.М., Малецкий В.Ю.
4	Оформление таблиц данных, графиков	20	09.03.2020	29.03.2020	Малецкий В.Ю.
5	Обсуждение	8	07.04.2020	15.04.2020	Долганов И.М., Малецкий В.Ю.
6	Оформление пояснительной записки	14	15.04.2018	29.04.2020	Малецкий В.Ю.

На основе таблицы 4.4 строим календарный план-график.

Таблица 4.5 – Календарный план-график проведения работ по теме

Код работ	Исполнители	Тк, раб. дн	Продолжительность выполнения работ					
			2019 год		2020 год			
			01.09-08.09	09.09-09.12	09.01-09.03	09.03-29.03	07.04-15.04	15.04-29.04
1	Руководитель, студент	7						
2	Студент	90						
3	Руководитель, студент	60						
4	Студент	20						
5	Руководитель, студент	8						
6	Студент	14						
i		199						



Руководитель



Студент

4.2.2 Бюджет проводимого исследования

При планировании бюджета исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета планируемые затраты группируются по статьям. Таблицы ниже показывают, сколько денег затрачено на научные исследования: приведены цены сырья, оборудования, заработная плата и другие расходы.

Таблица 4.6 – Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Ед. Измерения	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Карандаш	шт.	3	6	18
Бумага	пачка	2	250	500
Ручка	шт.	3	50	150
Папка	шт.	6	50	300
Тетрадь	шт.	3	40	120
Всего за материалы				1088
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				52
Итого по статье C_m				1140

Таблица 4.7 – Расчёт бюджета затрат на необходимое оборудование

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования с учетом НДС, руб.	Общая стоимость оборудования	Амортизация
1	Персональный компьютер	1	45000	45000	11250
2	Лазерный принтер	1	7000	7000	1750
Итого				52000	13000

При расчете амортизации принимаем средневзвешенную норму амортизации равной 25%.

Месячный должностной оклад работника:

$$З_m = З_б * (1 + k_{пр} + k_d) * k_p,$$

где $З_б$ – базовый оклад, руб.;

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

k_d – 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_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Для научного руководителя: [29]: $З_m = 35120 * (1 + 0,3 + 0,2) * 1,3 = 68484$ руб.

Для студента: [29]: $З_m = 12130 * 1,3 = 15769$ руб

$З_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб. Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_m \cdot M}{F_d}$$

где $З_m$ – 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;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 4.8 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней: - выходные - праздничные дни	44 14	48 14
Потери рабочего времени: - отпуск - невыходы по болезни	56 2	28 2
Действительный годовой фонд рабочего времени	249	273

$$Z_{\text{дн(рук.)}} = \frac{68484 * 10,4}{249} = 2860 \text{ руб.}$$

$$Z_{\text{дн(студ.)}} = \frac{15769 * 11,2}{273} = 647 \text{ руб.}$$

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}$$

Для руководителя: $Z_{\text{осн}} = 3080,40 * 75 = 231030 \text{ руб.}$

Для студента: $Z_{\text{осн}} = 600,72 * 199 = 119543,28 \text{ руб.}$

Таблица 4.9 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{\text{б}}$, руб.	$k_{\text{пр}}$	$k_{\text{д}}$	$k_{\text{р}}$	$Z_{\text{м}}$, руб.	$Z_{\text{дн}}$, руб.	$T_{\text{р}}$, раб. дн.	$Z_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	35120	0,3	0,2	1,3	68484	2860	80	231030
Студент	12130	0,3	0,2	1,3	15769	647	184	119543,28
Итого								350573,28

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

выполнение темы:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}}$$

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

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

$k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты, примем 12 %.

Таблица 4.10 – Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Студент
Основная зарплата	231030	119543,28
Дополнительная зарплата	27723,6	14345,19
Зарплата исполнителя	258753,6	133888,47
Итого по статье $C_{\text{зп}}$	392642,07	

Отчисления на социальные нужды. Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

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

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды

(пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Примем этот показатель равным 30,2 % [30].

Таблица 4.11 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Отчисления, руб.
Руководитель проекта	$C_{\text{внеб}}=0,302*258753,6=78143,58$
Студент	$C_{\text{внеб}}=0,302*133888,47=40434,32$
Итого	118577,9

Накладные расходы составляют 16 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы.

Расчёт накладных расходов ведётся по следующей формуле:

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

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

Для руководителя: $C_{\text{накл}} = 0,16 \cdot 258753,6 = 41400,58$ руб.

Для студента: $C_{\text{накл}} = 0,16 \cdot 133888,47 = 21422,15$ руб.

Таблица 4.12 – Группировка затрат по статьям расходов

Статья расходов	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
	Затраты, руб.		
Сырьё и материалы	1140	1500	1000
Амортизация	13000	18000	23000
Заработная плата	392642,07	392642,07	392642,07
Отчисления на социальные нужды	118577,9	148577,9	148577,9
Накладные расходы	62822,73	62822,73	62822,73
Итого	588182,7	623542,7	628042,7

4.2.3 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности проводимого исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

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

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

$$I_{\Phi}^p = \frac{588182,7}{628042,7} = 0,937$$

$$I_{\Phi}^p = \frac{623542,7}{628042,7} = 0,992$$

$$I_{\Phi}^p = \frac{698042,7}{698042,7} = 1$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки.

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

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

где I_m^a - 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.

Расчёт интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы, пример которой приведен ниже.

Таблица 4.13 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

ПО Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Адекватность разработки	0,3	5	4	5
2. Унифицированность	0,2	4	4	4
3. Простота применения	0,24	3	5	4
4. Универсальность	0,26	5	3	3
ИТОГО	1	4,32	3,98	4,04

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

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_\phi^p} = \frac{4,32}{0,937} = 4,61$$

$$I_{финр}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_\phi^p} = \frac{3,98}{0,992} = 4,01$$

$$I_{финр}^{a2} = \frac{I_m^{a2}}{I_\phi^p} = \frac{4,04}{1} = 4,04$$

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

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^{a1}} = \frac{4,61}{4,01} = 1,150$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\text{финр}}^{a2}} = \frac{4,61}{4,04} = 1,141$$

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

$I_{\text{финр}}^p$ – интегральный показатель разработки;

$I_{\text{финр}}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 4.14 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

№ п/п	Показатели	Аналог 1	Аналог 2	Разработка
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,992	1	0,937
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,98	4,04	4,32
3	Интегральный показатель эффективности разработки	4,01	4,04	4,61
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,150		1,141

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

5 Социальная ответственность

Объектом исследования данной работы является технология сульфирования линейного алкилбензола. В результате сульфирования линейного алкилбензола образуется алкилбензолсульфокислота (АБСК), которая является основным компонентом в производстве синтетических моющих средств (СМС).

Одним из важным в процессе трудовой деятельности является безопасности жизни и здоровья работников [31].

