

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
 Направление подготовки 18.04.01 «Химическая технология», профиль «Химическая технология топлива и газа»
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Математическое моделирование процесса получения основы моющих присадок для моторных масел

УДК 665.76.038.2:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Хроян Лилит Артуровна		

Руководитель ВКР

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

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ивашкина Елена Николаевна	д.т.н.		

**Запланированные результаты обучения
по образовательной программе «Химическая технология топлива и газа»
(направление подготовки 18.04.01 «Химическая технология»)**

Код компетенции СУОС	Наименование компетенции СУОС (самостоятельно устанавливаемого образовательного стандарта)
Общекультурные (универсальные) компетенции	
УК(У)-1	Способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действия
УК(У)-2	Способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способность организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности
ОПК(У)-2	Готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОПК(У)-3	Способность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки
ОПК(У)-4	Готовность к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез
ОПК(У)-5	Готовность к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способность организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей
ПК(У)-2	Готовность к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи
ПК(У)-3	Способность использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
Дополнительные профессиональные компетенции (профессиональные компетенции, установленные университетом)	
ДПК(У)-1	Готовность к решению профессиональных производственных задач – контролю технологического процесса, разработке параметров проведения технологического процесса, разработке технологических расходных коэффициентов сырья и материалов, энергоресурсов, к выбору основного и вспомогательного оборудования
ДПК(У)-2	Способность использовать математические модели и пакеты прикладных программ для описания и прогнозирования различных явлений
ДПК(У)-3	Способность проводить технологические и технические расчеты по проектам, технико-экономический анализ проекта
ДПК(У)-4	Способность разрабатывать учебно-методической документации для реализации образовательных программ

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
 Направление подготовки 18.04.01 «Химическая технология», профиль «Химическая технология топлива и газа»
 Отделение школы (НОЦ) Отделение химической инженерии

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

**ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ02	Хроян Лилит Артуровна

Тема работы:

Математическое моделирование процесса получения основы моющих присадок для моторных масел	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	28-93/с от 28.01.2022

Срок сдачи студентом выполненной работы:	25.05.2022
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Объект исследования – реактор сульфирования линейного алкилбензола серным ангидридом. Режим работы – непрерывный. Сырье – линейный алкилбензол и серный ангидрид. Реактор сульфирования предназначен для производства алкилбензолсульфокислоты, являющийся компонентом в производстве синтетических моющих средств.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1 Обзор литературы по процессу сульфирования линейного алкилбензола. 2 Объект и методы исследования процесса. 3 Экспериментальная часть 4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение. 5 Социальная ответственность. Заключение.

	Список литературы. Приложение.
Перечень графического материала	нет
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент отделения социально-гуманитарных наук Рыжакина Татьяна Гавриловна
Социальная ответственность	Доцент отделения общетехнических дисциплин Сечин Андрей Александрович
	Доцент отделения иностранных языков Надеина Луиза Васильевна
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
1 Литературный обзор	1 Literature review
1.1 Моющая способность поверхностно-активных ПАВ	1.1 Detergency of surfactants
1.2 Производство линейного алкилбензола и линейного алкилбензоласульфоновой кислоты	1.2 Production of linear alkylbenzene and linear alkylbenzenesulfonic acid
1.3 Способы получения серного ангидрида	1.3 Methods for obtaining sulfuric anhydride
1.3.1 Окисление сернистого ангидрида	1.3.1 Oxidation of sulfur dioxide
1.4 Агенты для снижения реакционной способности серного ангидрида	1.4 Agents for reducing the reactivity of sulfuric anhydride
1.4.1 Выбор способа сульфирования	1.4.1 Choice of sulfonation method
1.5 Виды реакторов сульфирования	1.5 Types of sulfonation reactors
1.5.1 Реактор смешения	1.5.1 Mixing reactor
1.5.2 Многотрубчатый пленочный сульфатор Ballestra	1.5.2 Ballestra multi-tubular film sulphonator
1.5.3 Кольцевой пленочный реактор Chemithon	1.5.3 Chemithon ring film reactor
1.5.4 Пленочный реактор цилиндрического типа	1.5.4 Film reactor of cylindrical type
1.6 Математическая модель процесса сульфирования ароматических углеводородов	1.6 Mathematical modeling of the process of sulfonation of aromatic hydrocarbons
1.6.1 Массовый баланс процесса сульфирования	1.6.1 Mass balance of sulfonation process
1.6.2 Тепловой баланс процесса сульфирования	1.6.2 Heat balance of sulfonation process

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	21.01.2022
---	------------

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Хроян Лилит Артуровна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ02	Хроян Лилит Артуровна

Школа	ИШПР	Отделение	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	
Влияние геологического строения на элементный состав природных объектов приповерхностного горизонта на примере Батуринского рудопоявления золота Томской области	Работа с научной литературой, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив разработки проекта с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта
2. Планирование и формирование бюджета разработки	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение бюджета научного исследования
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности разработки	Проведение оценки экономической эффективности, ресурсоэффективности и сравнительной эффективности различных вариантов исполнения
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):	
1. Оценка конкурентоспособности технических решений 2. Матрица SWOT 3. График проведения и бюджет проекта 4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности разработки	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	01.03.2022
---	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	Кандидат экономических наук		01.03.2022

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Хроян Лилит Артуровна		01.03.2022

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 2ДМ02		ФИО Хроян Лилит Артуровна	
Школа		Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология топлива и газа

Тема ВКР:

<i>Математическое моделирование процесса получения основы моющих присадок для моторных масел</i>	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<p>Введение</p> <ul style="list-style-type: none"> – Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. – Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации 	<p>Объект исследования – технология сульфирования линейного алкилбензола; Область применения – нефтехимическая промышленность; Рабочая зона – компьютерный класс ОХИ ТПУ; Количество и наименование оборудования рабочей зоны – персональный компьютер (16шт); Рабочие процессы – разработка математической модели;</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при разработке проектного решения:</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>Федеральный закон № 426-ФЗ от 28 декабря 2013 года «О специальной оценке условий труда»; ТОИ Р-45-084-01. Типовая инструкция по охране труда при работе на персональном компьютере; Федеральный закон № 123-ФЗ от 22.07.2008 г (ред. от 30.04.2021) «Технический регламент о требованиях к пожарной безопасности»; ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя; ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности; СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение; СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки</p>
<p>2. Производственная безопасность при разработке проектного решения:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов – Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора 	<p>Анализ вредных и опасных факторов: - Недостаточная освещенность помещений; - Отклонение показателей микроклимата; - Повышенный уровень шума; - Поражение электрическим током; - Зрительное и умственное перенапряжение. Средства защиты: - Спецодежда; - Соблюдение техники безопасности; - Использование звукоизоляционных ограждений, противозумных наушников, шлемов; - Соблюдать соответствующее расстояние до токоведущих частей, ограждение токоведущих частей.</p>

	<p>Расчет уровня вредного производственного фактора: Расчет системы искусственного освещения.</p>
3. Экологическая безопасность при разработке проектного решения:	<p>Влияние на атмосферу минимальна, так как процесс выполнения работы не связан с производством. Возможны отходы в виде макулатуры, неисправных деталей ПК и люминесцентных ламп.</p>
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при разработке проектного решения:	<p>Возможные ЧС: Техногенного характера (пожар, взрыв); Природного характера (наводнения, ураган, землетрясения и тд) Наиболее типичная ЧС: возникновение пожара. Для его ликвидации необходимо использовать огнетушитель, песок, асбестовое одеяло.</p>
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООД ШБИП	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Хроян Лилит Артуровна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 114 страниц, 34 рисунков, 38 таблиц, 47 источников, 2 приложения.

Ключевые слова: математическая модель, сульфирование, линейный алкилбензол, линейный алкилбензолсульфокислота, сернистый ангидрид, серный ангидрид, синтетические моющие средства, поверхностно-активные вещества.

Объектом исследования является установка сульфирования линейных алкилбензолов.

Цель работы – оптимизация процесса сульфирования линейного алкилбензола с применением математической модели, а также разработка математической модели получения серного ангидрида.

В данной работе выполнена оптимизация с помощью метода генетического алгоритма и ручным способом, определены влияния параметров на процесс сульфирования ароматических углеводородов. Также разработана математическая модель получения серного ангидрида из сернистого.

Данная работа направлена на установление и изучение закономерностей, которые послужат основой для разработки рекомендаций по изменению технологических параметров процесса сульфирования линейных алкилбензолов для повышения качества получения алкилбензолсульфокислоты.

Область применения – нефтехимия, бытовая химия.

Содержание

Введение.....	12
1 Литературный обзор	13
1.1 Моющая способность поверхностно-активных ПАВ	13
1.2 Производство линейного алкилбензола и линейного алкилбензолсульфоновой кислоты.....	14
1.3 Способы получения серного ангидрида	15
1.3.1 Окисление сернистого ангидрида	16
1.4 Агенты для снижения реакционной способности серного ангидрида	16
1.4.1 Выбор способа сульфирования.....	19
1.5 Виды реакторов сульфирования.....	20
1.5.1 Реактор смешения	21
1.5.2 Многотрубчатый пленочный сульфатор Ballestra	22
1.5.3 Кольцевой пленочный реактор Chemithon	24
1.5.4 Пленочный реактор цилиндрического типа.....	25
1.6 Математическая модель процесса сульфирования ароматических углеводородов.....	26
1.6.1 Массовый баланс процесса сульфирования.....	27
1.6.2 Тепловой баланс процесса сульфирования	29
2 Объект и методы исследования	31
2.1 Химизм процесса сульфирования ароматических углеводородов	31
2.1.1 Механизм процесса сульфирования ароматических углеводородов ..	31
2.2 Принципиальная технологическая схема процесса сульфирования ароматических углеводородов.....	33
3 Экспериментальная часть.....	34
3.1 Влияние основных параметров на процесс сульфирования ароматических углеводородов.....	34
3.1.1 Влияние расхода линейного алкилбензола	34
3.1.2 Влияние температуры на входе в реактор	34
3.1.3 Влияние соотношения балласт/сырье	34

3.2	Оптимизация процесса сульфирования ароматических углеводородов ..	34
3.2.1	Оптимизация процесса сульфирования ароматических углеводородов методом генетического алгоритма	34
3.2.2	Оптимизация процесса сульфирования ароматических углеводородов методом ручного подбора	37
3.3	Разработка математической модели окисления сернистого ангидрида	37
3.3.1	Варьирование параметров процесса окисления сернистого ангидрида	37
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	38
4.1	Предпроектный анализ	38
4.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования	38
4.1.2	Анализ конкурентных технических решений позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	39
4.1.3	SWOT – анализ	40
4.1.4	Оценка готовности проекта к коммерциализации	42
4.1.5	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	44
4.2	Инициализация проекта	45
4.3	Планирование управления научно-техническим проектом	46
4.3.1	Иерархическая структура работ проекта	47
4.3.2	План проекта	47
4.4	Бюджет научного исследования	48
4.4.1	Организационная структура проекта	53
4.4.2	План управления коммуникациями проекта	53
4.4.3	Реестр рисков проекта	54
4.5	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности	54
4.5.1	Оценка абсолютной эффективности исследования	54
4.5.2	Оценка сравнительной эффективности исследования	60
5	Социальная ответственность	63
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	63

5.2 Производственная безопасность.....	65
5.2.1 Отклонение показателей микроклимата.....	67
5.2.2 Повышенный уровень шума	68
5.2.3 Недостаточная освещенность рабочей зоны.....	69
5.2.4 Поражение электрическим током.....	72
5.2.5 Зрительное и умственное перенапряжение	72
5.2.6 Повышенный уровень электромагнитных излучений.....	72
5.3 Экологическая безопасность.....	73
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	74
Заключение	76
Список литературы	77
Приложение А	82
Приложение Б.....	83

Введение

В настоящее время наблюдается рост производства высококачественных моторных масел, отвечающих ужесточенным требованиям современной и перспективной техники, за счет широкого использования эффективных присадок различного назначения. Высокощелочные сульфонаты, вырабатываемые на основе нефтяных и синтетических алкилароматических углеводородов обеспечивают получение моторных масел с высоким моюще-диспергирующими, нейтрализующими и другими эксплуатационными свойствами.

Основной составляющей всех синтетических моющих средств (СМС) являются поверхностно-активные вещества (ПАВ). Ожидается, что на мировом рынке объем ПАВ, вырастет с 30,65 млрд. долл. в 2015 до 39,69 млрд. долл. к концу 2021 года [1]. В составе СМС имеется 10-40 % ПАВ, а также различные добавки, повышающие моющую способность. Наиболее популярны синтетические моющие вещества на основе анионных ПАВ получают в реакциях сульфирования.

СМС были известны в течении последних десятилетий. Их использование началось во время Первой и Второй мировых войн из-за все большего потребления животных жиров и растительных масел, таких как кокосовое, оливковое, подсолнечное и касторовое масло, в пищу людям, что привело к развитию промышленных исследований [2]. И с 1940 года получают сульфоновую кислоту в качестве основного сырья для производства СМС путем сульфирования алкилбензола олеумом [2].

Сульфирование является основным промышленным химическим процессом, используемым для производства широкого спектра продуктов, включая красители и усилители цвета, пигменты, лекарственные средства [3]. Однако процесс сульфирования в более крупных масштабах используют в производстве линейных алкилбензосульфонов, обладающих поверхностно-активными свойствами [4] в качестве моющих добавок в смазочных маслах.

Также нефтеперерабатывающие предприятия применяют процесс сульфирования для производства белых масел.

Установки сульфирования разбросаны по всему миру с мощностью от 3000 до 50 000 тонн в год [5]. По оценкам, на сегодня в мире действует не менее 800 установок сульфирования. Однако около 20% мирового производства (2.500.000 тонн/год сульфированных анионных поверхностно-активных веществ) сосредоточено в США, Западной Европе и Японии [5].

Целью данной работы является проведение оптимизации процесса сульфирования ароматических углеводородов с использованием математической модели, а также разработка математической модели для получения серного ангидрида. Изучение закономерностей позволят выявить технологические параметры процесса сульфирования для эффективного производства линейного алкилбензолсульфоокислоты (ЛАБСК).

1 Литературный обзор

Процесс сульфирования ароматических углеводородов серным ангидридом применяют с целью получения СМС [6].

Синтетические моющие средства (СМС) – это смеси ПАВ со вспомогательными компонентами, усиливающими моющие действия ПАВ. Поверхностно-активные вещества являются одним из наиболее широко используемых, производимых и потребляемых химических соединений, обладающие моющими свойствами.

В качестве поверхностно-активных веществ используют линейный алкилбензолсульфоокислоту (ЛАБСК), полученный при сульфировании линейного алкилбензола (ЛАБ) серным ангидридом (SO_3) [7].

1.1 Моющая способность поверхностно-активных ПАВ

Результатом действия СМС являются процессы физико-химические. Прежде всего данные процессы определяются строением молекулы ПАВ.

Молекула ПАВ является асимметричной структурой, имеющая в своем составе полярные (гидрофильные) и неполярные (гидрофобные) группы [7-10]. Такое дифильное строение приводит к поверхностной активности ПАВ, то есть их способность адсорбироваться на межфазных границах [11].

Ребиндером П.А. был сформулирован принцип моющего действия [12] в котором говорится, что моющая способность определяется поверхностной активностью ПАВ, способных давать насыщенные адсорбционные слои на отмываемой поверхности и частицах загрязнения.

Имеется несколько стадий моющего действия [8], где в начале происходит смачивание поверхности загрязнителя раствором ПАВ. Далее удаление загрязнителей и их удерживание в объеме моющего раствора, также предотвращение его повторного осаждения на отмываемой поверхности.

1.2 Производство линейного алкилбензола и линейного алкилбензолсульфоновой кислоты

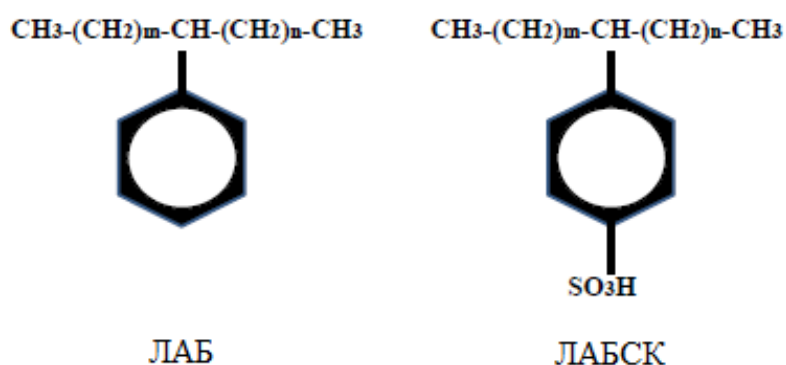


Рисунок 1 – Молекулярная структура линейного алкилбензола и линейного алкилбензолсульфоновой кислоты [13]

Линейный алкилбензол является наиболее распространенным органическим сырьем в моющей промышленности.

Линейный алкилбензолсульфоновая кислота (ЛАБСК) относится к категории анионных поверхностно-активных веществ, характеризующееся гидрофобной и гидрофильной группами [13]. Представляют собой химические вещества с углеродной цепью 10-13 атомов углерода и имеющие одну или несколько сульфогруппы.

ЛАБСК получают сульфированием линейного алкилбензола (ЛАБ). Исходный материал ЛАБ получают алкилированием бензола n-парафинами в присутствии фтористого водорода (HF) или хлорида алюминия (AlCl₃) в качестве катализатора.