Целью социальной ответственности является содействие в защите работников от воздействия опасных и вредных производственных факторов, исключению несчастных случаев, в том числе со смертельным исходом и профессиональных заболеваний на производстве.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

В данном разделе рассмотрены специальные правовые нормы трудового законодательства и их особенности, применимые к условиям научно – исследовательского проекта по оценке эксплуатационных свойств моторных топлив в зависимости от их физико-химических свойств.

В феврале 2018 года правительством РФ подписано генеральное соглашение с общероссийскими объединениями профсоюзов и работодателей на 2018-2020 годы [32]. В частности, в соглашении говорится о стремлении к совершенствованию нормативной правовой базы и улучшения здоровья работников. Затронута задача по разработке комплекса мер, направленных на экономическое стимулирование технического перевооружения и модернизацию производства в целях улучшения условий труда. Говорится также о необходимости содействия развитию человеческого потенциала, внедрению принципов достойного труда, повышению эффективности государственного управления, социальной справедливости, ответственности и социального

партнерства. Государство в этом же документе обязуется продолжить развивать эффективную и устойчивую систему обязательного социального страхования, повышать уровень социальной защиты работающих граждан.

В целях сохранения и повышения работоспособности, ускорения адаптации к действию неблагоприятных условий труда, профилактики заболеваний, работающим в контакте с химическими веществами следует проводить витаминизацию, выдавать молоко каждый рабочий день [33].

Система управления охраной труда даёт предприятию возможность разработать свою концепцию по охране труда, установить цели (целевые показатели) охраны труда, организовать трудовые процессы с принятием необходимых мер повышения результативности охраны труда, а также создать социально-ориентированное производство, исключить ущерб в результате аварий, инцидентов и несчастных случаев.

Федеральный закон Российской Федерации N 426-ФЗ [31] устанавливает правовые и организационные основы и порядок проведения специальной оценки условий труда, определяет правовое положение, права, обязанности и ответственность участников оценки условий труда.

5.1.1 Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства

В соответствии с ТК РФ от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019) работник имеет право на:

- предоставление ему работы, обусловленной трудовым договором;
- рабочее место, соответствующее государственным нормативным требованиям охраны труда и условиям, предусмотренным коллективным договором;
- своевременную и в полном объеме выплату заработной платы в соответствии со своей квалификацией, сложностью труда, количеством и качеством выполненной работы;

- отдых, обеспечиваемый установлением нормальной продолжительности рабочего времени, сокращенного рабочего времени для отдельных профессий и категорий работников, предоставлением еженедельных выходных дней, нерабочих праздничных дней, оплачиваемых ежегодных отпусков;
- полную достоверную информацию об условиях труда и требованиях охраны труда на рабочем месте, включая реализацию прав, предоставленных законодательством о специальной оценке условий труда;
- подготовку и дополнительное профессиональное образование в порядке, установленном настоящим Кодексом, иными федеральными законами;
- защиту своих трудовых прав, свобод и законных интересов всеми не запрещенными законом способами;
- возмещение вреда, причиненного ему в связи с исполнением трудовых обязанностей, и компенсацию морального вреда в порядке, установленном настоящим Кодексом, иными федеральными законами;
- обязательное социальное страхование в случаях, предусмотренных федеральными законами.

5.1.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны

Экспериментальная часть данной работы осуществлялась на персональном компьютере (далее ПК) при работе с различными программными обеспечениями на Отделении химической инженерии. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха. Рабочее место в аудитории представляет собой стол, с находящимся на нем монитором и системным блоком ЭВМ, и офисный стул, соответствует требованиям [31].

5.2 Профессиональная социальная безопасность

5.2.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования

Согласно ГОСТу 12.0.002-2014 установлены специальные положения в сфере обеспечения безопасности трудовой и производственной деятельности необходимые для соблюдения.

Исследование физико-химических свойств моторного топлива в лаборатории с химическими реактивами и приборами может создать вредные и опасные факторы для работников исследования.

В представленной ниже таблице показаны вредные и опасные факторы, которые могут повлиять на работников при проведении исследования.

Таблица 5.1 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)			Нормативные документы
	Разработка	Эксплуатация	
1.Отклонение показателей микроклимата	+	+	ГОСТ 12.0.002-2014 Естественное и искусственное освещение ГОСТ 12.2.003- 91 СанПин 2.2.4.548-96 ГОСТ 12.1.003-2014 ГОСТ 12.1.007- 76 ГОСТ 12.1.005–88 ПНД Ф 12.13.1-03 - Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях
2.Отсутствие или недостаток естественного и искусственного света на рабочем месте	+	+	
3.Повышенная температура поверхностей оборудования, материалов	+	+	
4. Повышенный уровень шума	+	+	
5, Наличие электрических приборов	+	+	

Используя данные таблицы 5.1, можно учесть опасные и вредные факторы, которые теоретически могут возникнуть при работе с объектом.

5.2.2 Анализ вредных факторов при адаптации математической модели на производстве

Анализ на предприятии получения линейной алкилбензолсульфоукислоты показал, что наиболее опасными факторами являются следующие:

- токсическое отравление обслуживающего персонала, при разгерметизации трубопровода газовой смеси на выходе из печи с выбросом диоксида серы SO_2 ;

- химический ожог, который возможен при разгерметизации трубопроводной обвязки, фланцевых соединений на сепараторе с проливом олеума;

- токсическое воздействие с летальным исходом на персонал вторичного облака;

- химический ожог при разгерметизация трубопроводной обвязки, фланцевых соединений низа абсорбера с проливом серной кислоты (олеума);

- применение в качестве привода механического оборудования, освещение и питания средств КИПиА электроэнергии напряжением (380 ÷ 220 В) может привести к травмированию обслуживающего персонала путем поражения электрическим током и явиться источником загорания и взрыва.

- разгерметизация емкости с проливом щелочи, при попадании последней на обслуживающий персонал возможно нарушение кожного покрова и поражении внутренних органов;

- наличие в сырье и продукции активных соединений серы приводит к образованию в оборудовании и коммуникациях пиррофорных соединений (в результате химической коррозии металла), которые способны окисляться кислородом воздуха с сильным разогревом, что может являться причиной загорания.

Основными веществами, участвующими в создании поражающих факторов для наиболее вероятного и наиболее опасного сценария аварий,

является диоксид и триоксид серы, серная кислота (олеум), щелочь. Это соответственно вещества 3 и 2 класса опасности. Согласно ГН 2.2.5.1313-03 «Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны» [34] установлены следующие величины ПДК в рабочей зоне (табл. 5.2).

Таблица 5.2 – Предельно допустимые концентрации веществ на производстве

№	Название вещества	Величина ПДК, мг/м ³	Преимущественное агрегатное состояние в воздухе их условиях	Класс опасности
1	Линейный алкилбензол	300	аэрозоль	4
2	Сера	6	аэрозоль	4
3	Сернистый ангидрид (SO ₂)	10	газ	3
4	Серный ангидрид (SO ₃)	1	газ	2
5	Серная кислота (H ₂ SO ₄)	1	аэрозоль	2
6	Щелочь (NaOH)	0,5	аэрозоль	2

SO₃ (2-ой класс): раздражает верхние дыхательные пути, вызывает сильный кашель и воспаление дыхательных путей. При высоких концентрациях могут появиться кровавая мокрота, рвота (иногда с кровью), позже – тяжелые воспалительные процессы бронхов и лёгких. При попадании на кожу вызывает сильные ожоги. Первые симптомы отравления: неопределённое чувство нездоровья и сильной слабости, головокружение, головная боль, чувство холода и стеснение дыхания, тошнота, рвота.

H₂SO₄ (2-ой класс): в результате выделения SO₃ оказывает сильное раздражающее действие на кожу, глаза и органы дыхания, вызывая отек легких. При попадании на кожу вызывает тяжелые ожоги.

Щелочь (NaOH) (2-ой класс): Действие щелочей на организм обусловлено прежде всего их способностью поглощать воду из тканей, а также растворять тканевые белки с образованием щелочных альбуминатов при попадании растворов или пыли щелочей на кожу и слизистые оболочки. Опасно

попадание щёлочи в глаза, поскольку при этом также поражаются не только поверхностные ткани (роговица), но и более глубокие.

SO₂ (3-ий класс): раздражает дыхательные пути, вызывая спазм бронхов и увеличение сопротивления дыхательных путей. При воздействии SO₂ в виде 94 аэрозоля, образующегося при туманах и повышенной влажности воздуха, раздражающий эффект сильнее. При неблагоприятных метеорологических условиях может вызвать массовое отравление населения. Общее действие заключается в нарушении углеводородного и белкового обмена, угнетении окислительных процессов в головном мозге, печени, селезёнке, мышцах.

ЛАБ (линейный алкилбензол) (4-ый класс): не оказывает значительного токсикологического действия на организм, в зависимости от дозы может приводить к слабовыраженным аллергическим реакциям, не нарушает окислительных процессов в окружающей среде и внутри организма.

Сера (S): вещество 4-го класса опасности, которое вызывает воспаление слизистых оболочек глаз и верхних дыхательных путей, раздражение кожных покровов, ожоги, заболевание желудочно-кишечного тракта. Кумулятивными свойствами не обладает. Меры предосторожности: мытье в душе после работы с серой.

При возникновении аварийного положения на установке технологический персонал должен немедленно принять соответствующие меры по ликвидации аварии. Сообщить об аварийной ситуации диспетчеру производства, дежурным соответствующих энергетических служб (электроэнергия, пар, вода, воздух и т.д.), вызвать пожарную команду при угрозе пожара, газоспасательную службу, медицинскую помощь. Технологический персонал обязан также оповестить об аварии все взаимосвязанные технологические объекты.

Одновременно об аварийной ситуации на установке докладывается руководству установки, производства и после выполнения операций, предотвращающих развитие аварийной ситуации, возможно произвести нормальную остановку установки.

5.2.3 Анализ опасных факторов на рабочем месте

Так как вся работа выпускной квалификационной работы проводилась в компьютерной аудитории №135, проведем анализ опасных факторов именно для этого рабочего места. Охрана труда при работе за персональным компьютером, регулируются [31, 35, 36].

При работе за персональным компьютером необходимо оценить характеристику информационного взаимодействия человека и персональных электронно-вычислительных машин (далее ПЭВМ), особенности организации рабочего места, условия производственной среды, а именно освещение, микроклимат, уровень шума и вибрации, электромагнитные поля, визуальные эргономические параметры дисплея и т. д.

В рамках магистерской диссертации взаимодействие с ПК осуществлялось в форме работы в режиме диалога с ПК.

Уровень электромагнитных полей (ЭМП).

Одним из наиболее вредных факторов является ЭМП, которое при превышении допустимых уровней оказывает вредное влияние на нервную, иммунную, эндокринную системы человека. Наиболее подвержены влиянию ЭМП кровеносная система, головной мозг, глаза, иммунная и половая системы.

Наибольший вред состоянию здоровья человека наносят блок бесперебойного питания, переходники, незаземлённые розетки, а также мониторы и системные блоки. Основным источником ЭМ излучений от мониторов ПЭВМ является трансформатор высокой частоты строчной развёртки, который размещается в задней или боковой части терминала.

Согласно [36] допустимые уровни ЭМП, создаваемых ПЭВМ на рабочем месте пользователя представлены в таблице 5.3.

Таблица 5.3 – Временные допустимые уровни ЭМП, создаваемые ПЭВМ на рабочем месте

Наименование параметров	ВДУ
-------------------------	-----

Напряженность электрического поля	в диапазоне частот 5Гц – 2Гц	25 В/м
	в диапазоне частот 2 кГц – 400к Гц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	в диапазоне частот 5Гц – 2Гц	250 нТл
	в диапазоне частот 2 кГц – 400 кГц	25 нТл
Напряженность электрического поля		15 В/м

Мощность экспозиционной дозы в соответствии с [31] мягкого рентгеновского излучения в любой точке на расстоянии от экрана 0,05 м не должна превышать 1 мкЗв/ч (100 мкР/ч).

Используемый в процессе выполнения дипломной работы ПК соответствует предельно допустимому уровню излучения для цифровых устройств класса В части 15 правил Федеральной комиссии связи.

Полностью избежать воздействия ЭМП ПЭВМ невозможно. Но можно максимально снизить это воздействие. Для обеспечения на рабочем месте предельно допустимых уровней электромагнитных полей необходимо рациональное размещение рабочих мест, оснащённых ПЭВМ.

Уровень акустического шума и вибрации.

В соответствии с [37] уровень шума на рабочем месте пользователей ПК не должны превышать значений 50 дБА. В помещениях всех типов образовательных учреждений, в которых используются ПЭВМ, уровень вибрации должен быть ниже допустимых значений в соответствии с [38]. Рабочее место относится к общей вибрации 3 категории, типа В. Значения уровня акустического шума в учебной аудитории не превышают указанных норм.

Визуальные параметры устройств отображения информации.

Работа на ПК вызывает значительное напряжение функций зрительного аппарата. Расстройство органов зрения резко увеличивается при несбалансированном рабочем графике.

Продолжительная работа с ПК в диалоговом режиме может привести к снижению концентрации внимания и работоспособности, нарушению сна, ухудшению эмоционального состояния, хронической головной боли, повышенной возбудимости нервной системы, депрессии. Допускаемые значения визуальных показателей в соответствии с [31].

Для снижения вредности необходим сбалансированный режим работы с ПК. Расстояние от экрана монитора до глаз пользователя должно быть не меньше 50 см. Конструкция должна предусматривать регулирование яркости и контрастности.