ЛАБСК является самым крупным синтетическим поверхностно-активным веществом из-за его относительно низкой стоимости производства, хорошей производительности, так как он может быть высушен до стабильного порошка, а также из-за его биоразлагаемой экологичности [13]. Более 80% ЛАБСК, производимого во всем мире, используется в производстве моющих средств. Он также имеет некоторые применения в текстильной промышленности, в качестве смачивающего или диспергирующего агента. ЛАБСК может использоваться в кислых и в щелочных составах, в жидких и порошковых формах. Он также совместим с другими поверхностно-активными веществами.

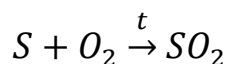
1.3 Способы получения серного ангидрида

SO₃ – это агрессивный электрофильный реагент, который быстро вступает в реакцию с любым органическим соединением, содержащим донорную группу электронов.

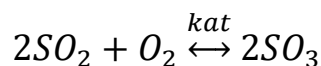
Промышленные способы получения серного ангидрида:

1. Окисление сернистого ангидрида кислородом воздуха в присутствии катализатора.

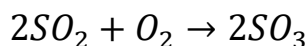
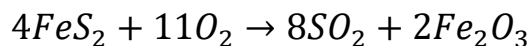
Сырьем для получения серного ангидрида является сера газовая, которая сжигается в печи с образованием сернистого ангидрида:



Далее происходит окисление сернистого ангидрида до серного в присутствии ванадиевого катализатора:



2. Обжиг пирита:



1.3.1 Окисление сернистого ангидрида

Наиболее востребованным способом получения SO_3 является окисление сернистого ангидрида до серного. Данная реакция обратимая и экзотермическая. Реакция проводится с использованием катализатора V_2O_5 .

Ванадиевая контактная масса содержит в среднем 7% оксида ванадия, активатор K_2O и в качестве носителя алюмосиликаты. Так как энергия активации реакции достаточно высокая $E_a > 300 \text{ кДж/моль}$ в отсутствие катализатора окисление не протекает даже при высокой температуре. Поэтому наличие катализатора снижает энергию активации, а, следовательно, увеличивает скорость реакции.

Реакция образования серного ангидрида на ванадиевом катализаторе проводится при температуре 450°C и в избытке кислорода, так как при данных условиях конверсия составляет 95-98%. При температуре меньше 450°C реакции протекает медленно, а выше происходит смещение равновесия в сторону обратной реакции.

1.4 Агенты для снижения реакционной способности серного ангидрида

Сульфирование является трудной реакцией для выполнения в промышленных масштабах, поскольку реакция является быстрой и высоко экзотермической, высвобождая примерно $380 \text{ кДж/кг } SO_3$ [2]. Большинство органических соединений образуют черный уголь при контакте с чистым SO_3 из-за быстрой реакции и выделения тепла.

Вязкость ЛАБ увеличивается от 5 до 400 раз по мере их превращения в сульфокислоту [2]. Это большое увеличение вязкости затрудняет отвод тепла за счет снижения коэффициента теплоотдачи от реакционной массы. Эффективное охлаждение реакционной массы необходимо, так как высокие температуры

способствуют протеканию реакций, которые приводят к образованию нежелательных побочных продуктов.

Также, необходим точный контроль мольного соотношения SO₃ к органическому веществу, поскольку любой избыток SO₃ в силу своей реакционной природы способствует побочным реакциям и образованию побочных продуктов. Поэтому промышленные реакции сульфирования требуют специального оборудования и приборов, позволяющих жестко контролировать мольное отношение SO₃ к органике и быстро отводить теплоту реакции.

Проблема реакционной способности SO₃ была решена путем его разбавления и/или комплексообразования, что позволяло уменьшить скорость реакции. В качестве разбавляющих агентов используют сульфаминовая кислота, хлорсульфокислота, серная кислота и олеум, SO₃ в сухом воздухе. Разбавляющие или комплексообразующие агенты представлены на Рисунке 3 [3].

Контроль соотношения SO₃ к органическому сырью важен для достижения желаемого качества продукта с использованием любого из агентов. Кроме того, эти процессы требуют отвода тепла для поддержания качества продукции.

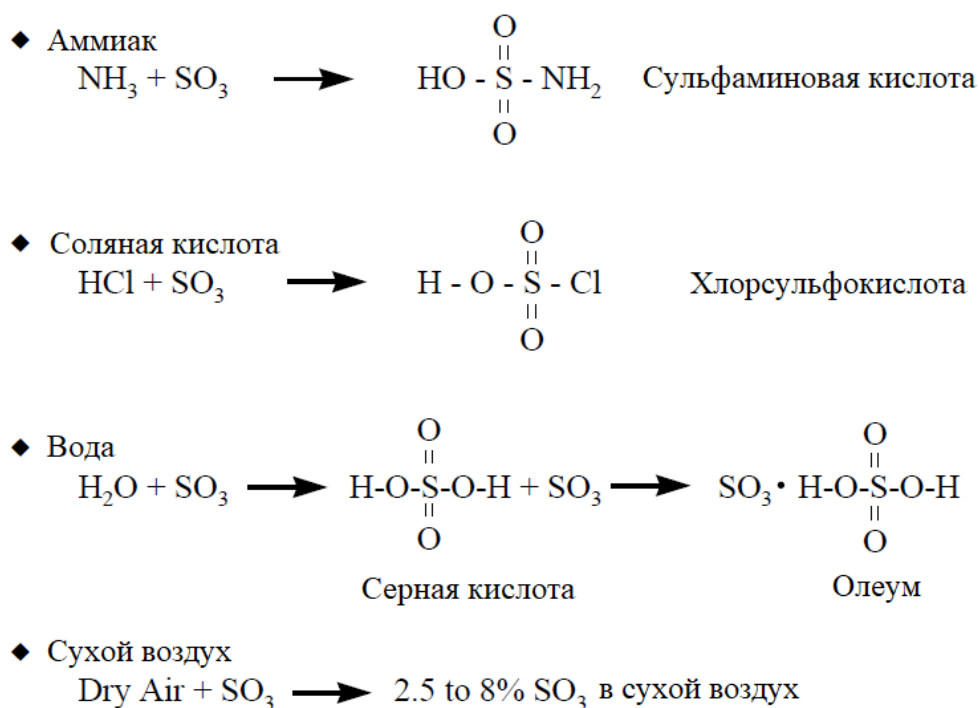


Рисунок 3 – Сульфорирующие агенты [3]

Сульфаминовая кислота ($\text{NH}_2\text{SO}_3\text{H}$) используется для сульфирования спиртов и этоксилированных спиртов с образованием нейтрализованной аммонием соли. Сульфаминовая кислота дорогой реагент, стоящий примерно 0,51 доллара США за фунт реакционноспособного SO_3 . Важным преимуществом сульфаминовой кислоты является то, что она избирательно сульфировует спиртовые группы и не сульфировует ароматические кольца [3, 13]. Поэтому его основное применение - сульфирование этоксилатов алкилфенола.

Хлорсульфокислота (ClSO_3H) также широко используется для производства спиртовых сульфатов, спиртовых эфиров сульфатов, красителей и промежуточных красителей [3]. По мере завершения реакции выделяется соляная кислота (HCl). Эта кислота должна быть очищена или восстановлена. Хлорсернистая кислота является дорогостоящим источником SO_3 . Стоимость одного фунта реактивного SO_3 составляет 0,255 доллара США [3]. Он является агрессивным и опасным химическим веществом для обработки и высвобождает HCl в качестве побочного продукта во время реакции. Соляная кислота может быть восстановлен путем промывки потока отходящих газов водой или нейтрализован путем промывки отходящих газов разбавленным основным промывочным раствором. В любом случае к процессу добавляется дополнительное оборудование и сложность.

Широко используется в качестве сульфорирующего агента - серная кислота (H_2SO_4) и олеум ($\text{SO}_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$). Это обратимый процесс, так как в ходе реакции образуется вода, которая разбавляет олеум или серную кислоту и в результате происходит десульфирование. Для смещения равновесия в сторону продукта необходимо удалить воду или повысить количество кислоты. Олеум используется для сульфирования алкилбензола и сульфатных жирных спиртов для тяжелых моющих средств [2]. Олеум относительно недорог – около 0,153 доллара США за фунт реакционноспособного SO_3 . Этот процесс имеет двойное преимущество - низкую стоимость SO_3 и низкую стоимость капитального оборудования. Однако он имеет недостаток в том, что оставляет большое

количество непрореагировавшей серной кислоты. Эта отработанная кислота должна быть отделена от реакционной смеси и впоследствии утилизирована.

Сульфирование серной кислотой является частным случаем сульфирования олеума. Потому что реакция прекращается, когда концентрация кислоты в реакционной смеси падает менее чем примерно до 90%, что приводит к резкому снижению скорости сульфирования [3].

Процесс сульфирования воздуха/ SO_3 – это прямой процесс, в котором газ SO_3 разбавляется очень сухим воздухом и реагирует непосредственно с органическим сырьем. Источником газа SO_3 может быть либо жидкий SO_3 , либо SO_3 , образующийся при сжигании серы. Стоимость жидкого SO_3 составляет 0,09 доллара США за фунт реактивного SO_3 . Процесс сульфирования воздуха/ SO_3 имеет меньшую стоимость SO_3 из всех процессов сульфирования и чрезвычайно универсален, производя очень высококачественные продукты. Однако это непрерывный процесс, который лучше всего подходит для больших объемов производства. Кроме того, для этого требуется дорогостоящее высокоточное оборудование.

1.4.1 Выбор способа сульфирования

Выбор способа сульфирования влияет от различных факторов. Одним из самых важных является желаемая продукция и ее требуемое качество. Каждый процесс производит разные продукты. Некоторые сульфорирующие агенты имеют универсальный характер, а другие используют лишь для получения определенного вида продукта. Например, процесс сульфаминовой кислоты производит только сульфаты аммония из спиртов.

Некоторые процессы, такие как процесс воздух/ SO_3 , способны сульфировать большое разнообразие исходного сырья и производить из всех них продукты превосходного качества.

Вторым фактором при выборе процесса сульфирования – требуемая производственная мощность. Процесс сульфаминовой кислоты – это процесс периодического действия и используется для производств материала в

небольших количествах. Процесс воздух/ SO_3 крупномасштабный непрерывный процесс, который лучше всего подходит для 24 часов в сутки, семь дней в неделю производства тонн продукта в час. Процессы хлорсульфокислоты и олеума могут выполняться как серийно, так и непрерывно.

Для производства большого количества материала процесс воздух/ SO_3 имеет преимущество. Однако для мелкосерийного производства высокоценного специализированного продукта это преимущество может быть перевешено другими соображениями, такими как первоначальная стоимость оборудования и необходимость непрерывной работы.

Также важным фактором является безопасность, так как серная кислота концентрированная, жидкий серный ангидрид являются опасными для обработки, транспортировки и хранения. Сера, как в жидкой, так и в твердой форме, хотя и является менее опасным вариантом в качестве исходного материала для производства SO_3 , все еще является рискованной.

При выборе процесса сульфирования важна стоимость технологического оборудования. Для этого необходимо посмотреть на установленную стоимость системы, объем резервуара и необходимые системы безопасности [3]. Стоимость оборудования почти в точности обратно пропорциональна стоимости реагента.

Последним фактором, является стоимость утилизации отходов. Процессы сульфирования хлорсульфокислоты и олеума производят большие потоки побочных продуктов либо соляной кислоты, либо серной кислоты. Эти побочные продукты должны быть извлечены и проданы или утилизированы как отходы. Утилизация отходов может оказать значительное влияние на рентабельность этих процессов, поскольку необходимое оборудование может быть дорогостоящим, а затраты на утилизацию-высокими.

1.5 Виды реакторов сульфирования

Конструкция реактора в процессе сульфирования должна соответствовать требованиям в зависимости от получения целевого продукта.

Следует принимать во внимание при выборе реактора, что процесс сульфирования является быстрой реакцией [14, 15]. Концентрация серного ангидрида в газовой смеси поддерживаются на достаточно низком уровне, также газ должен быстрее приходить в единый контакт с жидким реагентом. В течении проведения реакции должно присутствовать и поддерживаться интенсивное перемешивание.

Реакция сульфирования сопровождается выделением тепла. Теплота реакции составляет около 167 кДж/моль [16]. Для того, чтобы поддерживать оптимальную температуру в реакторе, тепло должно отводиться быстро для предотвращения локальных перегревов.

Основным аппаратом для сульфирования является сульфаторатор.

1.5.1 Реактор смешения

Реакторы смешения в процессе сульфирования использовались ранее [16].

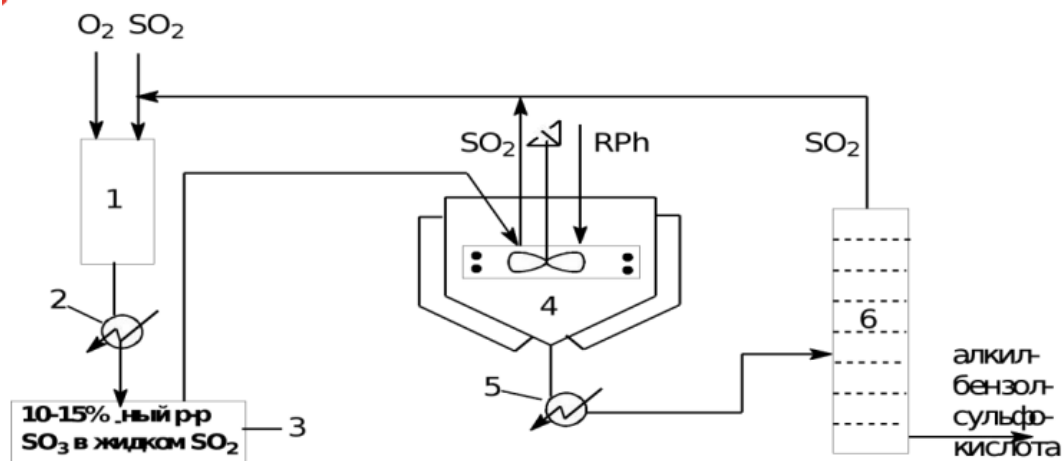


Рисунок 4 – Получение ЛАБСК с использованием реактора смешения

1 – блок окисления; 2 – холодильник; 3 – сборник; 4 – реактор; 5 – вакуумный испаритель; 6 – сборник

В блоке 1 происходит частичное окисление кислородом сернистого ангидрида в серный. Окисленный продукт проходя через холодильник 2 собирается в сборнике 3 раствор SO_3 в жидком SO_2 . Раствор и линейный алкилбензол направляется в центр тарелки реактора.

Реактор имеет вид сосуда, который охлаждается через рубашку. Внутри расположена тарелка с бортиками, мешалка и охлаждающий змеевик.

Часть прореагировавшей смеси через бортик тарелки стекает на охлаждаемую стенку корпуса аппарата. Здесь в падающей тонкой пленке жидкости реакция завершается, и большая часть SO_2 удаляется через верх реактора. Жидкость, выходящая из нижней части реактора, еще содержит 5-7% SO_2 , и для удаления сернистого ангидрида ее подогревают и направляют в вакуумный испаритель 5, после чего она стекает в сборник 6 и поступает на дальнейшую переработку. Газообразный SO_2 возвращается в блок окисления.

Реакторы данного типа широко использовали в США, но сейчас практически уже не встречаются.

1.5.2 Многотрубчатый пленочный сульфуратор Ballestra

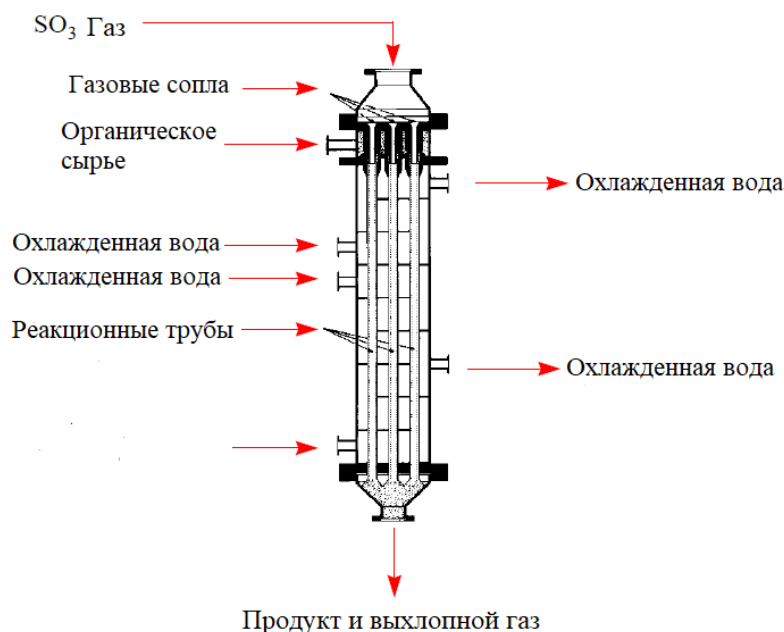


Рисунок 5 – Многотрубчатый пленочный сульфуратор Ballestra [3]

Реактора представленный на рисунке 5 состоит из вертикальных реакционных труб, расположенных как в кожухотрубчатом теплообменнике, и газовых сопел. Пропускная способность одной трубы составляет 40 кг/ч ЛАБСК, и скорость подачи газа - 30 м/с [17,18].

Мощность многотрубчатого сульфуратора зависит от количества труб. Чем больше труб, тем больше мощность реактора. Отличием обычного

пленочного от многотрубчатого реактора является то, что многотрубчатый реактор состоит из 144 труб, а пленочный одну трубу [16].

Варьированием массового расхода ЛАБ и SO_3 можно регулировать условия сульфирования в реакторе. Также можно изменять температуру охлаждающей жидкости и мольное соотношение SO_3 к ЛАБ. Также нельзя допускать пересульфирования для предотвращения высокого выхода побочного продукта [17].