Максимальное время работы за компьютером не должно превышать 6 часов за смену [38].

Освещение на рабочем месте.

Согласно [31, 39, 40] в компьютерных залах организовано естественное и искусственное освещение. Естественное освещение обеспечивается через оконные проемы с коэффициентом естественного освещения КЕО не ниже 1,2% в зонах с устойчивым снежным покровом и не ниже 1,5% на остальной территории.

Рабочий стол размещен таким образом, что монитор стоит тыльной и боковой сторонами к окнам, а естественный свет падает преимущественно слева. В помещении эксплуатации компьютеров искусственное освещение осуществляется системой общего равномерного освещения.

Для обеспечения нормативных значений освещенности в помещении проводится чистка стекол оконных проемов и светильников, а также своевременная замена перегоревших ламп.

Микроклимат на рабочих местах, оборудованных ПЭВМ.

На рабочих местах пользователей ПК должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата в соответствии с [41]. Согласно этому документу оптимальные характеристики микроклимата представлены в таблице 5.4. Рассматриваемую работу пользователя ПК относим к категории тяжести работ 1а (работы с интенсивностью энергозатрат до 120 ккал/ч (до 139 Вт)), производимые сидя и сопровождающиеся незначительным физическим напряжением).

Таблица 5.4 – Оптимальные параметры микроклимата

Сезон	Температура воздуха, t, °С	Относительная влажность, %
Холодный и переходный (средне суточная температура меньше 10 °С)	22-24	60-40
Теплый (среднесуточная температура воздуха 10 °С и выше)	21-23	60-40

Содержание вредных химических веществ.

Содержание вредных химических веществ в воздухе помещений, предназначенных для использования ПЭВМ во всех типах образовательных учреждений, не должно превышать предельно допустимых среднесуточных концентраций для атмосферного воздуха в соответствии с [42]. Рабочей зоной следует считать пространство высотой до двух метров над уровнем пола или площади, на которой находятся места постоянного или временного пребывания работающих.

Требования к организации и оборудованию рабочих мест с ПЭВМ для обучающихся в учреждениях высшего профессионального образования.

В соответствии с [31] на рабочее место одного пользователя ПЭВМ должно приходиться не менее 6 м². К помещениям, где находятся ПЭВМ, предъявляют требования к внутренней отделке. Полимерные материалы

используются для внутренней отделки интерьера помещений с ПЭВМ при наличии санитарно-эпидемиологического заключения согласно [43]. Помещения, где размещена ПЭВМ, должны быть снабжены защитным заземлением (занулением) в соответствии с техническими требованиями по эксплуатации.

Помещения для занятий оборудуются одноместными столами, предназначенными для работы с ПЭВМ, причем конструкция одноместного стола для работы с ПЭВМ должна соответствовать [31].

Оконные проемы в помещениях использования ПЭВМ должны быть оборудованы регулируемыми устройствами типа - жалюзи, занавесей и др.

Обеспечение электро- и пожарной безопасности на рабочем месте.

Требования безопасности при эксплуатации электрооборудования регламентируются [43,44], в соответствии с которым неэлектротехническому персоналу, выполняющему работы, при которых может возникнуть опасность поражения электрическим током, присваивается группа I по электробезопасности.

Присвоение группы I производится путем проведения инструктажа и проверкой приобретенных навыков безопасных способов работы или оказания первой помощи при поражении электрическим током. Присвоение I группы по электробезопасности проводится с периодичностью не реже 1 раза в год.

В соответствии со ст. 26 [43,44] учебная аудитория, оборудованная компьютером, относится к категории «В». Пожарная безопасность обеспечивается системой предотвращения пожара и системой пожарной защиты. Во всех служебных помещениях составлен «План эвакуации людей при пожаре», который регламентирует действия персонала в случае возникновения очага возгорания и указывает места расположения пожарной техники.

Горючими компонентами в помещении являются: строительные материалы для акустической и эстетической отделки помещений, перегородки, двери, полы, изоляция кабелей и др.

Источниками возгорания могут служить электрические схемы от ЭВМ, приборы, применяемые для технического обслуживания, дополнительные электроприборы (принтер, сканер, факс и т.д.), устройства электропитания, кондиционирования воздуха, где в результате различных нарушений в работе элементы перегреваются, могут возникнуть электрические искры, способные вызвать загорания горючих материалов.

5.3 Экологическая безопасность

Так как при создании программы математического моделирования процесса сульфирования невозможно учесть влияние вредных веществ на окружающую среду, поэтому в качестве альтернативы предлагается рассмотреть опасные вещества, утечка которых возможна на предприятии при производстве линейной алкилбензолсульфокислоты.

Работа установки сульфирования связана с образованием и выбросом загрязняющих веществ в атмосферу. Выбросы установки делятся на организованные и неорганизованные. К организованному выбросу относится выброс отходного газа через трубу.

К неорганизованным выбросам относятся выбросы через неплотности аппаратов, запорной, регулирующей и предохранительной арматуры, фланцевых соединений, уплотнений и т.д. Через неорганизованные выбросы могут выходить наиболее опасные вещества 3 и 2 класса опасности – сернистый ангидрид, серный ангидрид, серная кислота, щелочь, линейный алкилбензол, сера [45].

Объем образующихся сточных вод и степень их загрязненности определяются технологическим процессом. При авариях, ремонте аппаратов, оборудования и трубопроводов категорически запрещается сброс в канализацию нефтяных и химических продуктов, не являющихся сточными водами. Сточные воды, сбрасываемые в заводские сети канализации, не должны содержать вещества, вызывающие коррозию материала труб или их

засорение и обрастание. Запрещается сбрасывать в канализацию шламы от зачистки оборудования.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

При возникновении ЧС, мероприятия представляют собой проведение спасательных работ и неотложных аварийно-восстановительных работ в очаге поражения. Данные мероприятия определены в [46] и проводятся на основании положения комплекса государственных стандартов по предупреждению и ликвидации чрезвычайной ситуации.

При возникновении ЧС мирного времени (опасные природные явления, техногенные аварии) согласно [47] на территории Томской области наиболее вероятны следующие природные явления, создающие чрезвычайные ситуации и опасность при работе с ПК:

– Шторм со скоростью ветра 24,5–32,6 м/с и ураганы со скоростью ветра свыше 33 м/с могут привести к значительным и катастрофическим разрушениям и поломкам стволов деревьев, что может быть причиной нарушения и повреждения линий электропередач.

– Продолжительные сильные дожди с количеством осадков 100 мм и более за период более 12 ч и менее 48 ч.

Основную опасность для помещений, оборудованных ПЭВМ на территории г. Томска могут также представлять грозовые явления, при прямом попадании молнии может возникнуть пожар, произойти разрушение оборудования, поражение и гибель людей. Поэтому в случае грозовых явлений предусмотрена молниезащита (система, обеспечивающая перехват молнии и отвод её в землю, тем самым, защищая здание (сооружение) от повреждения и пожара).