Выхлопные газы, выходящие из системы сульфирования, практически не содержат остаточного SO_3 , но содержат любой необратимый газ SO_2 и унесенные твердые частицы анионных материалов (кислые туманы сульфонной и серной кислот). Этот газовый поток не подходит для прямого выброса в атмосферу. Поэтому необходима система очистки (Рисунок 6), состоящая из электрофильтра для сбора твердых частиц тумана, и упакованный башенный скруббер для поглощения газа SO_2 в разбавленном каустике.

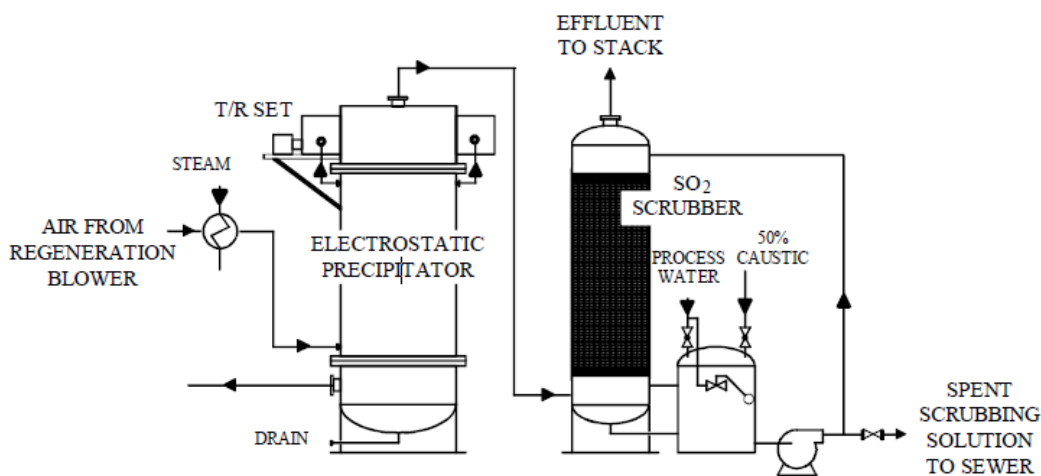


Рисунок 6 – Система очистки сточных газов [3]

1.5.3 Кольцевой пленочный реактор Chemithon

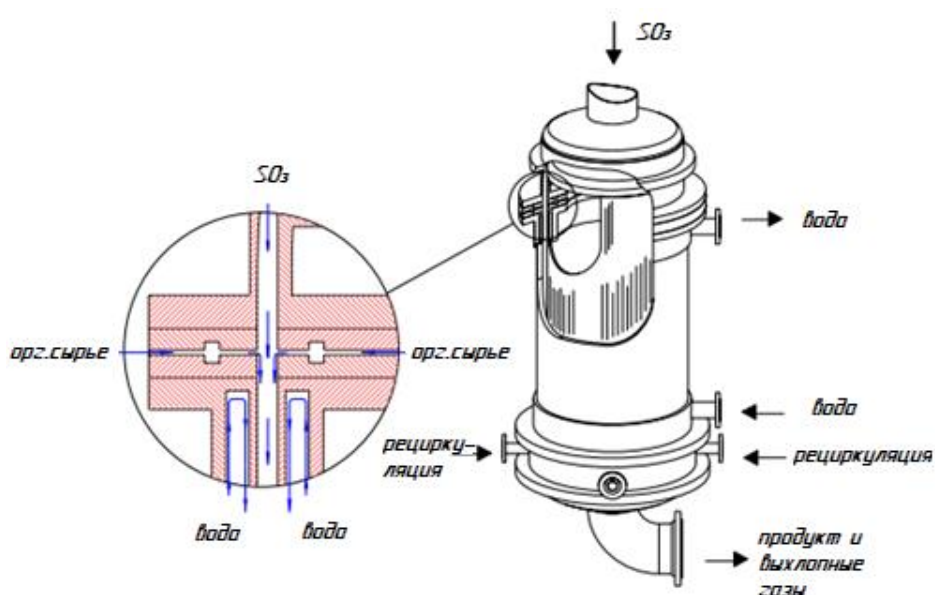


Рисунок 7 - Кольцевой пленочный реактор Chemithon [3]

На рисунке 7 показан кольцевой пленочный реактор Chemithon. Этот запатентованный реактор [3] уникален во многих отношениях.

В нем используются сменные, откалиброванные на заводе органические дозирующие фланцы. Эти фланцы гарантируют, что поток органического вещества в любые две точки на реакционной поверхности будет одинаковым в пределах $\pm 1\%$. В сочетании с геометрической конструкцией реактора, которая аналогичным образом управляет потоком SO_3 к реакционным поверхностям, эти особенности гарантируют, что контроль мольного соотношения поддерживается в микромасштабе по всему сульфатору. Охлаждение рубашки на реакторе отводят большую часть тепла реакции. Кроме того, запатентованная система рециркуляции позволяет реактору преодолевать увеличение вязкости сульфоновой кислоты по мере увеличения ее уровня сульфирования.

Продукт, выходящий из реактора, мгновенно охлаждается путем удаления кислоты, прокачки ее через теплообменник для охлаждения, а затем возврата в нижнюю часть реактора. Этот процесс охлаждения сокращает время выдержки сульфоновой кислоты при повышенной температуре и приводит к повышению качества продукта. А побочным преимуществом является то, что

реактор более компактен – менее двух метров в высоту – и, следовательно, значительно дешевле в установке.

1.5.4 Пленочный реактор цилиндрического типа

Пленочный реактор цилиндрического типа разработан фирмой «Chemiton» [19].

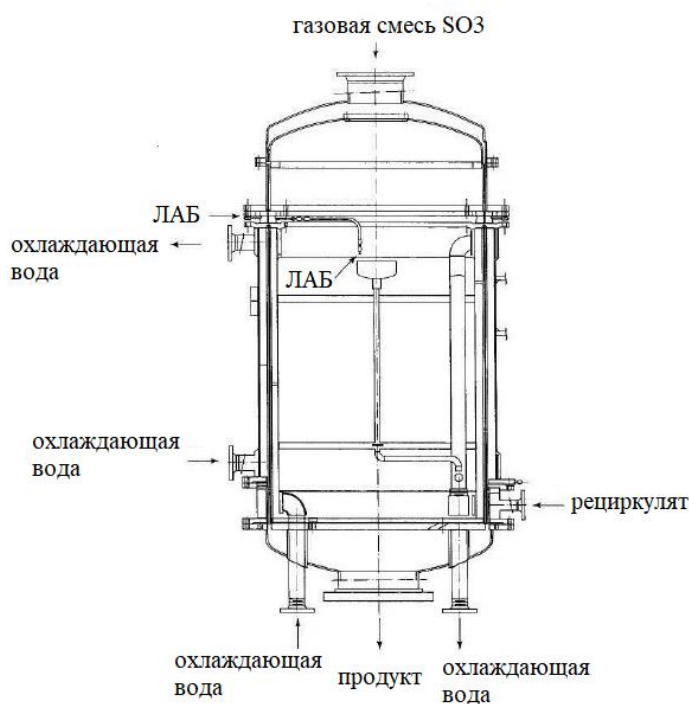


Рисунок 8– Цилиндрический пленочный реактор [19, 20]

Конструкция реактора (Рисунок 8) состоит из двух расположенных одним за другим цилиндров. Кольцевое пространство между этими цилиндрами является реакционным пространством [19].

С помощью насоса в наружный цилиндр распределительной камеры подается 50% ЛАБ и 50% во внутренний цилиндр распределительной камеры. ЛАБ из этих камер попадает через зазоры в реакционное пространство. Тонкой пленкой по внутренней стенке наружного цилиндра и внешней стенке внутреннего цилиндра стекает ЛАБ.

SO_3 подается с верха аппарата и поступает в реакционное пространство, где сразу происходит сульфирование. В нижнюю часть пленочного реактора стекает образующийся продукт - ЛАБСК.

Тепло, которое образуется при протекании реакции отводится охлаждающей водой, и циркулирующей через рубашки на каждом цилиндре снизу-вверх [19, 20].

Охлаждающая вода должна быть не ниже 30°C, так как при температуре ниже 28°C стенки сильно охлаждаются, увеличивается вязкость реакционной массы что приведет к несоответствию требованию продукт [19].

1.6 Математическая модель процесса сульфирования ароматических углеводородов

Рассмотрим эскиз реактора с падающей пленкой, представленная на рисунке 9 [21].

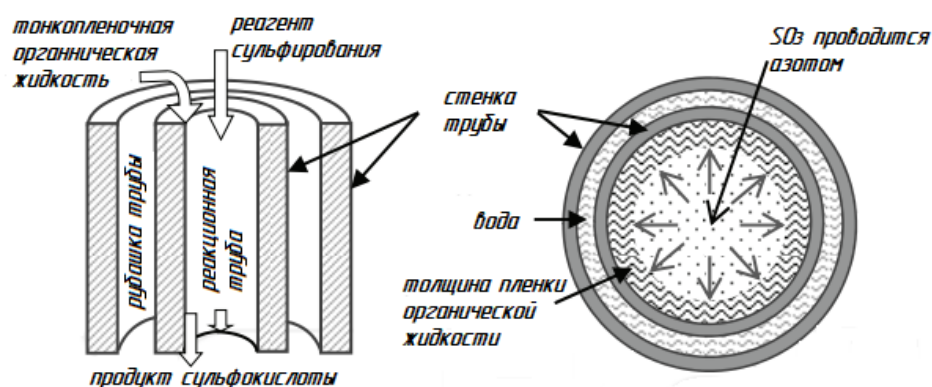


Рисунок 9 – Эскиз реактора с падающей пленкой [21]

Простейшую конфигурацию падающей пленки реактора можно описать как две концентрические трубы, расположенные вертикально.

Органическое вещество образует тонкую пленку, покрывающую внутреннюю стенку внутренней трубки. Пленка спускается с верхней части реактора в ламинарном потоке, образуя кольцевое пространство, внутри которого поток газа течет в турбулентном режиме. В первой реакционной секции концентрированный сульфонатный реагент вступает в контакт со свежим органическим веществом. Скорость реакции высока так же, как и количество тепла (150-170 кДж/моль). Поток охлаждающей жидкости течет по внешней стенке внутренней трубы параллельно потокам реагентов. По мере продвижения реакции вязкость жидкой фазы увеличивается (примерно в 100 раз). Истощение

реагентов снижает скорость реакции, а увеличение вязкости замедляет процесс массообмена в пленке. В этот момент теплоноситель с параллельным потоком, который уже удалил огромное количество тепла из первой зоны реактора, работает как нагревательный ток, который контролирует вязкость пленки.

Эффективность процесса сульфирования определяет состав ЛАБСК и качество СМС. Поэтому необходимо поддержание оптимальных условий. Трудность оптимизации заключается в многофакторной технологии и взаимном влиянии процессов получения ЛАБСК. Это можно успешно решить с помощью использования методов математического моделирования и разработанных систем компьютерного моделирования, которые принимают изменения в большом числе контрольных параметров.

В 2012 году Фостер Н.С. (Колумбия) разработал математическую модель реактора сульфирования, где важными являются: влияние межфазного сопротивления на границе раздела газ-жидкость, а также тепло- и массоперенос [21]. Модель учитывает варьирование физических свойств с изменением температуры, и прогнозирует изменение температуры на границе раздела газ-жидкость в осевом направлении и средней толщине жидкой пленки вдоль длины реактора. Прогнозирование изменения температуры необходима для контроля качества продукта в связи с тем, что для сильно экзотермических реакций при определенных условиях может привести к ухудшению продукта [21].

Уравнения, описанные ниже, учитывают массо и теплопередачи. При разработке этих уравнений рассматривалась турбулентная диффузия для массопереноса в сочетании с химической реакцией, согласно с теорией о теплопередачи.

1.6.1 Массовый баланс процесса сульфирования

В жидкой фазе рассматриваются только три компонента: органическая жидкость, кислый продукт и сульфлирующий реагент, поэтому для определения профилей концентрации достаточно двух микроскопических балансов (Рисунок 10), где y изменяется от $y = 0$ (на поверхности стенки) до $y = \delta$ (на поверхности

жидкости). Баланс массы включает граничные условия на границе раздела твердая стенка и жидкость/газ.

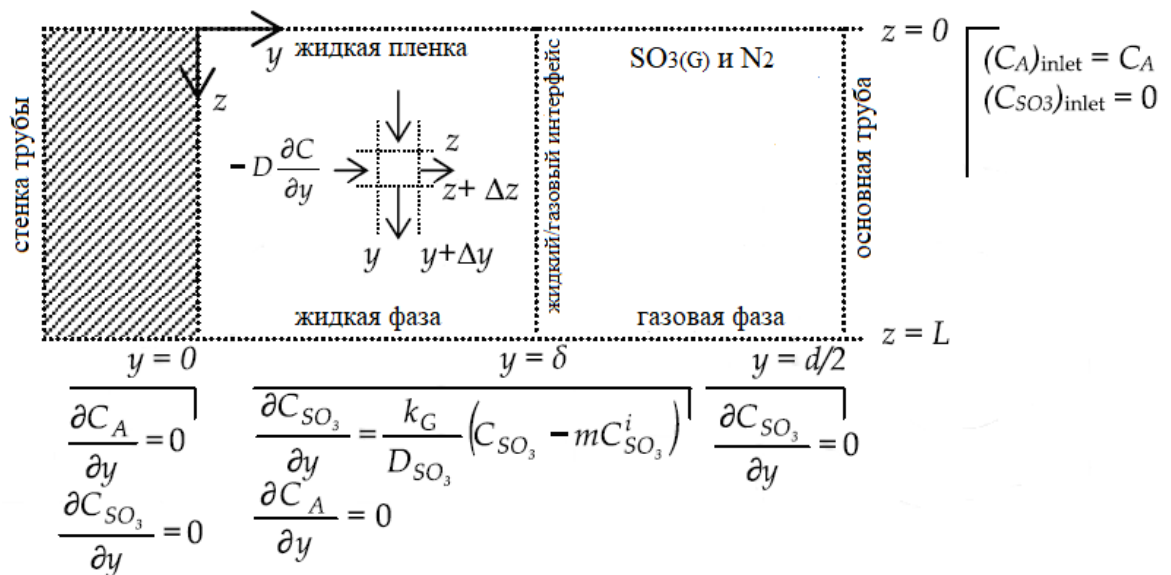


Рисунок 10 – Массовый баланс сульфирования [21]

Предполагается, что массовый баланс для $SO_{3(G)}$, поглощаемого жидкостью (уравнение 1), также может быть применен к реагенту в жидкой фазе, где происходит реакция, тогда уравнение 2 является установившимся массовым балансом для поглощающего вида А в жидкой фазе [21].

$$v_z \frac{\partial C_{SO_3}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_{SO_3} + D_T) \frac{\partial C_{SO_3}}{\partial y} \right] - r \quad \delta \leq y \leq \frac{d}{2} \quad (1)$$

$$v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_A + D_T) \frac{\partial C_A}{\partial y} \right] - r \quad 0 \leq y \leq \delta \quad (2)$$

где z – осевая координата; v_z – осевая скорость пленки жидкости, м/с; C_A, C_{SO_3} – концентрации поглощающего вида и серного ангидрида, соответственно, кмоль/м³; y – поперечная координата (от стенки к свободной поверхности жидкости); D_{SO_3}, D_T, D_A – коэффициент диффузии серного ангидрида, турбулента, поглощающего вида А, соответственно, м²/с; r – скорость реакции; δ – толщина пленки, м; d – диаметр реактора, м.

1.6.2 Тепловой баланс процесса сульфирования

Так как реакция сульфирования экзотермическая, то могут выделяться, граничные условия, показанные на рисунке 11, применимы для теплового баланса.

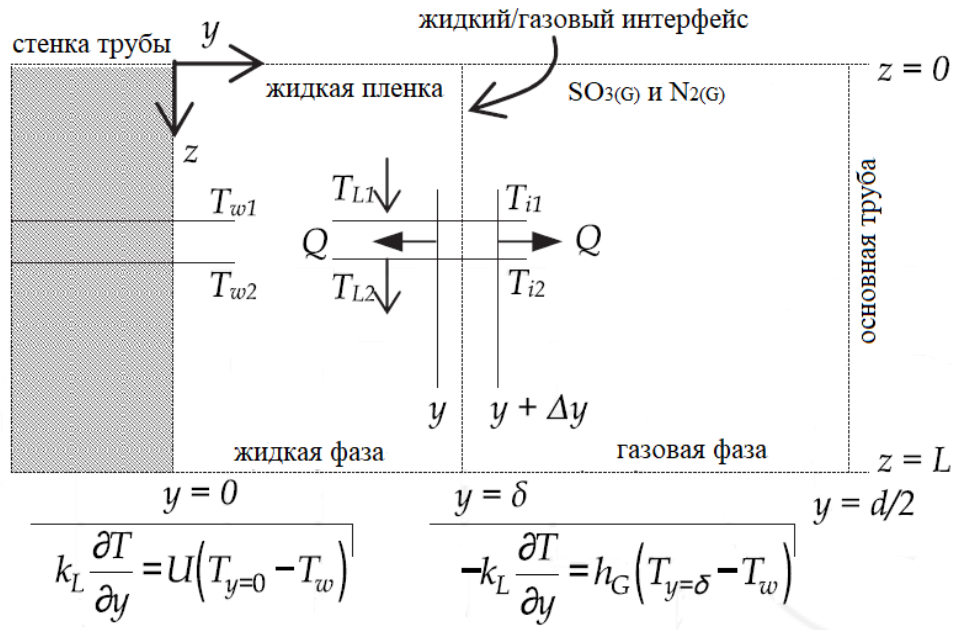


Рисунок 11 – Тепловой баланс сульфирования [21]

$$v_z \frac{\partial \rho c T}{\partial z} = - \frac{\partial}{\partial y} \left[-k_L \frac{\partial T}{\partial y} \right] + (\Delta H)r \quad (3)$$

где v_z - осевая скорость пленки жидкости, м/с; ρ - плотность жидкости, кг/м³; c - теплоемкость, Дж/(кмоль·К); T - температура, К; z - осевая координата; y - поперечная координата (от стенки к свободной поверхности жидкости); k_L - константа скорости реакции, м³/кмоль·с; ΔH - энтальпия реакции, Дж/кмоль; r - скорость реакции;

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{k_w \frac{d_{lm}}{d_{вн}}} + \frac{1}{h_w \frac{d_{вн}}{d_{вну}}} \quad (4)$$

где U - коэффициент теплопередачи, Дж/(м²·с·К); k_w - теплопроводность, Дж/м·с·К; d_{lm} - диаметр логарифмической средней, м; $d_{вн}$ - внешний диаметр, м; $d_{вну}$ - внутренний диаметр, м; h_w - коэффициент теплопередачи стены, Дж/(м²·с·К).

Уравнения переноса тепла следуют аналогии Прандтля и эквивалентны уравнениям, используемым для массопереноса.

$$\frac{h_G}{u} = 0,85c^{-0,704} \quad (5)$$

где h_G - коэффициент теплопередачи газовой фазы, Дж/(м²·с·К); u - характерная скорость турбулентности газа, м/с; c - тепловая мощность, Дж/(кмоль·К).

2 Объект и методы исследования

2.1 Химизм процесса сульфирования ароматическими углеводородами

Реакция сульфирования ароматических соединений принадлежит к процессам электрофильного замещения в ароматическом кольце [22].

Получение ЛАБСК заключается в сульфировании ЛАБ серным ангидридом (Рисунок 13).

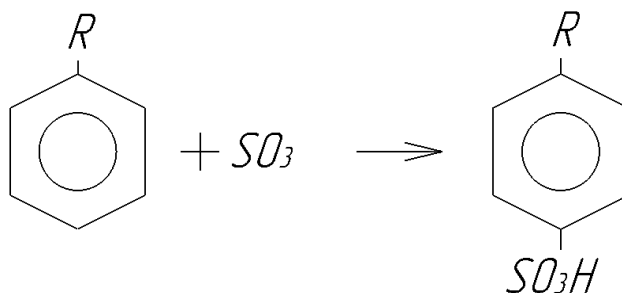
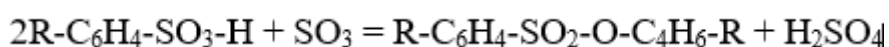
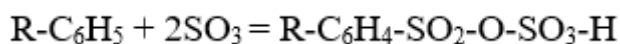


Рисунок 13 – Реакция сульфирования ароматических углеводородов

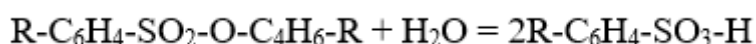
В процессе реакции сульфирования образуется ангидрид сульфоновой кислоты:



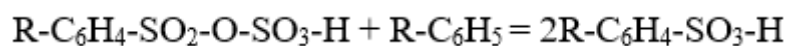
и пиросульфоновая кислота:



Ангидрид сульфоновой кислоты гидролизуется водой по следующей реакции образованием ЛАБСК:



А пиросульфоновая кислота реагирует с остаточным ЛАБ:



Также помимо основной реакции образуются и побочные реакции с образованием сульфонов.

2.1.1 Механизм процесса сульфирования ароматических углеводородов

Реакция сульфирования начинается с реакции взаимодействия триоксида серы с ЛАБ в результате которой образуется ЛАБСК и промежуточные

соединения (рисунок 13). На этом этапе пиросульфоновая кислота реагирует с ЛАБ для получения 2-х моль эквивалентной ЛАБСК (рисунок 14).

Побочной реакцией процесса является образование сульфонов при взаимодействии ангидрида сульфоновой кислоты и H_2SO_4 .

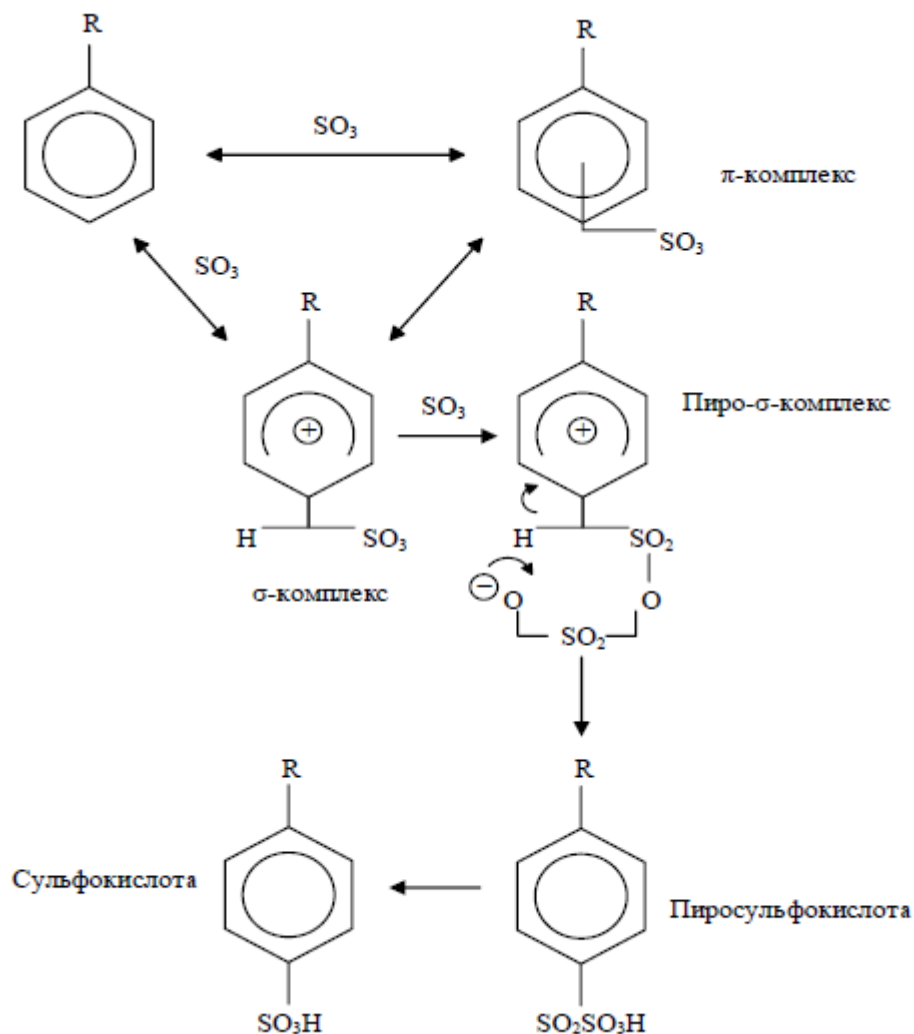


Рисунок 14 – Механизм реакции взаимодействия ЛАБ с SO_3 [23]

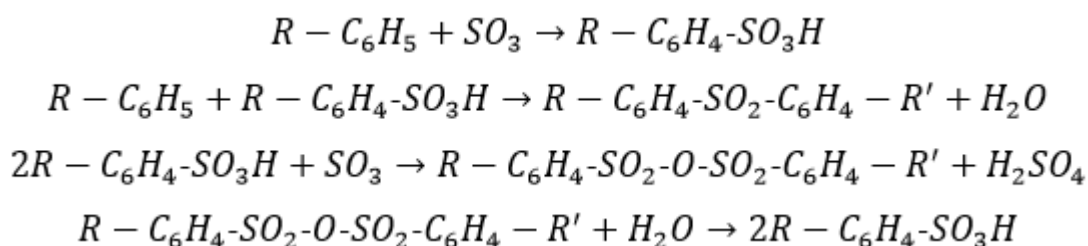
Промежуточные продукты пиросульфоновая кислота и ангидрид сульфоновой кислоты вступают в реакцию с ЛАБ или водой для получения целевого продукта – сульфоновой кислоты [24].

2.2 Принципиальная технологическая схема процесса сульфирования ароматическими углеводородами

3 Экспериментальная часть

3.1 Влияние основных параметров на процесс сульфирования ароматических углеводородов

В математической модели процесса сульфирования ЛАБ учитываются реакции:



3.1.1 Влияние расхода линейного алкилбензола

3.1.2 Влияние температуры на входе в реактор

3.1.3 Влияние соотношения балласт\сырье

3.2 Оптимизация процесса сульфирования ароматических углеводородов

Оптимизация процесса сульфирования ароматических углеводородов проведены с помощью генетического алгоритма и ручным способом.

3.2.1 Оптимизация процесса сульфирования ароматических углеводородов методом генетического алгоритма

Генетический алгоритм (ГА) – это алгоритм поиска, используемый для решения задач оптимизации и моделирования путем случайного подбора, комбинирования и вариации искомых параметров с использованием механизмов, аналогичных естественному отбору в природе.

Алгоритм начинается с создания случайным образом набор решений (начальная популяция). Далее находит среди нескольких решений наиболее подходящие, производит изменения и получает новые. Из этих решений худшие отбрасывает, а лучшие отбирает, то есть проводит селекцию. И лучшие на

следующем шаге будут давать наиболее лучшие решения до тех пор, пока не удовлетворят условиям задачи (эволюционируют) [25].

Для функции приспособленности $W(x)$ в пространстве поиска X требуется найти $x^* = \operatorname{argmax} W(x); x \in X$ (или $x^* = \operatorname{argmin} W(x); x \in X$).

ГА описывается следующим образом:

1. Случайным образом генерируется конечный набор пробных решений: $P^1 = \{P_1^1 \dots P_n^1\}, P_i^1 \in X$ (первое поколение, n - размер популяции).
2. Оценка приспособленности текущего поколения: $F^k = \{f_1^k \dots f_n^k\}, f_i^k = W(p_i^k)$.
3. Выход, если выполняется критерий останова, иначе
4. Генерация нового поколения посредством операторов селекции S , скрещивания C и мутаций M : $p^{k+1} = M \cdot C \cdot S(P^k; F^k$ и переход к пункту 2.

Оценка приспособленности в основном проводится в 2-е стадии:

1. Оценка: $F^k = \{f_1^k \dots f_n^k\}, f_i^k = W(p_i^k)$.
2. Дополнительные преобразования. Например, ею может быть нормировка к виду $F^{k'} = \{f_1^{k'} \dots f_n^{k'}\}, f_i^{k'} = (f_i^k - f_0)/(f_1 - f_0)$, где f_1 и f_0 , соответственно лучший и худший показатели в текущей популяции [25].

Генетический алгоритм выполняется операторами:

1. Оператор отбора (селекции) – это операция, которая выполняется над популяцией. Происходит выбор пар особей, которые называются родителями. Отбор происходит на основании пригодности хромосом для образования потомков.

2. Оператор скрещивания – это скрещивание двух лучших особей.

Происходит скрещивание родителей. Случайным образом находится точка разрыва хромосом, обе хромосомы делятся и обмениваются. В результате получают две новые хромосомы, которые являются потомками [26, 27].

3. Оператор мутаций – происходит случайное изменение ген в хромосоме.

4. Оператор редукции – уничтожение худших особей [28].

На рисунке 24 представлена схема генетического алгоритма.

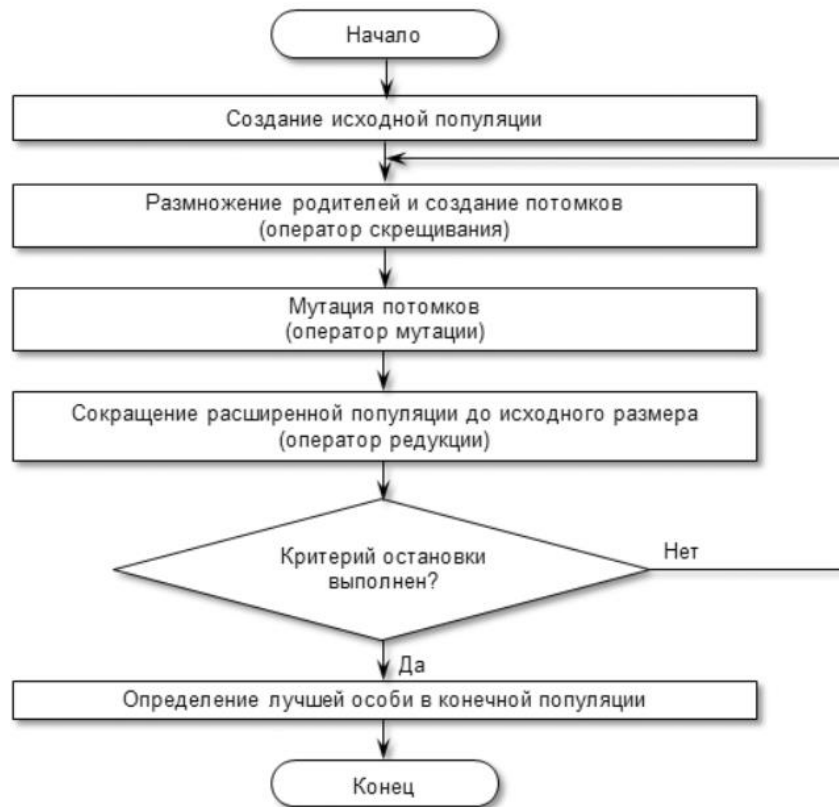


Рисунок 24- Блок-схема ГА

Критерии остановки работы ГА:

- Особи стали подобными;
- Окончание времени, которое было предоставлено на эволюцию;
- достижение популяции требуемого качества.

Достоинства ГА:

- Просты в реализации;
- Предоставляет не просто решение, а хорошее решение;
- Высокая скорость и эффективность определения;
- Задействовано большое количество параметров.

3.2.2 Оптимизация процесса сульфирования ароматических углеводородов методом ручного подбора

3.3 Разработка математической модели окисления сернистого ангидрида

3.3.1 Варьирование параметров процесса окисления сернистого ангидрида

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

В настоящее время перспективность научного исследования определяется не столько масштабом открытия, оценить которое на первых этапах жизненного цикла высокотехнологического и ресурсоэффективного продукта бывает достаточно трудно, сколько коммерческой ценностью разработки. Оценка коммерческой ценности разработки является необходимым условием при поиске источников финансирования для проведения научного исследования и коммерциализации его результатов.

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение перспективности и успешности научно-технического исследования, оценка его эффективности, уровня возможных рисков, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации.

Для достижения обозначенной цели необходимо решить следующие задачи:

- организовать работы по научному исследованию;
- осуществить планирование этапов выполнения исследования;
- оценить коммерческий потенциал и перспективность проведения научного исследования;
- рассчитать бюджет проводимого научно-технического исследования;
- произвести оценку социальной и экономической эффективности исследования.

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Нефтяная промышленность является одной из важнейших в экономике России.

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование. В данном проекте

сегментами рынка являются: нефтехимические компании; научно-исследовательские организации или университеты; граждане.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

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

Такой анализ необходимо проводить периодически, так как рынки находятся в постоянном движении. Анализ помогает вносить изменения в научное исследование, чтобы успешно противостоять своим соперникам. Главное реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

B_{ϕ} – Продукт проведенной исследовательской работы;

B_{k1} – «Ивановский химзавод»;

B_{k2} – «Норкем».

Таблица 7 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		B_{ϕ}	B_{k1}	B_{k2}	K_{ϕ}	K_{k1}	K_{k2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Повышение производительности труда пользователя	0,2	5	5	4	1,0	1,0	0,8
2. Удобство в эксплуатации	0,15	4	4	4	0,6	0,6	0,6
3. Энергоэкономичность	0,08	5	4	4	0,4	0,32	0,32
4. Безопасность	0,15	4	4	4	0,6	0,6	0,6
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,12	5	4	4	0,6	0,48	0,48
2. Цена	0,18	5	3	4	0,9	0,54	0,72
3. Финансирование научной разработки	0,12	3	5	5	0,36	0,6	0,6
Итого	1	31	29	29	4,49	4,14	4,12

Вес показателей в сумме должны составлять 1. Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i$$

где, K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента; B_i – вес показателя (в долях единицы); B_i – балл i -го показателя.

Основываясь на проведенном анализе, можно сказать что данная разработка является конкурентноспособной, высокая производительность и и энергоёмкость процесса при сравнительно небольших затратах, гарантирует спрос на данную продукцию.

4.1.3 SWOT-анализ

SWOT – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта (таблица 8). Применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта. Анализ проводится в 3 этапа.

Первый этап заключается в описании сильных и слабых сторон проекта, в выявлении возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде.

Таблица 8 – Матрица SWOT-анализа

<p>Сильные стороны С1. Низкая цена проекта С2. Отсутствие подобного исследования на территории области С3. Высокая точность результатов С4. Распространённость и доступность объектов исследования С5. Удобный интерфейс ввода и вывода данных</p>	<p>Слабые стороны Сл1. Низкая скорость расчета Сл2. Погрешность методов анализа</p>
<p>Возможности В1. Вовлечение в разработку новых исследований, которые расширят возможности модели (программы) В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт</p>	<p>Угрозы У1. Развитие конкуренции У2. Отсутствие спроса на новые технологии производства</p>

Второй этап состоит в выявлении соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды.

Интерактивная матрица проекта представлена в таблице 9. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-».