Для 2 корпуса ТПУ одна из наиболее вероятных ЧС это опасные гидрологические явления в виде затопления подвальных помещений, подъездных и эвакуационных путей, а также образование оползня в весенний период из-за таяния снегов. Данные вредоносные факторы могут повлиять на

целостность сооружения и привести к разрушению здания. Для предотвращения ЧС разработаны инженерно-технические меры, включающие в себя: ливневые коммуникации, плановый вывоз снега, укрепления грунта насаждениями.

Наряду с другими техногенными авариями и катастрофами (пожары, взрывы, радиация, обрушение здания) в случае использования ПЭВМ необходимо рассмотреть опасность, возникающую от электричества.

Возникновение пожара считается производственной аварией, так как он наносит значительный материальный ущерб и может вызвать остановку технологического процесса. Любой пожар легче всего ликвидировать в начальной стадии, приняв меры к локализации очага, чтобы не допустить образования площади горения. Успех быстрой локализации очага пожара в начальной стадии зависит:

- от наличия огнетушительных средств и умения применять их;
- от наличия пожарной связи и сигнализации для оповещения о возникновении пожара и вызова пожарной помощи.

При загорании электрических аппаратов или веществ около проводов, находящихся под током во время тушения пожаров всегда имеется опасность поражения током. Поэтому в здании или его части, где производится тушение пожара, электрическая сеть должна быть отключена.

В случае поступления сигнала об эвакуации необходимо: обесточить все электроприборы, находящиеся на рабочем месте, перекрыть кран подачи воды, выключить освещение. Выходя из лаборатории необходимо выключить общий рубильник.

В случае стихийного бедствия или военного конфликта необходимо эвакуироваться. При стихийном бедствии необходимо оповестить всех работников об угрозе возникновения бедствия. К числу мероприятий по предотвращению и максимальному снижению последствий от стихийных бедствий относятся: строгое соблюдение специфических мер безопасности,

оповещение населения, специальная подготовка и оснащение формирований, оказание своевременной медицинской помощи пострадавшим.

Вывод: В данном разделе ВКР проведен анализ проекта с точки зрения социальной ответственности за моральные, общественные, экономические, экологические возможные негативные последствия. Работы выполнены в соответствии с нормативными документами и требованиями.

Заключение

В ходе выполненной работы было изучено влияние основных входных параметров, а именно: времени контакта, температуры, мольного соотношения $\text{SO}_3/\text{ЛАБ}$ на выход и качество алкилбензолсульфокислоты, к тому же была составлена кинетическая и математическая модель процесса сульфирования. Это было выполнено для того, чтобы составить рекомендации для оптимизации процесса получения АБСК в промышленных масштабах. Влияние входных параметров на выход АБСК было изучено в программе, разработанной в высокоуровневом языке программирования Delphi 7. Данная программа решает такие задачи, как: проведение типовых расчетов состава выходных потоков, определение сроков межпромывочных циклов реактора сульфирования или других выходных параметров при указанных составах сырья и технологических параметрах.

Исходя из полученных результатов самое оптимальное время контакта находится в диапазоне 20-25 с., т.к. именно на это время приходится достаточно высокий выход АБСК 97,37% масс. для 20 с. и 97,36 для 25 с., а доля несulfулируемого остатка не превышает максимально допустимой концентрации 2% масс. При этом самой оптимальной температурой является 30 °С, при среднем выходе АБСК равном 97,21667 % масс. и оптимальное соотношением $\text{SO}_3/\text{ЛАБ}$ находится в интервале 0,98-1,04.

К тому же был произведен расчет для подбора оптимального количества трубок в реакторе, для определения оптимальной конструкции многотрубного пленочного реактора сульфирования, с целью увеличения межпромывочных циклов. На основе данных расчетов выяснилось, что накопление ВВ протекает медленнее в реакторе с 40 трубками, что приводит к увеличению периода работы, а именно продолжительность первого цикла возросла на 9 суток и составила в целом 27 дней по сравнению с 18 сутками в реакторе со 120 трубками.

Список публикаций

1. В.Ю. Малецкий, И.М. Долганов, А.А. Солопова. Математическое моделирование процессов алкилирования и сульфирования при производстве алкилбензолсульфокислоты // «Химия и химическая технология в XXI веке» имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 110-летию со дня рождения профессора А.Г. Стромберга, Томск, 21-23 сентября 2020.

Список использованных источников

1. Петрище, Ф. А.. Синтетические моющие средства: потребительские свойства, нормирование, безопасность и эффективность использования/ Петрище Ф. А., Мальцева М. Н.. — Москва: Дашков и К, 2014. — 150 с.. — Книга из коллекции Дашков и К - Экономика и менеджмент.. — ISBN 978-5-394-02503-7.
2. Achimate [Электронный ресурс]/ URL: <http://www.acmite.com/marketreports/chemicals/global-surfactant-market.html>, свободный. — Загл. с экрана. — Яз. англ. Дата обращения: 18.03.2020- г.
3. Олонцев И.Ф., Ветошкин Ю.С. Тенденции развития производства и рынка СМС и товаров бытовой химии в России в XXI веке. — «Бытовая Химия». — 2005. — №20. — 4-8 с.
4. Адельсон С.В., Вишнякова Т.П., Паушкин Я.М., Технология нефтехимического синтеза: учеб. для вузов. — 2-е изд., перераб. — М.: Химия, 1985. — 608 с.
5. Attar M. B. Production of Linear Alkybenzene Sulfonic Acid (LAS) at High Pressure in Supercritical Carbon Dioxide Medium: the University of Waterloo. — Waterloo, Ontario, Canada, 2010. — 115 p.
6. Шевердяев О.Н., Белов П.С., Шкитов А.М. Основы технологии поверхностно-активных веществ и синтетических моющих средств. — Москва: МГОУ, 2001. — 201 с.
7. Баннов П.Г. Процессы переработки нефти. Часть 2. — М.: ЦНИИТЭнефтехим, 2001. — 415 с.
8. Sun B., Zhang L, Weng Z., Zhang L., Chu G., Zou H., Chen J. Sulfonation of alkylbenzene using liquid sulfonating agent in rotating packed bed: Experimental and numerical study //Chemical Engineering & Processing: Process Intensification. — 2017. — №119. — P 93-100.
9. Zhang D., Zhang P.-Y., Zou H-K., Chu G.-W., Wu W., Zhu Z.-W., Shao L., Chen J.-F. Application of HIGEE process intensification technology in