Таблица 9 – Интерактивная матрица проекта

		Сильные стороны проекта				
Возможности проекта		C1.	C2.	C3.	C4.	C5.
	B1.	-	+	+	+	+
	B2.	+	-	+	+	+
		Слабые стороны проекта				
Возможности проекта		Сл1.		Сл2.		
	B1.	+		+		
	B2.	-		0		
		Сильные стороны проекта				
Угрозы		C1.	C2.	C3.	C4.	C5.
	У1.	+	-	+	+	0
	У2.	-	+	+	-	-
		Слабые стороны проекта				
Угрозы		Сл1.		Сл2.		
	У1.	-		-		
	У2.	+		0		

В рамках *третьего этапа* должна быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа (таблица 10).

Таблица 10 – SWOT-анализ

	Сильные стороны	Слабые стороны
	C1. Низкая цена проекта C2. Отсутствие подобного исследования на территории области C3. Высокая точность результатов C4. Распространённость и доступность объектов исследования C5. Удобный интерфейс ввода и вывода данных	Сл1. Низкая скорость расчета Сл2. Погрешность методов анализа
Возможности В1. Вовлечение в разработку новых исследований, которые расширят возможности модели (программы)	1. Восприимчивость модели к технологическим изменениям процесса. 2. Невысокие затраты могут привлечь	1. Применение современных методов решения математических уравнений.

В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт	значительное количество исполнителей.	2. Увеличение количества вводимых параметров в модель.
Угрозы У1. Развитие конкуренции У2. Отсутствие спроса на новые технологии производства	1.Создание конкурирующей готовой продукции. 2.Стандартизация и сертификация продукта.	1. Усовершенствование программы для увеличения спроса на продукт. 2.Создание конкурирующей готовой продукции.

4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На какой бы стадии жизненного цикла не находилась научная разработка полезно оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Для этого заполнена специальную форму, содержащая показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта (таблица 11).

При проведении анализа по таблице, по каждому показателю ставится оценка по пятибалльной шкале. При оценке степени проработанности научного проекта 1 балл означает не проработанность проекта, 2 балла – слабую проработанность, 3 балла – выполнено, но в качестве не уверен, 4 балла – выполнено качественно, 5 баллов – имеется положительное заключение независимого эксперта. Для оценки уровня имеющихся знаний у разработчика система баллов принимает следующий вид: 1 означает не знаком или мало знаю, 2 – в объеме теоретических знаний, 3 – знаю теорию и практические примеры применения, 4 – знаю теорию и самостоятельно выполняю, 5 – знаю теорию, выполняю и могу консультировать.

Таблица 11 – Оценка 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	4	4
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	3
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	4
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	5
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	4	4
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	3
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	2	2
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	3
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	5	4
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	4
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
	ИТОГО БАЛЛОВ	63	58

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 -му показателю.

Значение $B_{\text{сум}}$ позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. В итоге получилось, что разработка является перспективной, а уровень имеющихся знаний у разработчика выше среднего.

По результатам оценки выделяются слабые стороны исследования, дальнейшего улучшения необходимо провести маркетинговые исследования рынков сбыта, разработать бизнес-план коммерциализации научной разработки проработать вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок.

4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

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

Инжиниринг будет предполагать предоставление на основе договора инжиниринга одной стороной, именуемой консультантом, другой стороне, именуемой заказчиком, комплекса или отдельных видов инженерно-технических услуг, связанных с проектированием, строительством и вводом объекта в эксплуатацию, с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика.

Такой выбор связан с тем, что исследование проводится на основе экспериментальных данных, взятых с конкретного предприятия. Поэтому разработка является актуальной лишь для одного определенного предприятия, что связано с различными условиями проведения процесса.

4.2 Инициация проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы существующего. В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в Уставе проекта (таблица 12).

Таблица 12 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Национальный исследовательский Томский политехнический университет	Выпуск высококвалифицированных специалистов
Нефтехимические предприятия	Разработка рекомендаций по ограничению содержания примесей в сырье, ухудшающих выход и качество

В таблице 13 представлена иерархия целей проекта и критерии достижения целей.

Таблица 13 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Разработка математической модели для оптимизации процесса сульфирования линейного алкилбензола
Ожидаемые результаты проекта:	Повышение эффективности процесса на стадии сульфирования ЛАБ, путем разработки рекомендаций по регулировки технологических параметров.
Критерии приемки результата проекта:	Соответствие качества ЛАБСК технологическому регламенту и ТУ 2414-028-0576648-2006
Требования к результату проекта:	Требование:
	Выход основного вещества не менее 96%
	Температура процесса не более 60°C
	Общий расход сырья не более 2000 кг\ч

В таблице 14 представлена организационная структура проекта (роль каждого участника, их функции, трудозатраты).

Таблица 14 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудовые затраты, час.
1.	Долганов И.М., к.т.н., доцент ОХИ ИШПР ТПУ	Руководитель проекта	Отвечает за реализацию проекта в пределах заданных ограничений по ресурсам, координирует деятельность участников	105
2.	Хроян Л.А., магистрант ОГ ИШПР	Исполнитель по проекту	Выполнение работ по проекту	1455
ИТОГО:				1510

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» – параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованными в рамках данного проекта (таблица 15).

Таблица 15 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	1312467,1
3.1.1. Источник финансирования	НИ ТПУ
3.2. Сроки проекта:	Сентябрь 2020-Май 2022
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	10.09.2020
3.2.2. Дата завершения проекта	Май 2022

4.3 Планирование управления научно-техническим проектом

Группа процессов планирования состоит из процессов, осуществляемых для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательности действий, требуемых для достижения данных целей.

План управления научным проектом должен включать в себя следующие элементы:

- иерархическая структура работ проекта;
- контрольные события проекта;
- план проекта;
- бюджет научного исследования.

4.3.1 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта (рисунок 31).

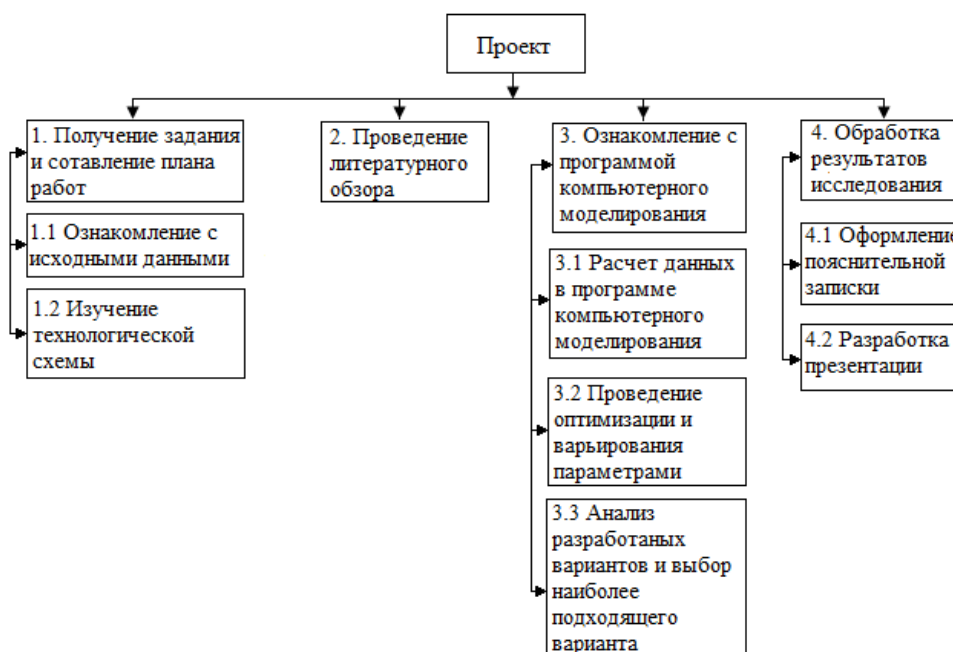


Рисунок 31 – Иерархическая структура работ


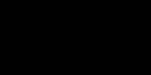





4.3.2 План проект

В рамках планирования научного проекта построены календарный график проекта (таблица 16, 17).

Таблица 16– Календарный план проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Утверждение темы магистерской диссертации	15	01.09.20	15.09.20	Долганов И.М., Хроян Л.А.
Согласование плана работ	10	16.09.20	25.09.20	Долганов И.М., Хроян Л.А.
Литературный обзор	154	28.09.20	28.02.21	Хроян Л.А.
Обработка полученных данных и обсуждение результатов	300	01.03.21	25.12.21	Долганов И.М., Хроян Л.А.
Написание отчета	156	26.12.21	31.05.22	Хроян Л.А.
Итого:	635			

Таблица 17 – Календарный план график проведения НИОКР по теме

Код работ	Вид работы	Т, дней	Исполнители	01.09.20	16.09.20	28.09.20	01.03.21	26.12.21
				- 15.09.20	- 25.09.20	- 28.02.21	- 25.12.21	- 31.05.22
1	Утверждение темы магистерской диссертации	15	Руководитель Магистрант	 				
2	Согласование плана работ	10	Руководитель Магистрант					
3	Литературный обзор	154	Магистрант					
4	Обработка полученных данных и обсуждение результатов	300	Руководитель Магистрант				 	
5	Написание отчета	156	Магистрант					
i		635						



- Магистрант



- Руководитель

4.4 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты сгруппированы по статьям. В данном исследовании выделены следующие статьи:

1. Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты;
2. Специальное оборудование для научных работ;
3. Заработная плата;
4. Отчисления на социальные нужды;
5. Научные и производственные командировки;
6. Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями;

7. Накладные расходы.

Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов). В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме (таблица 18).

Таблица 18 – Расчет затрат по статье «Сырье и материалы»

Наименование	Ед. измерения	Количество	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Тетрадь	шт	2	45	90
Бумага	пачка	1	250	250
Ручка	шт	2	38	76
Итого по статье				416

В данную статью включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения работ по теме НИР (таблица 19).

Таблица 19 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1	Персональный компьютер	1	39000	39000
2	Программное обеспечение Microsoft Office	1	3990	3990
Итого, руб.:				42999

Расчет основной заработной платы. В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда. Расчет основной заработной платы сводится в таблице 19.

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}$$

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

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

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

где, $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника; $T_{\text{раб}}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.; $Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}$$

где, $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя; $F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Расчет заработной платы научно – производственного и прочего персонала проекта проводили с учетом работы 2-х человек – научного руководителя и исполнителя. Баланс рабочего времени исполнителей представлен в таблице 20.

Таблица 20 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистрант
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней	99	99
- выходные дни	14	14
- праздничные дни		
Потери рабочего времени	24	24
- отпуск	14	14
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	212	212

Месячный должностной оклад работника:

$$З_м = З_б \cdot (k_{пр} + k_д) \cdot k_p$$

где, $З_б$ – базовый оклад, руб.; $k_{пр}$ – премиальный коэффициент (определяется Положением об оплате труда); $k_д$ – коэффициент доплат и надбавок; k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

При расчете заработной платы научно-производственного и прочего персонала проекта учитывались месячные должностные оклады работников, которые рассчитывались по формуле:

$$З_м = З_б \cdot K_p$$

где, $З_б$ – базовый оклад, руб.; K_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Согласно информации сайта Томского политехнического университета, должностной оклад (ППС) доцента кандидата наук в 2022 году без учета РК составил 33664 руб. Расчет основной заработной платы приведен в таблице 21.

Таблица 21 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$З_б$, руб.	$k_{пр}$	$k_д$	k_p	$З_м$, руб.	$З_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$З_{осн}$, руб.
Руководитель	33664,0	1	0,02	1,3	43763,2	2312,0	212	490144,0
Магистрант	1923,0	-	-	1,3	2499,9	122,6	212	25998,0

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала. В данную статью включается сумма выплат, предусмотренных законодательством о труде, например, оплата очередных и дополнительных отпусков; оплата времени, связанного с выполнением государственных и общественных обязанностей; выплата вознаграждения за выслугу лет и т.п. (в среднем – 12 % от суммы основной заработной платы).

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

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

где, $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты;

В таблице 22 приведена форма расчёта основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 22 – Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Магистрант
Основная зарплата	490144,0	25998,0
Дополнительная зарплата	49014,4	2599,8
Зарплата исполнителя	539158,4	28597,8
Итого по статье $C_{\text{зп}}$	567756,2	

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 отчисления во внебюджетные фонды.

На 2014 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. Стипендиальный выплаты студентам, магистрам и аспирантам не облагаются налогом.

Отчисления на социальные нужды составляют:

$$C_{\text{внеб}} = (0,3 \cdot 539158,4) + (28597,8) = 190345,32 \text{руб.}$$

Накладные расходы. Расчет накладных расходов провели по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) = (0,8 \cdot 539158,4) + (0,8 \cdot 28597,8) = 454205$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов принят 0,8.

Таким образом, затраты проекта составляет 1312467,1, которые приведены в таблице 23.

Таблица 23 – Затраты научно-исследовательской работы

Затраты по статьям	Затраты на вид исследования, руб		
	Данное исследование	Аналог 1	Аналог 2
1 Сырье, материалы	416,0	1500	1000
2 Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	42999,0	60000	75000
3 Основная заработная плата	567756,2	657802,3	688454,6
4 Дополнительная заработная плата	56775,6	65780,2	68845,5
5 Отчисления на социальные нужды	190345,32	197340,7	206536,4
6 Накладные расходы	454205,0	526241,8	550763,7
Итого плановая себестоимость	1312467,1	1508665,0	1590600,0

4.4.1 Организационная структура проекта

Данный проект представлен в виде проектной организационной структуры. Проектная организационная структура проекта представлена на рисунке 32.



Рисунок 32 – Проектная структура проекта

4.4.2 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта (таблица 24).

Таблица 24 – План управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
1.	Статус проекта	Исполнитель	Руководителю	Еженедельно (понедельник)
2.	Обмен информацией о текущем состоянии проекта	Исполнитель	Руководителю	Ежемесячно (конец месяца)
3.	Документы и информация по проекту	Исполнитель	Руководителю	Не позже сроков графиков и к. точек
4.	О выполнении контрольной точки	Исполнитель	Руководителю	Не позже дня контрольного события по плану управления

4.4.3 Реестр рисков проекта

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

Информация по возможным рискам сведена в таблицу 25.

Таблица 25 – Реестр рисков

№	Риск	Вероятность наступления	Влияние риска	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Неточность метода анализа	2	5	Низкий	Современное оборудование (компьютер)	Перегрузка компьютера
2	Погрешность расчетов	3	5	Средний	Пересчет, проверка	Не правильный ввод данных
3	Отсутствие интереса к результатам исследования	2	5	Низкий	Привлечение предприятий, публикация результатов	Отсутствие результатов исследования

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

4.5.1 Оценка абсолютной эффективности исследования

В основе проектного подхода к инвестиционной деятельности предприятия лежит принцип денежных потоков. Особенностью является его

прогнозный и долгосрочный характер, поэтому в применяемом подходе к анализу учитываются фактор времени и фактор риска. Для оценки общей экономической эффективности используются следующие основные показатели:

- чистая текущая стоимость (NPV);
- индекс доходности (PI);
- внутренняя ставка доходности (IRR);
- срок окупаемости (DPP).

Чистая текущая стоимость (NPV) – это показатель экономической эффективности инвестиционного проекта, который рассчитывается путём дисконтирования (приведения к текущей стоимости, т.е. на момент инвестирования) ожидаемых денежных потоков (как доходов, так и расходов).

Расчёт NPV осуществляется по следующей формуле:

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{opt}}{(1+i)^t} - I_0$$

где, $ЧДП_{opt}$ – чистые денежные поступления от операционной деятельности; I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году; t – номер шага расчета ($t= 0, 1, 2 \dots n$); n – горизонт расчета; i – ставка дисконтирования (желаемый уровень доходности инвестируемых средств).

Расчёт NPV позволяет судить о целесообразности инвестирования денежных средств. Если $NPV > 0$, то проект оказывается эффективным.

Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 26. При расчете рентабельность проекта составляла 25%, норма амортизации - 10 %.

Таблица 26 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб.	0	1640583,9	1640583,9	1640583,9	1640583,9
2	Итого приток, руб.	0	1640583,9	1640583,9	1640583,9	1640583,9
3	Инвестиционные издержки, руб.	-1312467,1	0	0	0	0
4	Операционные затраты, руб. (35% от бюджета)	0	459363,5	459363,5	459363,5	459363,5
5	Налогооблагаемая прибыль(1-4)	0	1181220,4	1181220,4	1181220,4	1181220,4
6	Налоги 20 %, руб.(5*20%)	0	236244,1	236244,1	236244,1	236244,1
8	Чистая прибыль, руб.(5-6)	0	944976,3	944976,3	944976,3	944976,3
9	Чистый денежный поток (ЧДП), руб.(чистая прибыль+амортизация)	-1312467,1	1076223,0	1076223,0	1076223,0	1076223,0
10	Коэффициент дисконтирования при $i=20\%$ (КД)	1	0,833	0,694	0,579	0,482
11	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб.(9*10)	-1312467,1	896852,5	747377,1	622814,2	519011,9
12	\sum ЧДД, руб		2786055,7			
12	Итого NPV, руб.		1473588,6			

$$NPV=2786055,7-1312467,1=1473588,6 \text{ руб.} > 0$$

Коэффициент дисконтирования рассчитан по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1+i)^t}$$

где: i – ставка дисконтирования, 20 %; (10%)

t – шаг расчета.

Таким образом, чистая текущая стоимость по проекту в целом составляет 1473588,6 рублей, что позволяет судить об его эффективности.

Индекс доходности (PI) – показатель эффективности инвестиции, представляющий собой отношение дисконтированных доходов к размеру инвестиционного капитала.

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_t}{(1+i)^t} / I_0 > 1$$

где, ЧДД - чистый денежный поток, руб.; I_0 – начальный инвестиционный капитал, руб.

Таким образом PI для данного проекта составляет:

$$PI = \frac{2786055,7}{1473588,6} = 1,89$$

Так как $PI > 1$, то проект является эффективным.

Внутренняя ставка доходности (IRR). Значение ставки, при которой обращается в нуль, носит название «внутренней ставки доходности» или IRR. Формальное определение «внутренней ставки доходности» заключается в том, что это та ставка дисконтирования, при которой суммы дисконтированных притоков денежных средств равны сумме дисконтированных оттоков или =0. По разности между IRR и ставкой дисконтирования i можно судить о запасе экономической прочности инвестиционного проекта. Чем ближе IRR к ставке дисконтирования i , тем больше риск от инвестирования в данный проект.

Между чистой текущей стоимостью (NPV) и ставкой дисконтирования (i) существует обратная зависимость. Эта зависимость представлена в таблице 27 и на рисунке 33.

Таблица 27 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

№	Наименование показателя	0	1	2	3	4	NPV, руб.
1	Чистые денежные потоки, руб.	-1312467,1	1076223,0	1076223,0	1076223,0	1076223,0	
2	Коэффициент дисконтирования						
	0,1	1	0,909	0,826	0,751	0,683	
	0,2	1	0,833	0,694	0,579	0,482	
	0,3	1	0,769	0,592	0,455	0,350	
	0,4	1	0,714	0,510	0,364	0,260	
	0,5	1	0,667	0,444	0,295	0,198	
	0,6	1	0,625	0,390	0,244	0,153	
	0,7	1	0,588	0,335	0,203	0,112	
	0,8	1	0,556	0,309	0,171	0,095	
	0,9	1	0,526	0,277	0,146	0,077	
	1	1	0,500	0,250	0,125	0,062	
3	Дисконтированный денежный поток, руб.						
	0,1	-1312467,1	978384,5	889440,5	808582,3	735074,8	2099015,0
	0,2	-1312467,1	896852,5	747377,1	622814,2	519011,9	1473588,6
	0,3	-1312467,1	827863,8	636818,3	489860,3	376815,6	1018890,9
	0,4	-1312467,1	768730,7	549093,4	392209,5	280149,7	677716,2
	0,5	-1312467,1	717482,0	478321,3	318880,9	212587,3	414804,4
	0,6	-1312467,1	672639,4	420399,6	262749,8	164218,6	207540,2
	0,7	-1312467,1	633072,4	372395,5	219056,2	128856,6	40913,5
	0,8	-1312467,1	597901,7	332167,6	184537,6	102520,9	-95339,4
	0,9	-1312467,1	566433,2	298122,7	156906,7	82582,5	-208422,1
	1,0	-1312467,1	538111,5	269055,8	134527,9	67263,9	-303508,0

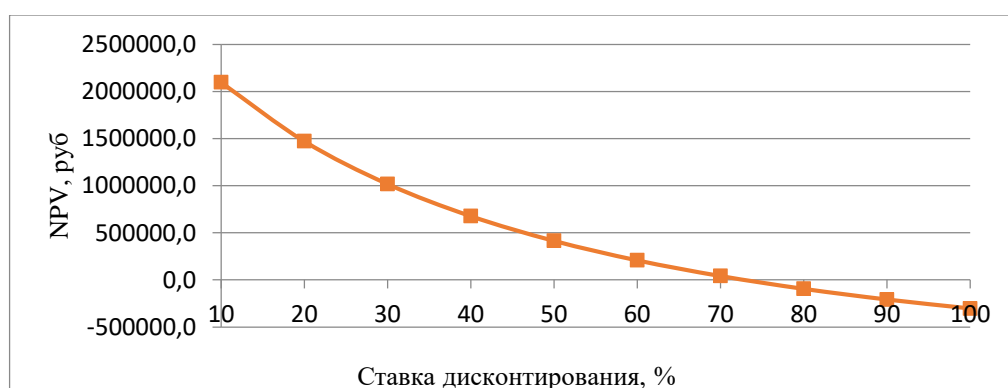


Рисунок 33 – Зависимость NPV от ставки дисконтирования

Из графика следует, что по мере роста ставки дисконтирования чистая текущая стоимость уменьшается, становясь отрицательной. Из графика получаем, что IRR составляет 0,71.

$IRR > i$, проект эффективен.

Запас экономической прочности проекта: $71\% - 20\% = 51\%$

Дисконтированный срок окупаемости. Как отмечалось ранее, одним из недостатков показателя простого срока окупаемости является игнорирование в процессе его расчета разной ценности денег во времени.

Этот недостаток устраняется путем определения дисконтированного срока окупаемости. То есть это время, за которое денежные средства должны совершить оборот.

Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (таблица 28).

Таблица 28 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток ($i = 0,20$), руб.	-1312467,1	896852,5	747377,1	622814,2	519011,9
2	То же нарастающим итогом, руб.	-1312467,1	-415614,6	331762,5	954576,7	1473588,6
3	Дисконтированный срок окупаемости	$DRR_{дск} = 1 + (415614,6 / 747377,1) = 1,6$ года				

Социальная эффективность научного проекта учитывает социально-экономические последствия осуществления научного проекта для общества в целом или отдельных категорий населения или групп лиц, в том числе как непосредственные результаты проекта, так и «внешние» результаты в смежных секторах экономики: социальные, экологические и иные внеэкономические эффекты (таблица 29).

Таблица 29 – Критерии социальной эффективности

ДО	ПОСЛЕ
Отсутствие информации по технологическим показателям для выявления продукта с высоким выходом и лучшим составом.	Получены технологические показатели для получения продукта с высоким выходом и составом.

4.5.2 Оценка сравнительной эффективности исследования

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по следующей формуле:

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

где, $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в разгах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разгах (значение меньше единицы, но больше нуля).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по следующей формуле:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i$$

где, I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки; a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки; b_i^a, b_i^p – балльная оценка i -го варианта исполнения

разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания; n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности в таблице 30.

Таблица 30 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

ПО Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Достоверность исследования	0,19	4	5	4
2. Удобство в эксплуатации	0,2	5	5	4
3. Расходы на проведение работы	0,1	5	4	4
4. Простота применения	0,25	5	4	5
5. Универсальность	0,26	4	3	3
Итого	1	23	21	20

$$I_m^p = 4 \cdot 0,19 + 5 \cdot 0,2 + 5 \cdot 0,1 + 5 \cdot 0,25 + 4 \cdot 0,26 = 4,55$$

$$I_1^A = 5 \cdot 0,19 + 5 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,1 + 4 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,26 = 4,13$$

$$I_2^A = 4 \cdot 0,19 + 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,1 + 5 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,26 = 3,99$$

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

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{ф}^p}; I_{финр}^a = \frac{I_m^a}{I_{ф}^a}$$

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

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^a}$$

где, $\mathcal{E}_{ср}$ – сравнительная эффективность проекта; $I_{финр}^p$ – интегральный показатель разработки; $I_{финр}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Сравнительная эффективность разработки по сравнению с аналогами представлена в таблице 31.

Таблица 31 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,83	0,95	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,55	4,13	3,99
3	Интегральный показатель эффективности	5,48	4,35	3,99
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения		1,26	1,37

Выводы: Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет понять, что разработанный вариант проведения проекта является наиболее эффективным при решении поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

В ходе выполнения раздела финансового менеджмента определена чистая текущая стоимость, (NPV), равная 1473588,6 руб.; индекс доходности $PI=1,89$, внутренняя ставка доходности $IRR=71\%$, срок окупаемости $PP_{дск}=1,6$ года.

Таким образом мы имеем ресурсоэффективный проект с высоким запасом финансовой прочности и коротким сроком окупаемости.

5 Социальная ответственность

Данная дипломная работа посвящена разработке математической модели процесса сульфирования ароматических углеводородов для повышения эффективности процесса. Область применения – нефтеперерабатывающая промышленность.

Объектом исследования является оборудование, рабочее место и помещение, в котором находится работник.

Выполнение работы проводилось в Инженерной школе природных ресурсов Томского Политехнического Университета в отделении химической инженерии в кабинете 133.

Экспериментальная часть магистерской диссертации осуществлялась на персональном компьютере (ПК) при работе с различными программными обеспечениями. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, естественным и искусственным освещением. Также в аудитории находится аптечка первой медицинской помощи, углекислотный огнетушитель для тушения пожара.

Рабочее место в аудитории представляет собой стол, находящимся на нем монитором и системным блоком ЭВМ, и офисный стул, мышь, клавиатура соответствует требованиям [30].

В текущем разделе указаны основные вредные и опасные факторы рабочей зоны, их анализ и способы защиты от них, защита окружающей среды, от чрезвычайной ситуации, а также правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Безопасность труда определяется правилами и нормами поведения за рабочим местом, в особенности режим труда и отдыха по ТООИ Р 45-084-01 «Типовая инструкция по охране труда при работе на персональном компьютере». Согласно документу, моделирование относится к 3-ей группе: творческая работа в режиме диалога с компьютером. Она соответствует III категории тяжести

напряженности работы с компьютером, которые определяются по суммарному времени работы за компьютером за рабочую смену. В таблице 32 представлены категории работ и времени.

Таблица 32 – Категории работ и времени

Категория работы	Уровень нагрузки за рабочую смену при видах работ с компьютером			Суммарное время регламентируемых перерывов, мин	
	Группа А, количество знаков	Группа Б, количество знаков	Группа В, количество знаков	При 8-ми часовой смене	При 12-ти часовой смене
I	До 20000	До 15000	До 2	30	70
II	До 40000	До 30000	До 4	50	90
III	До 60000	До 40000	До 6	70	120

При 8-ми часовой работы за компьютером для III категории работ следует устанавливать перерывы через 1,5-2 часа от начала работы смены и через 1,5-2 часа после обеденного перерыва продолжительностью 20 минут или продолжительностью 15 минут каждый 1 час работы.

При 12-ти часовой работы за компьютером перерывы должны устанавливаться в первые 8 часов работы аналогичны, как и при 8-ми часовой рабочей смены, а последние 4 часа, каждый час продолжительностью 15 минут.

Рабочее место сотрудника регулируется по ГОСТ 12.2.032-78 [31]. Оптимальным является размещение предметов труда и документации следующим образом:

Моноблок со встроенным дисплеем располагается в центральной части зоны 3; клавиатура располагается в зоне 1; мышь располагается в зоне 2; документация, необходимая при работе – в зоне легкой досягаемой ладони – 3, а в выдвижных ящиках стол – литература, неиспользуемая постоянно.

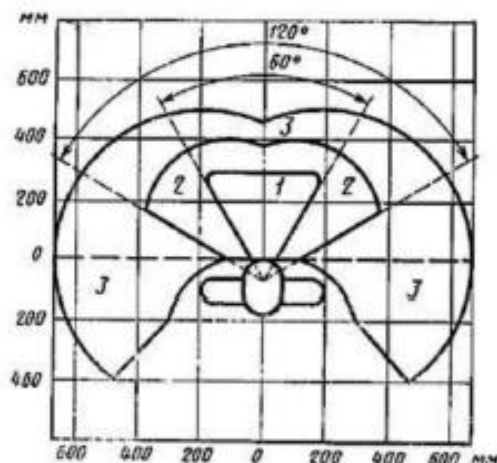


Рисунок 34 – Зоны для выполнения ручных операций и размещения органов управления

1 – зона выполнения ручных операций 1; 2 – зона выполнения ручных операций 2; 3 – зона выполнения ручных операций 3

Конструкция кресла позволяет регулировать положение сидя по вертикали.

При длительной работе за компьютером может происходить большая нагрузка на глаза, шею, плечи и поясницу, что может поспособствовать развитию различным заболеваниям. Также может вызвать уменьшение работоспособности, расстройство нервной системы и быструю утомляемость.

Данный вид работы сопровождается рядом вредных и опасных факторов производства. Эти факторы по ГОСТ 12.003-2015 [32]. Классификация» представлены в таблице 1.

5.2 Производственная безопасность

Производственная безопасность – система организационных мероприятий и технических средств, предотвращающих или уменьшающих вероятность воздействия на работающих опасных травмирующих производственных факторов, возникающих в рабочей зоне в процессе трудовой деятельности.

Вредные и опасные производственные факторы могут возникнуть при разработке математической модели процесса сульфирования ароматических углеводородов.

Так как магистерская работа проводилась в компьютерном классе, проведем анализ опасных и вредных факторов для данного рабочего места.

При работе за персональным компьютером необходимо оценить особенности организации рабочего места, условия производственной среды, а именно освещение, микроклимат, уровень шума и вибрации, электрическое поле.

Перечень опасных и вредных производственных факторов, характерных для проектируемой производственной среды в соответствии ГОСТ 12.003-2015 представлены в таблице 33.

Таблица 33 – Возможные опасные и вредные производственные факторы на рабочем месте

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Нормативные документы
Отклонение показателей микроклимата	СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [33]
Повышенный уровень шума	ГОСТ 12.1.003-2014. Шум. Общие требования безопасности [34]. СН 2.2.4/2.1.8.562-96 Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки [35].
Недостаточная освещенность рабочей зоны	СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95 [36].
Поражение электрическим током	СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы [37]. ГОСТ 12.1.002-84. Электрические поля промышленной частоты [38].
Зрительное перенапряжение	ГОСТ Р ИСО 9355-2-2009. Эргономические требования к проектированию дисплеев и механизмов управления. Часть 2. Дисплеи. [39]
Умственное перенапряжение	СП 2.2.3670-20. Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда [40].

Повышенный уровень электромагнитных излучений	ГОСТ 12.1.006-84. Электромагнитные поля радиочастот [41].
---	---

5.2.1 Отклонение показателей микроклимата

На рабочих местах пользователей ПК должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата в соответствии с СанПиНом 2.2.4.548-96 [33]. Согласно этому документу оптимальные характеристики микроклимата представлены в таблице 34. Эти отклонения появляются вследствие изменения температуры окружающей среды и влажности воздуха.

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 34 – Оптимальные параметры микроклимата

Сезон	Температура воздуха, t, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м\с
Холодный (среднесуточная температура воздуха меньше 10°С)	22-24	60-40	0,1
Теплый (среднесуточная температура воздуха 10°С и выше)	23-25	60-40	0,1

Допустимые микроклиматические условия установлены по критериям допустимого теплового и функционального состояния человека на период 8-ми часовой рабочей смены. Допустимые величины показателей микроклимата устанавливаются, когда по требованиям не могут быть обеспечены оптимальные величины. Данные параметры представлены в таблице 35 для категории работ 1а.

Таблица 35 – Допустимые параметры микроклимата

Сезон	Температура воздуха, t, °С		Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с	
	Ниже оптимальных, не более	Выше оптимальных, не более		Ниже оптимальных, не более	Выше оптимальных, не более
Холодный	20,0-21,9	24,1-25,0	15-75	0,1	0,1
Теплый	21,0-22,9	25,1-28,0	15-75	0,1	0,2

Для уменьшения воздействия отклонений показателей микроклимата необходимо установить кондиционер для снижения температуры и увлажнитель воздуха для поддержания оптимальной влажности. При понижении температуры ниже допустимой необходимо включить обогреватель.

5.2.2 Повышенный уровень шума

В соответствии с СанПиН 2.2.4/2.1.8.562-96 [35] приведен в таблице 36 и 37.

Таблица 36 – Предельно допустимые уровни звукового давления, уровни звука и эквивалентные уровни звука для основных наиболее типичных видов трудовой деятельности

Вид рудовой деятельности, рабочее место	Уровень звукового давления, дБ, в октановых полосах со среднегеометрическими частотами, Гц									Уровни звука и эквивалентные уровни звука, дБА
	31,5	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000	
Творческая деятельность, научная деятельность, программирование, врачебная деятельность	86	71	61	54	49	45	42	40	38	50

Таблица 37 – Допустимые уровни звукового давления, уровни звука, эквивалентные и максимальные уровни звука проникающего шума в помещениях жилых и общественных зданий и шума на территории жилой застройки

Вид трудовой деятельности, рабочее место	Уровень звукового давления, дБ, в октановых полосах со среднегеометрическими частотами, Гц									Уровни звука и эквивалентные уровни звука, дБА	Максимальные уровни звука LAmax, дБА
	31,5	63	125	250	500	1000	2000	4000	8000		
Учебные кабинеты, аудитории учебных заведений	79	63	52	45	39	35	32	30	28	40	5

Рабочее место находится в компьютерных классах, где основными источниками шума являются вычислительные машины и система вентиляции. Исходя из технической документации установленного в помещении оборудования, можно сделать вывод, что шумовая обстановка соответствует норме.

5.2.3 Недостаточная освещенность рабочей зоны

Работа с компьютером предполагает постоянный зрительный контакт дисплеем и занимает 80% от работы времени. Недостаточное освещение рабочего места затрудняет длительную работу, вызывает повышенное утомление и способствует развитию близорукости.

На рабочей поверхности должны отсутствовать резкие тени, которые создают неравномерное распределение поверхностей с различной яркостью в поле зрения.

Существует три вида освещения:

- Естественное (от солнца);
- Искусственное (от искусственного освещения);
- Совмещенное.

При недостатке естественного света нарушаются обмен веществ, поэтому используются газоразрядные источники, близкие по спектру к естественному свету.

Проведем расчет искусственной освещенности горизонтальной рабочей поверхности методом коэффициента светового потока.

Используемые параметры: длина $a = 12$ м, ширина $b = 6$ м, высота $H = 5$ м, высота рабочей поверхности $h_{\text{рп}} = 0,8$ м.