- synthesis of petroleum sulfonate surfactant //Chemical Engineering & Processing: Process Intensification. – 2010. – № 49. – P 508-513.
- 10.Roberts D. W. Sulfonation technology for anionic surfactant manufacture // Organic Process Research & Development. – 1998. – № 2. – P 194-202.
- 11.Roberts D. W. Optimisation of the linear alkyl benzene sulfonation Process for surfactant manufacture // Organic Process Research & Development. – 2003. – №7. – P 172-184.
- 12.Lanteri A. Sulfonation and Sulfation Technology // Journal of the American Oil Chemists' Society. – 1978. – №55. – P 128-133.
13. Многотрубный реактор с опускающейся пленкой для непрерывного сульфирования и/или сульфатирования жидкого органического вещества: пат. 2165788 Рос. Федерация / В01J10/02, С07В45/02 / Биргер Дахль; заявл. 22.03.1996; опубл. 27.04.2001.
- 14.YAMANE I. Recent Findings and Experiences with Alpha Olefin Sulfonates // J. AM. OIL CHEMISTS' SOC. – 1978. – №55. – P 81-86.
- 15.Gomez Mendoza N.A., Dobrosz-Gomez I., Gomez Garcia M.A. Modeling and simulation of an industrial falling film reactor using the method of lines with adaptive mesh. Study case: Industrial sulfonation of tridecylbenzene // Computers and Chemical Engineering. – 2014. – №68. – P 233-24.
- 16.Jose Colina-Marquez Deyler Castilla-Caballero Fiderman Machuca-Martinez Modeling of a falling-film photocatalytic reactor: Fluid dynamics for turbulent regime // Applied Mathematical Modelling. – 2016. – №40. – P 4812-4821.
- 17.Ortega J. Sulfonation/Sulfation Processing Technology for Anionic Surfactant Manufacture //Advances in Chemical Engineering. – 2012. – P 269-294.
- 18.Долганова И.О. Направления оптимизации работы системы «реактор–регенератор» в технологии производства линейных алкилбензолов // Фундаментальные исследования. – 2013. – № 4-2. – С. 281-285; URL: <http://www.fundamental-research.ru/ru/article/view?id=31183>. Дата обращения: 08.04.2020.

- 19.Каюмов Н. А., Назаров А. А., Поникаров С. И., Вилохина П. В. Современные промышленные технологические процессы дегидрирования углеводородов и их аппаратное оформление // Вестник Казанского технологического университета. 2013. №15. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/sovremennye-promyshlennye-tehnologicheskie-protsessy-degidrirovaniya-uglevodorodov-i-ih-apparaturnoe-oformlenie>. Дата обращения: 09.04.2020.
- 20.ТР. СМК П-032-2011: Постоянный технологический регламент на производство алкилбензолсульфокислоты методом сульфирования линейных алкилбензолов ООО «КИНЕФ», 2011. – 247 с.
- 21.Баннов П. Г. Основы анализа и стандартные методы контроля качества нефтепродуктов. – М.:ЦНИИТЭнефтехим., 2005. – 792 с.
- 22.ТР. СМК П-032-2017: Постоянный технологический регламент на производство алкилбензолсульфокислоты методом сульфирования линейных алкилбензолов ООО «КИНЕФ», 2017. – 247 с.
- 23.Леонова М. В. Сульфирование: Практикум // Самарский государственный технический университет. – Самара, 2005. – 57 с.
- 24.Ланге К. Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение – СПб.: Профессия. 2004. – 240 с.
- 25.Cross J. Anionic Surfactants-Analytical Chemistry // New York. – 1998. – 368 р.
- 26.Норкем [Электронный ресурс] / URL: <http://www.norchem.ru/o-kompanii> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 28.04.2020 г.
- 27.НПП Спецавиа [Электронный ресурс] / URL: <https://www.savia.ru/products/specialfluid/alkyl/>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 28.04.2020 г.
- 28.Кинеф [Электронный ресурс] / URL: https://www.kinef.ru/index.php?option=com_content&view=article&id=59 , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 28.04.2020 г.

29. Корпоративный портал ТПУ [Электронный ресурс] / URL: <http://portal.tpu.ru/departments/otdel/peo/documents> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 21.04.2018 г.
30. Журнал «Главбух» [Электронный ресурс] / URL: <https://www.glavbukh.ru/rubrika/157> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 05.05.2020 г.
31. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы: санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03: утверждены Главным государственным санитарным врачом Российской Федерации 13 июня 2003 г. № 118 г. Москва.
32. Российская Газета [Электронный ресурс] / URL: <https://rg.ru/2018/02/05/soglashenie-dok.html> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 23.04.2020 г.
33. Российская Газета [Электронный ресурс] / URL: <http://www.rg.ru/2010/03/30/tehreg-site-dok.html> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. Дата обращения: 23.04.2020 г.
34. Правила по охране труда при эксплуатации электроустановок; приказ Минтруда России от 24.07.2013 N 328н, зарегистрировано в Минюсте России 12.12.2013 N 30593.
35. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (принят ГД ФС РФ 21.12.2001) (ред. от 6.04.2015 г)// СПС Консультант
36. ГОСТ 12.1.002–84. Электрические поля промышленной частоты. Допустимые уровни и требования к проведению контроля на рабочем мест. – введ. 01.01.1986. – М.: Стандартинформ, 2009. – 7 с.
37. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки: санитарные нормы СН 2.2.4/2.1.8.562-96 утверждены Постановлением Госкомсанэпиднадзора России 31 октября 1996 г. № 36. Москва.