Нормируемая минимальная освещенность при использовании ПК должна быть равна $E_{\text{н}} = 300$ лк.

Исходя из того, что потолок в помещении белый, а также побелены стены и 2 окна без штор примем коэффициент отражения от стен $R_c = 50\%$;

$R_{\text{п}} = 70\%$.

Для искусственного освещения наиболее распространено люминесцентными лампами, так как энергетически более экономичные и обладающие большим сроком службы.

Выберем светильника типа ОД с $\lambda = 1,1-1,3$.

Тогда высота светильника над рабочей поверхности при расстоянии светильников от перекрытия $h_c = 0,5$:

$$h = H - h_c - h_{\text{рп}} = 5 - 0,5 - 0,8 = 3,7 \text{ м}$$

где H – высота помещения, м; h_c – расстояние светильников от перекрытия (свес); $h_{\text{рп}}$ – высота рабочей поверхности, м.

Расстояние между соседними светильниками или рядами определяется по формуле:

$$L = \lambda \cdot h = 1,3 \cdot 3,7 = 4,07 \text{ м}$$

Расстояние от крайнего ряда светильников до стены:

$$\frac{L}{3} = \frac{4,07}{3} = 1,36 \text{ м}$$

Определим количество рядов и количество светильников в ряду:

$$n_{\text{ряд}} = \frac{(b - \frac{2}{3}L)}{L} + 1 = \frac{(6 - \frac{2}{3} \cdot 4,07)}{4,07} + 1 \approx 2$$

Примем $l_{\text{св}} = 1230$ мм

$$n_{\text{св}} = \frac{(a - \frac{2}{3}L)}{l_{\text{св}} + 0,5} + 1 = \frac{(12 - \frac{2}{3} \cdot 4,07)}{1,23 + 0,5} + 1 \approx 7$$

Количество ламп, используемых в помещении:

$$N_{\text{л}} = n_{\text{ряд}} \cdot n_{\text{св}} = 2 \cdot 7 = 14$$

Находим индекс помещения:

$$i = \frac{S}{h(a+b)} = \frac{12 \cdot 6}{3,7(12+6)} = 1,1$$

Коэффициент использования светового потока будет равен:

$$\eta = 0,51$$

Тогда световой поток лампы определяется по формуле:

$$\Phi = \frac{E_{\text{н}} \cdot S \cdot K_{\text{з}} \cdot Z}{N_{\text{л}} \cdot \eta} = \frac{300 \cdot 72 \cdot 1,5 \cdot 1,1}{14 \cdot 0,51} = 4992 \text{ лм}$$

Где $E_{\text{н}}$ – это наименьшее нормируемое значение освещенности для данного помещения; $K_{\text{з}}$ – коэффициент запаса, равный 1,5; Z – коэффициент неравномерности освещения; $N_{\text{л}}$ – количество светильников, установленных в помещении.

Выбираем стандартную лампу ЛБ-80-2 Вт со световым потоком 5200 лм.

Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\% \leq \frac{\Phi_{\text{л.станд}} - \Phi_{\text{л.расч}}}{\Phi_{\text{л.станд}}} \cdot 100\% \leq +20\%$$

Получаем:

$$-10\% \leq 4\% \leq +20\%$$

Мощность осветительной установки:

$$P = N \cdot P_{\text{л}} = 14 \cdot 80 = 1120 \text{ Вт}$$

Таким образом необходимый световой поток светильника типа ОД-80-2 в аудитории 133 второго корпуса ТПУ не выходит за пределы требуемого диапазона.

5.2.4 Поражение электрическим током

Удар электрическим током возможно получить при соприкосновении с токоведущими частями оборудования. В помещении, в котором расположено рабочее место, относится к категории без повышенной опасности и соответствует следующим условиям:

- напряжение питающей сети 220 В, 50 Гц;
- относительная влажность воздуха 50 %;
- средняя температура около 24 °С;

Для снижения вероятности поражения электрическим током ПК должны быть оборудованы защитным занулением; подача электрического тока в помещении должна осуществляться от отдельного независимого источника питания; необходима изоляция токопроводящих частей и ее непрерывный контроль; должны быть предусмотрены защитное отключение.

5.2.5 Зрительное и умственное перенапряжение

Пользователям ПК для предотвращения зрительного и умственного перенапряжения рекомендуется делать перерывы и выполнять специальные гимнастики для глаз.

Частая и продолжительная работа за компьютером может привести к нервно-психическим перегрузкам.

В СП 2.2.3670-20 «Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда» рекомендуются пешие прогулки до и после работы за компьютером 40-50 минут. При трудовой деятельности за ПК требуется после каждого часа устраивать перерывы.

5.2.6 Повышенный уровень электромагнитных излучений

Электромагнитные излучения оказывает негативное влияние на сердечно-сосудистую, нервную и эндокринную систему. Чаще всего мы не ощущаем его влияние, но если электромагнитное излучение достигает

колоссальной мощности, то человек чувствует его как выброс тепла. Чтобы обезопасить людей от данного воздействия разработан СанПиН 2.1.8/2.2.4.1383-03 [42], описывающий допустимые нормы воздействия излучения, требования для его измерения и защиты. Предельно допустимые условия указаны в таблице 38.

Таблица 38 – Предельно допустимые условия электромагнитных полей, создаваемых ПК

Наименование параметров	Частота	ПДУ
Напряженность электрического поля	5 Гц – 2 кГц	25 В/м
	2 кГц – 400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного поля	5 Гц – 2 кГц	250 нТл
	2 кГц – 400 кГц	25 нТл
Напряженность электростатического поля		500 В

Для снижения воздействия электромагнитного излучения применяют следующие меры:

- расстояние от монитора до работника должно составлять не менее 50 см;
- применение экранных защитных фильтров.

5.3 Экологическая безопасность

Наиболее активной формой защиты окружающей среды от вредного воздействия выбросов промышленных предприятий является полный переход к безотходным, малоотходным и энергосберегающим технологиям и производствам.

При выполнении данной за компьютером не осуществляется выброс вредных веществ в атмосферу. Загрязнение атмосферного воздуха может произойти по причине возникновения пожара в помещении за счет дыма и газа.

Загрязнение литосферы могут поспособствовать производственные отходы, как бумажные отходы и неисправные детали персональных компьютеров. Бумажные отходы относятся к 5 классу опасности, то есть

практически неопасные. Макулатура должна быть принята отделом технического контроля предприятия-изготовителя [43]. А неисправные детали компьютера относятся к 4 классу опасности и подлежат специальной утилизации [44].

Важнейшим этапом обращения с отходами является их сбор, переработка, утилизация и захоронение. Также для уменьшения бумажных отходов можно хранить документы на электронных носителях.

Люминесцентные лампы относятся к 1 классу опасности. Для утилизации люминесцентных ламп, вышедшие из строя, должен начинаться с помещения их на хранение в контейнеры в оборудованных под эти нужды помещениях. При накоплении их сортируют, помещают в отдельные ячейки и отправляют в специальную для этого компанию для последующей нейтрализации и переработки [45].

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.

Основную опасность для помещений, оборудованных ПК на территории г. Томска могут также возникнуть пожар, произойти разрушение оборудования, поражение и гибель людей. Поэтому в случае грозových явлений предусмотрена молниезащита. Это система, обеспечивающая перехват молнии и отвод ее в землю, тем самым, защищая здание от повреждения и пожара.

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 сигнализации об эвакуации необходимо: обесточить все электроприборы, находящиеся на рабочем месте и позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 112, сообщить о случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения согласно ГОСТ Р 51057-2001 [47].

Выводы по разделу: В ходе работы по разделу «Социальная ответственность» были рассмотрены правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.

Был выполнен анализ вредных и опасных факторов проектируемого решения, таких как микроклимат, шум, освещение, электрическое излучение, умственное и зрительное перенапряжение. Все эти факторы могут негативно влиять на человека и для уменьшения этого влияния, необходимо использовать средства коллективной и индивидуальной защиты.

Рабочее место, где проводились работы при написании магистерской диссертации, отвечает всем требованиям, предъявленными в области пожарной и производственной безопасности.

Заключение

В результате данной работы проведены исследования по влиянию технологических параметров и видов сырья на конечные показатели продукции. Осуществлены сравнения полученных результатов для разного вида сырья, объяснены зависимости с точки зрения физико-химической сущности процесса.

Проведена оптимизация процесса сульфирования ароматических углеводов для разного типа сырья методом генетического алгоритма и ручным подбором. По двум способам сырье «2» имеют лучшие показатели для данного процесса.

По методу генетического алгоритма:

- Сырье 1 – общий расход 720 кг/ч, температура на выходе после сульфуратора 58,5 °С, степень превращения 71,42%;
- Сырья «2» - общий расход 1325 кг/ч, температура на выходе 59,6 °С, степень превращения после вотатора 100%.
- Сырье 3 – общий расход 759 кг/ч, температура выходная 51,9 °С, степень превращения после вотатора 41,04.

Ручным способом:

- Сырье 1 – общий расход 1950 кг/ч, температура выходная 59,94 °С, степень превращения 100%.
- Сырье 2 - общий расход 1976 кг/ч, температура на выходе 57,92 °С, степень превращения после вотатора 100%.
- Сырье 3 – общий расход 1977 кг/ч, температура на выходе после сульфуратора 59,88 °С, степень превращения 100%.

Также разработана математическая модель процесса окисления сернистого ангидрида, чтобы понимать на сколько полно происходит превращение сернистого ангидрида до серного. Степень превращения составил 98%.

Список литературы

1. Achimate [Электронный ресурс]/ URL: <http://www.acmite.com/market-reports/chemicals/global-surfactant-market.html> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. Дата обращения: 23.02.2021 г.
2. Abbas Hadi. Al-Shukrawi, Wedad H. Al-Dahhan, Ammal Esmaeel Ibrahim. Preparation and Production of High Grade Sulfonic Acid // Chemistry Department, Al-Nahrain University, Baghdad-Iraq – 2016. – P 2206-2211.
3. Norman C. Foster, Ph.D., P.E. Sulfonation and Sulfation Processes // The Chemithon Corporation – 1997. – P 1-36.
4. Потехин В.М., Потехин В.В., Основные теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки: Учебник. – 3-е изд., Издательство «Лань», 2021. – 896 с: – (Учебник для вузов. Специальная литература).
5. Олонцев И.Ф., Ветошкин Ю.С. Тенденция развития производства и рынка СМС и товаров бытовой химии в России в XXI веке. – «Бытовая химия». – 2005. – №20. – 4- с.
6. Хитрюк В.А. Моторные и трансмиссионные масла. Челябинск: издательство ЧГТУ, 1994. С 45
7. Адельсон С.В., Вишнякова Т.П., Паушкин Я.М., Технология нефтехимического синтеза: учеб. для вузов. – 2-е изд., перераб. – М.: Химия, 1985. – 608 с.
8. Русанов А.И. Мицеллообразование в растворах поверхностно-активных веществ: моногр. / Русанов А.И., Щекин А.К. СПб.: Лань, 2016. 612 с.
9. Поверхностно-активные вещества. Справочник / Абрамзон А.А., Бочаров В.В., Гаевой Г.М. и др. Под ред. А.А. Абрамзона и Г.М. Гаевого. Л.: Химия, 1979. 376 с.
10. Ana Carolina Kogawa, Beatriz Gamberini Cernic, Leandro Giovanni Domingos do Couto, Hérica Regina Nunes Salgado Synthetic detergents: 100 years of history // Saudi Pharmaceutical Journal. – 2017. – №25. – P 934-937

11. Дремук А.П. Коллоидно-химические свойства двойных и тройных смесей ПАВ различной природы. дис. на соискании ученой степени, канд. хим. наук.: 02.00.11 Дремук Алена Петровна. – М., 2018. – 151 с.
12. Николаев П.В., Козлов Н.А., Петрова С.Н. Основы химии и технологии синтетических моющих веществ: учебн. пособие: Иван. гос. хим.-технолог. унив-т. – Иваново, 2007. – 116 с.
13. Mohammad Basry Attar. Production of Linear Alkybenzene Sulfonic Acid (LAS) at High Pressure in Supercritical Carbon Dioxide Medium // University of Waterloo – 2010. – P.
14. Леонова М.В. Сульфирование: Практикум // Самарский государственный технический университет. Самара. – 2005. – 57 с.
15. 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.
16. Roberts, D.W. Sulfonation technology for anionic surfactant manufacture //Organic Process Research & Development. – 1998. – №3. – P 194-202
17. Roberts D. W. Optimisation of the linear alkyl benzene sulfonation Process for surfactant manufacture // Organic Process Research & Development. – 2003. – № 7. – P 172-184.
18. Ланге К.Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение — СПб.: Профессия. 2004. — 240 с.
19. J. Ortega // Sulfonation/Sulfation Processing Technology for Anionic Surfactant Manufacture. – 2012. – P 270-292.
20. Баннов П.Г. Процессы переработки нефти. Часть 2. – М.: ЦНИИТЭнефтехим, 2001. –415 с.
21. Foster N. C. Sulfonation and sulfation processes. [Электронный ресурс] / The Chemithon Corporation. [URL:http://www.chemithon.com/Resources/pdfs/Technical_papers/Sulfo%20and%20Sulfa%201.pdf](http://www.chemithon.com/Resources/pdfs/Technical_papers/Sulfo%20and%20Sulfa%201.pdf) , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. Дата обращения: 24.02.2021 г.

22. Леонова М.В. Сульфирование: Практикум // Самарский государственный технический университет. – Самара, 2005. – 792 с.
23. Roberts, D.W. “Optimization of the linear alkyl benzene sulfonation process for surfactant manufacture,” J. Organic Process Research & Development, - 2003. – №7. – P 172-184.
24. Cross, J. Anionic Surfactants-Analytical Chemistry. New York: M.Dekker, 1998.
25. Codenet [электронный ресурс]/ URL: <http://www.codenet.ru/progr/alg/Smart/Genetic-Algorithms.php>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. русск. Дата обращения: 20.12.2021 г.
26. Machinelearning [электронный ресурс]/ URL: <https://clck.ru/Lsdnw> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. русск. Дата обращения: 20.12.2021 г.
27. Lazysmart [электронный ресурс]/ URL: <https://clck.ru/N2keB> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. русск. Дата обращения: 21.03.2021.
28. A.skyparadise [электронный ресурс]/ URL: <https://clck.ru/NfruV> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. русск. Дата обращения: 21.03.2021.
29. [электронный ресурс]/ URL: <http://www.chemicals-el.ru/chemicals-2617-2.html> , свободный. – Загл. с экрана. – Яз. русск. Дата обращения: 18.05.2022.
30. 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.
31. ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргонометрические требования - введ. 01.01.1979.
32. ГОСТ 12.003-2015 Система стандартов безопасности труда. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. – введ. 01.03.2017.
33. Физические факторы производственной среды. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений: Санитарные правила и нормы

СанПиН 2.2.4.548-96. – М.: Информационно-издательский центр Минздрава России. 2001. 20 с.

34. ГОСТ 12.1.003-2014 Система стандартов безопасности труда. Шум. Общие требования безопасности. – введ. 01.11.2015.

35. 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.: утверждено Постановлением Госкомсанэпиднадзора России от 31 октября 1996 г. №36. Москва.

36. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95. – введ. 08.05.2017 г.

37. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.: Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03.: Постановление Главного государственного санитарного врача РФ от 3 июня 2003. №118.

38. ГОСТ 12.1.002-84. Электрические поля промышленной частоты. Допустимые уровни напряженности и требования к проведению контроля на рабочих местах. – введ. 01.01.1986 г.

39. ГОСТ Р ИСО 9355-2-2009. Эргономические требования к проектированию дисплеев и механизмов управления. Часть 2. Дисплей. – введ. 01.12.2010 г.

40. Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда.: Санитарные правила СП 2.2.3670-20. – введ. 02.12.2020 г. №40.

41. ГОСТ 12.1.006-84. Электромагнитные поля радиочастот. Допустимые уровни на рабочих местах и требования к проведению контроля. – введ. 01.01.1986 г.

42. Гигиенические требования к размещению и эксплуатации передающих радиотехнических объектов.: Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.1.8/2.2.4.1383-03.: Федеральный закон «о санитарно-эпидемиологическом благополучии населения» №52-ФЗ от 30.03.99.

43. ГОСТ 10700-97. Макулатура бумажная и картонная. Технические условия. – введ. 01.01.2003 г.

44. ГОСТ Р 53692-2009. Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов. – введ. 01.01.2011 г.
45. ГОСТ Р 52105-2003. Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Классификация и методы переработки ртутьсодержащих отходов. – введ. 01.07.2004 г.
46. ГОСТ Р 22.0.01-94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения. – введ. 01.01.1995. – М.: Издательство стандартов, 1994. – 11 с.
47. ГОСТ Р 51057-2001 Техника пожарная. Огнетушители переносные. Общие технические требования. Методы испытаний. – введ. 01.01.2004 г.

Приложение А

Математическая модель окисления сернистого ангидрида

Приложение Б
(справочное)

**Mathematical modeling of the process of obtaining the basis of
detergent additives for motor oils**

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ02	Хроян Лилит Артуровна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Долганов Игорь Михайлович	к.т.н.		

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОИЯ ШБИП	Надеина Луиза Васильевна	к.филол.н.		

Literature review

The process of sulfonation of aromatic hydrocarbons is used to obtain synthetic detergents based on sulfonates [6].

Synthetic detergents (SD) are mixtures of surfactants with auxiliary components that enhance their detergency. A surfactant is one of the most widely used, produced and consumed chemical compounds with detergency.

Linear alkylbenzene sulfonic acid (LABSA) obtained by sulfonation of linear alkylbenzene (LAB) with sulfuric anhydride (SO_3) is used as a surfactant [7].