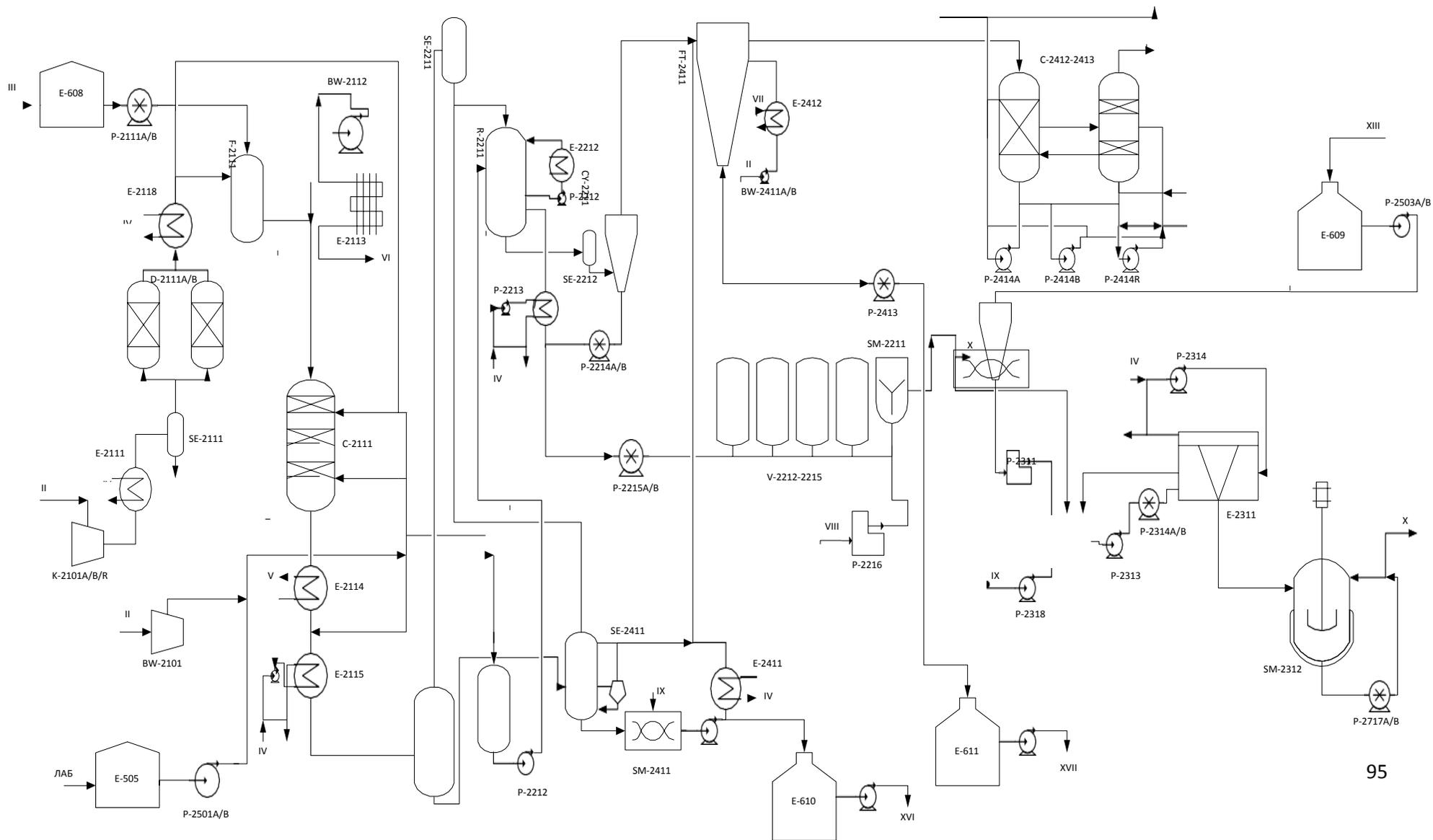
38. Производственная вибрация, вибрация в помещениях жилых и общественных зданий: санитарные нормы СН 2.2.4/2.1.8.566-96: утверждены Постановлением Госкомсанэпиднадзора России от 31 октября 1996 г. № 40. Москва.
39. Типовая инструкция по охране труда при работе на персональном компьютере ТОО Р-45-084-01: утверждена Приказом Министерства РФ по связи и информатизации от 2 июля 2001 г. N 162.
40. Естественное и искусственное освещение: санитарные нормы и правила СНиП 23-05-95 утверждены Постановлением Минстроя России от 2 августа 1995 г. № 18-78. Москва.
41. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий: санитарные правила и нормы СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03: утверждены Главным государственным санитарным врачом РФ 6 апреля 2003 г. Москва.
42. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений: санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.2.4.548-96: утверждены Постановлением Госкомсанэпиднадзора России от 1 октября 1996 г., № 21. Москва.
43. Полимерные и полимерсодержащие строительные материалы, изделия и конструкции. Гигиенические требования безопасности: санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.1.2.729-99: Постановлением Главного государственного санитарного врача РФ от 27 января 1999 г. № 3. Москва.
44. Правила по охране труда при эксплуатации электроустановок; приказ Минтруда России от 24.07.2013 N 328н, зарегистрировано в Минюсте России 12.12.2013 N 30593.
45. ГОСТ 12.1.007-76 "Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности".

- 46.ГОСТ Р 22.0.01-94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения. – введ. 01.01.1995. – М.: Издательство стандартов, 1994. – 11 с.
- 47.Евсеева Н.С., Ромашова Т.В. Опасные метеорологические явления как составная часть природного риска (на примере юга Томской области) // Вестник Томского государственного университета. – 2011. – №353. – с. 199-204.

Приложение А

(обязательное)

Технологическая схема блока сульфирования смеси ЛАБ ангидридом серной кислоты



Приложение Б

(справочное)

Технические требования АБСК по ТУ 2481-038-04689375-95

Наименование показателя	Норма		
	А	Б	В
Массовая доля алкилбензолсульфокислоты (основного вещества), %, не менее	96	90	80
Массовая доля серной кислоты, %, не более	2,0	5,0	15,0
Массовая доля несulfированных соединений в пересчете на основное вещество, %, не более	2,0	10,0	-
Плотность при 50 оС, г/см ³ , в пределах	1,0-2,0	-	-
Молекулярная масса, в пределах	318-326	-	-
Цветность водного раствора алкилбензолсульфоната натрия с массовой долей 5% (по основному веществу):			
В единицах йодной шкалы, не более	1,0	-	-
По методу Клетта, не более	80	100	-

Приложение В

(обязательное)

Инструкция по применению компьютерной программы процесса сульфирования

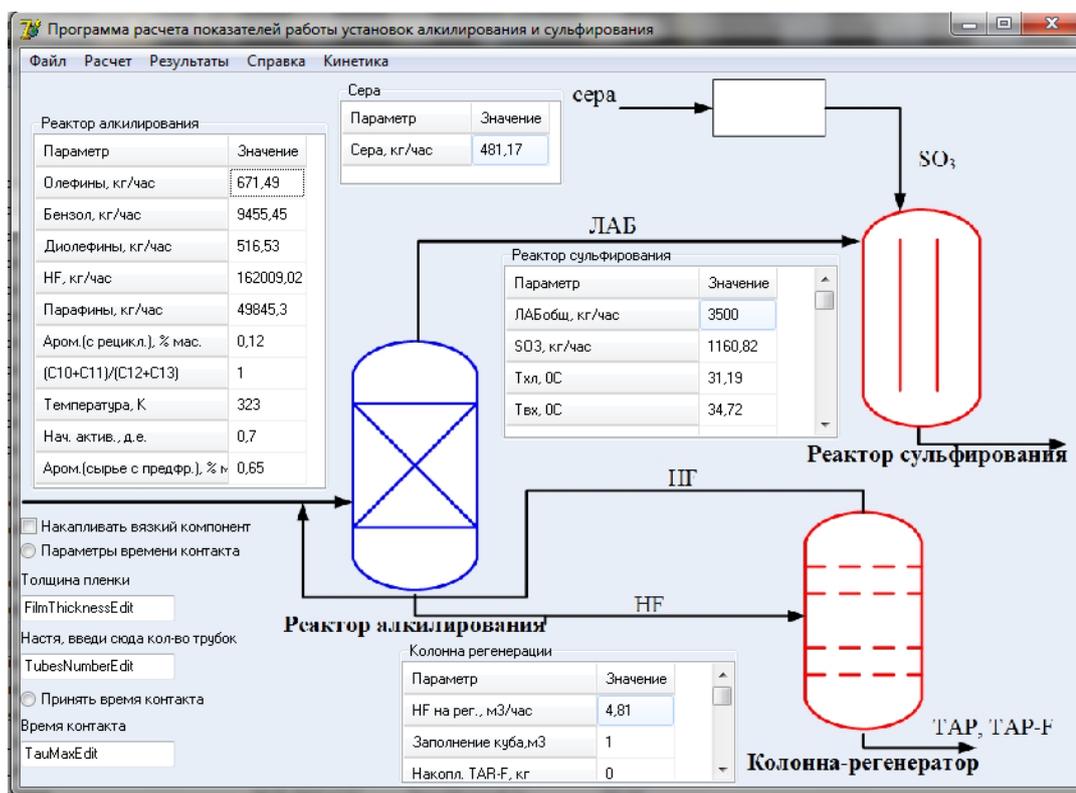


Рисунок В.1 – Визуальное оформление программы процесса сульфирования

Данное программное обеспечение позволяет смоделировать производственный процесс сульфирования в зависимости от состава сырья и установленного технологического режима работы, а также выводит результаты о качестве целевого продукта – АБСК, к тому же позволяет вычислить массовый процент побочных продуктов, таких как: несульфидуемый остаток и серная кислота. И в зависимости от выхода АБСК с помощью данной программы можно регулировать технологические параметры для того, чтобы получать АБСК высокого качества. К основным входным параметрам процесса сульфирования относятся: расход серы, расход смеси ЛАБ, температура охлаждающего агента, температура

исходных реагентов и т.д. После того как исходные данные будут заданы, происходит расчет и вывод значений на экран в виде таблицы:

Результаты расчетов процессов алкилирования и сульфирования													
Сокращенные результаты		Расширенные результаты											
TabSheet3		17.10.2019	18.10.2019	19.10.2019	20.10.2019	21.10.2019	22.10.2019	23.10.2019	24.10.2019	25.10.2019	26.10.2019	27.10.2019	28.10.2019
28	СУЛЬФИРОВАНИЕ												
29	Дата сульф.	17.10.2019	18.10.2019	19.10.2019	20.10.2019	21.10.2019	22.10.2019	23.10.2019	24.10.2019	25.10.2019	26.10.2019	27.10.2019	28.10.2019
30	Сера, кг/ч	481,17	481,17	481,17	481,17	481,17	481,17	481,17	481,17	481,17	481,17	481,17	481,17
31	ЛАБобщ, кг/ч	3500	3500	3500	3500	3500	3500	3500	3500	3500	3500	3500	3500
32	SO3, кг/ч	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82	1160,82
33	Тхл, °С	31,19	31,29	31,1	31,87	31,21	31,15	31,45	31,16	31,87	31,59	31,67	31,45
34	Твых, °С	34,72	33,98	34,45	35,13	35,2	34,45	34,42	36,97	37,81	34,26	34,47	33,66
35	VK	0,02	0,04	0,07	0,09	0,12	0,14	0,16	0,19	0,21	0,24	0,26	0,28
36*	Темп, °С	40,54	40,55	40,53	40,61	40,54	40,53	40,56	40,53	40,61	40,58	40,59	40,56
37	Вязкость, сСт	158,89	159,08	159,53	159,48	159,82	160,19	160,39	160,64	160,76	161,07	161,39	161,62
38	Конц. вис. вяз, моль/л	0,00081666	0,00159942	0,00243632	0,00327695	0,00409889	0,00491479	0,00574055	0,0066449	0,00759415	0,00839241	0,00922033	0,00999942
39	Твых, °С(расч.)	40,54	40,55	40,53	40,61	40,54	40,53	40,56	40,53	40,61	40,58	40,59	40,56
40	Несульф., %масс.(эксп.)	1,8	1,5	1,7	1,8	1,7	1,7	2	2,1	1,9	1,7	1,6	1,7
41*	Несульф., %масс.(расч.)	1,85	1,86	1,92	1,89	1,88	2,05	1,86	1,8	1,82	1,9	2,05	1,96

Рисунок В.2 – Окно программы с результатами расчетов

На основе представленного рисунка видно, что данная программа способна выдавать расширенный отчет данных, которые необходимы для научных исследований, а именно для выявления дополнительных закономерностей, связанных с процессом сульфирования.

Приложение Г

Таблица Г.1 – Сравнение экспериментальных и расчетных в программе данных за один рабочий цикл (2019 г.)

№	Параметр	Октябрь															Ноябрь		
		17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	1	2	3
1	Несульф., % мас. (эксп.)	1,8	1,8	1,8	1,8	1,8	1,9	2	1,8	1,9	1,8	1,9	1,8	2	2	2	2	1,9	1,9
2	Несульф., % мас. (расч.)	1,85	1,86	1,92	1,89	1,88	2,05	1,9	1,79	1,8	1,87	2,02	1,93	2,07	2,05	2,13	2,06	2,03	2,02
3	Несульф., % мас. (Δ)	2,70	3,23	6,25	4,76	4,26	7,31	5,26	0,56	5,56	3,74	5,94	6,74	3,38	2,44	6,1	2,91	6,4	5,94
4	Дол. АБСК, % мас. (эксп.)	96,9	97	96,8	96,8	96,9	96,9	96,5	96,5	96,9	97	96,9	96,9	96,9	96,5	96,4	96,6	96,8	96,7
5	Дол. АБСК, % мас. (расч.)	97,3 9	97,38	97,31	97,3 2	97,3 4	97,1 6	97,3 6	97,37	97,3 2	97,3	97,14	97,24	97,0 7	97,0 9	97,0 1	96,8 2	96,9 9	96,98
6	Дол. АБСК, % мас.(Δ)	0,51	0,39	0,53	0,54	0,45	0,27	0,89	0,9	0,43	0,31	0,25	0,35	0,18	0,61	0,63	0,23	0,2	0,29

Продолжение таблицы Г.1

7	Дол. H ₂ SO ₄ , % мас. (эксп.)	0,7	0,6	0,8	0,7	0,6	0,6	0,6	0,8	0,7	0,7	0,8	0,8	0,8	0,7	0,7	0,6	0,7	0,7
8	Дол. H ₂ SO ₄ , % мас. (расч.)	0,65	0,63	0,72	0,64	0,64	0,64	0,63	0,75	0,73	0,67	0,78	0,76	0,77	0,7	0,68	0,66	0,7	0,72
9	Дол. H ₂ SO ₄ , % мас. (Δ)	7,69	4,76	11,11	9,38	6,25	6,25	4,76	6,66	4,11	4,48	2,56	5,26	3,89	0	2,94	9,09	0	2,77