1.1 Detergency of surfactants

The result of the action of synthetic detergents is physical and chemical processes. In the first instance, these processes are determined by the structure of the surfactant molecule.

A surfactant molecule is an asymmetric molecular structure containing polar (hydrophilic) and nonpolar (hydrophobic) groups [7–10]. Such structure leads to the surface activity of surfactants, i.e. their ability to be adsorbed at interphase boundaries [11].

Rebinder P.A. formulated the principle of washing action [12], which says that the detergency is determined by the surface activity of surfactants that can give saturated adsorption layers on the washed surface and pollution particles.

There are several stages of detergency [8], where at the beginning the surface of the pollutant is wetted with a surfactant solution. Further, the removal of contaminants and their retention in the volume of the washing solution also prevents its re-deposition on the washed surface.

1.2 Production of linear alkylbenzene and linear alkylbenzenesulfonic acid

Anionic surfactants are obtained by sulfonation of a fatty hydrocarbon with the formation of an organic acid, followed by its neutralization with sodium or potassium hydroxide [13].

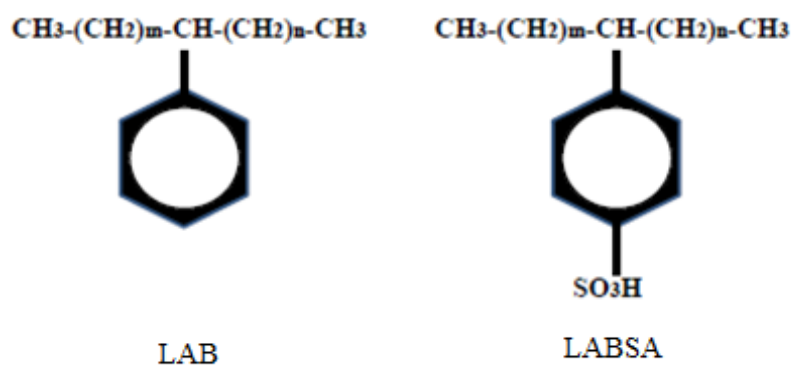


Fig. 1 Molecular structure of LAB and LABSA [13]

LAB is the most popular raw material in the washing industry.

LABSA refers to anionic surfactants that have polar and non-polar parts [13]. They are chemical substances with a carbon chain of 10-13 carbon atoms and having one or more sulfo groups.

LABSA is produced by sulfonation of alkylbenzene. LAB raw material is obtained by alkylation of benzene with n-paraffins in the presence of hydrogen fluoride (HF) or aluminum chloride (AlCl_3) as a catalyst.

LABSA is the largest surfactant with low production cost and good performance. [13].

More than 80% of LABSA produced worldwide is used in the production of synthetic detergents and in the textile industry as a wetting or dispersing agent. LABSA can be used in acidic and alkaline formulations, in liquid and powder forms.

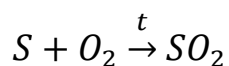
1.3 Methods for obtaining sulfuric anhydride

SO_3 is an aggressive reagent that quickly reacts with an organic substance.

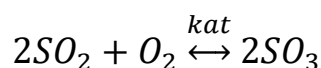
Industrial methods for obtaining sulfuric anhydride:

1. Oxidation of sulfur dioxide with oxygen in the presence of V_2O_5 catalyst.

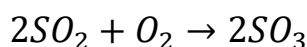
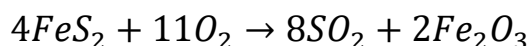
Sulfur is used as a raw material to produce sulfur trioxide, and when burned in a kiln, sulfur dioxide is produced:



Next, sulfur dioxide is oxidized to sulfuric anhydride in the presence of a vanadium catalyst:



2. Roasting pyrite:



1.3.1 Oxidation of sulfur dioxide

The most popular way to obtain SO_3 is the oxidation of sulfurous anhydride to sulfuric anhydride. This reaction is reversible and exothermic. The reaction is carried out using V_2O_5 catalyst.

Vanadium contact mass contains 7% vanadium oxide, K_2O activator and aluminosilicate carrier. The energy of activation the reaction is quite high, $E_a > 300$ kJ/mol, therefore, without a catalyst, oxidation does not proceed even at high temperatures. So, the presence of a catalyst reduces the energy of activation and increases the reaction rate.

The reaction of formation of sulfuric anhydride from sulfur dioxide is carried out with a vanadium catalyst, a temperature of $450^\circ C$ and an excess of oxygen, since under these conditions the conversion is 95-98%. At temperatures below $450^\circ C$, the reaction proceeds slowly, and above that, the equilibrium shifts towards the starting materials.

1.4 Agents for reducing the reactivity of sulfuric anhydride

The sulfonation reaction has a positive thermal effect and it is fast. It releases sensible heat 380 kJ/kg SO_3 [2]. When in contact with pure sulfur trioxide, most organic compounds form black carbon.

The viscosity of LAB increases from 5 to 400 times with the formation of sulfonic acid [2]. This increase complicates the removal of heat and reduces the coefficient of heat transfer from the reaction mass. Good cooling of the reaction is necessary to reduce the formation of by-products.

It is also important to control the molar ratio of SO_3 to organic feed, as any excess of SO_3 promotes the formation of by-products. Therefore, industrial reactions

of this process require special tools to tightly control the molar ratio of SO₃ to organics and quickly remove heat.

The problem of the reactivity of sulfuric anhydride was solved by diluting SO₃ to reduce the rate of the process. Commercial diluting or complexing agents are shown in Figure 3 [3].

Controlling the ratio of SO₃ to organic feedstock is important to achieving the desired product quality using any of the agents. In addition, these processes require heat to be removed to maintain product quality.

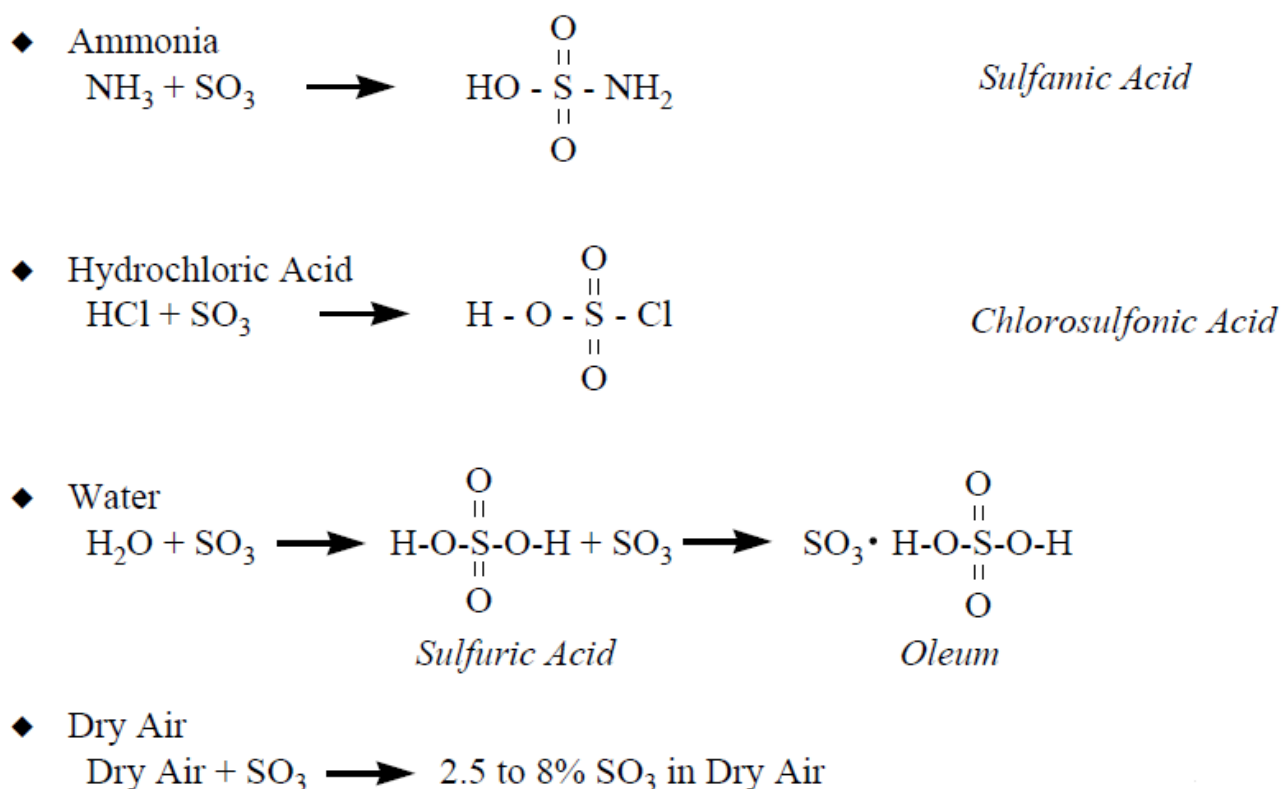


Fig. 3 Sulfonating agents [3]

Sulfamic acid (NH₂SO₃H) is used to sulfonate alcohols and ethoxylated alcohols to form an ammonium neutralizing salt. It is the most expensive reagent and agent presented, costing \$0.51 per pound of SO₃. An important advantage of NH₂SO₃H is selective sulfonation of alcohol groups and non-sulfonation of aromatic rings [3, 13].

Chlorosulfonic acid (ClSO₃H) is also widely used for the production of alcohol sulfates, alcohol sulfate esters, dyes and dye intermediates [3]. At the end of the reaction, hydrochloric acid (HCl) is released. ClSO₃H was purified or regenerated. Chlorosulfuric acid is an expensive source of SO₃. The cost of one pound of reactive SO₃

is \$0.255 [3]. It is a harsh and dangerous chemical to handle and releases HCl as a by-product. Hydrochloric acid can be removed by washing the off-gas stream with water, or neutralized by washing the off-gases with a dilute basic washing solution. This process requires additional equipment.

Sulfuric acid (H_2SO_4) and oleum ($\text{SO}_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$) are also used as a sulphurizing agent. This is a reversible process, as the reaction produces water, which dilutes the oleum or sulfuric acid and results in desulfurization. To shift the equilibrium towards the product, it is necessary to remove water or increase the amount of acid. Oleum is used for sulfonation of alkylbenzene and sulfate fatty alcohols for heavy detergents [2]. Oleum is relatively inexpensive at about \$0.153 per pound of reactive SO_3 . The advantage of the process is the low cost of SO_3 and capital equipment. And the disadvantage is a large amount of unreacted sulfuric acid. It must be separated from the reaction mixture and disposed of.

Sulfurization with sulfuric acid is a special case of oleum sulfonation. Because the reaction stops, when the concentration of the acid in the reaction mixture falls below 90%, which leads to a sharp decrease in the rate of sulfonation [3].

Sulfonation with air/ SO_3 is a direct process and it reacts with organic feedstock. The gas source can be liquid SO_3 or SO_2 from sulfur combustion. The cost of liquid SO_3 is \$0.09 per pound of reactive SO_3 . The air/ SO_3 sulfonation process has the lowest cost of SO_3 and it is versatile, producing high quality products. However, it is a continuous process, and it is best suited for high production volumes. It also requires expensive high-precision equipment.

1.4.1 Choice of sulfonation method

The sulfonation process is influenced by various factors. Each process produces different products. Some sulphurizing agents are universal in nature, while others are used only to obtain a certain type of product.

The air/ SO_3 process is capable of sulphurizing a wide range of raw materials and producing good quality products.

The second factor in choosing a sulfonation process is capacity. The sulfamic acid process is a batch process, and it is used to produce material in small quantities.

The air/SO₃ process is a large and continuous process that is best suited for operation 24 hours a day, seven days a week. The chlorosulfonic acid and oleum processes can be run in series or continuously.

For the production of large quantities of material, the air/SO₃ process is advantageous. However, for small-scale production, the initial cost of the equipment and the need for continuous operation become a disadvantage.

Safety is also an important factor, since the concentrated sulfuric acid, the liquid sulfuric anhydride are dangerous for handling, transportation and storage. Sulfur, in both liquid and solid form, while a less hazardous option as a feedstock for SO₃ production, is still a risky one.

When choosing a sulfonation process, the cost of process equipment is important. To do this, you need to look at the cost of the system, the volume of the tank and the necessary security systems [3].

The last factor is the cost of waste disposal. In the processes of sulfonation of chlorosulfonic acid and oleum, by-products are formed. They must be recovered and sold or disposed of as waste. Waste disposal requires additional equipment, and it can be expensive.

1.5 Types of sulfonation reactors

The choice of the type of reactor according to the design must meet the requirements depending on the production of the desired target product. When choosing, it should be taken into account that the sulfonation process is a fast reaction [14, 15]. The concentration of sulfuric anhydride in the gas mixture is maintained at a sufficiently low level, and the gas must also come into contact with the liquid reagent faster. Vigorous agitation must be present and maintained throughout the reaction.

The sulfonation reaction is accompanied by the release of heat. The heat of reaction is about 167 kJ/mol [16]. To maintain the required temperature in the reactor, heat must be quickly removed to avoid overheating.

The main apparatus for sulfonation is the sulphonator.

1.5.1 Mixing reactor

Mixing reactors in the sulfonation process were used earlier [16].

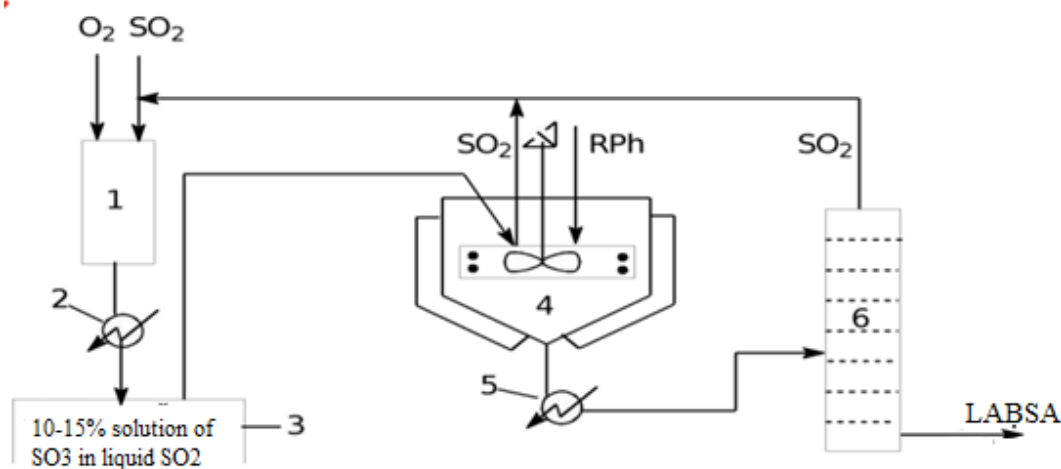


Fig. 4 Obtaining LABSA using a mixing reactor

- 1 - block of oxidation; 2 - refrigerator; 3 - collection; 4 - reactor; 5 – vacuum evaporator; 6 – collection

In block 1, sulfurous anhydride is partially oxidized to sulfuric anhydride by oxygen. The oxidized product passing through the refrigerator 2 is collected in the collector 3 SO₃ solution in liquid SO₂. The solution and linear alkylbenzene are sent to the center of the reactor tray.

The reactor has the form of a vessel that is cooled through a jacket. Inside there is a plate with sides, a stirrer and a cooling coil.

Part of the edited mixture flows down through the side of the plate onto the cooled wall of the apparatus body. In the flowing thin film of liquid, the reaction is complete and most of the sulfur dioxide is removed from the top of the reactor. A liquid containing 5-7% SO₂ comes out from below. To remove it, it is heated and sent to a 5 vacuum evaporator, after which it flows into a collection 6 and goes for further processing. Gaseous SO₂ is returned for oxidation.

Reactors of this type were widely used in the USA, but now they are almost never found.

1.5.2 Ballestra multi-tubular film sulphonator

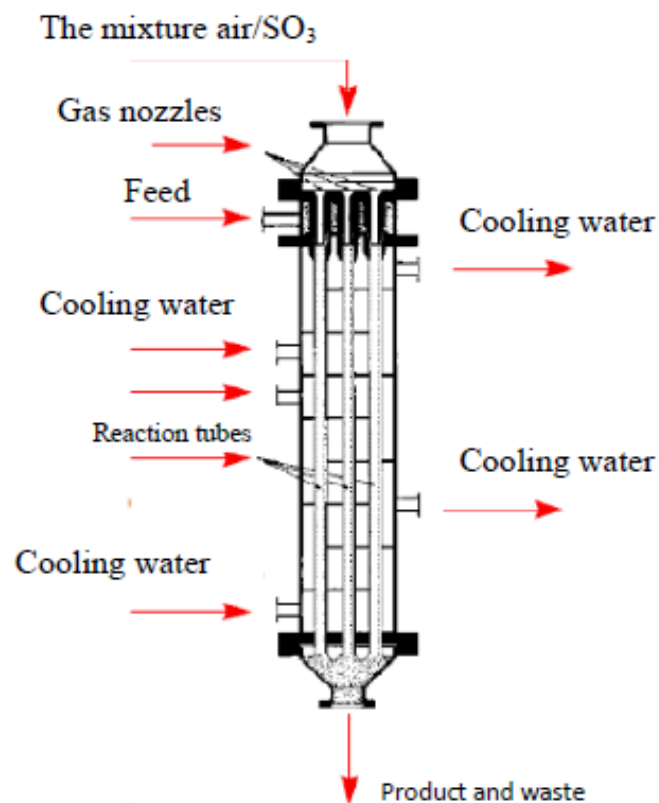


Fig. 5 Multitubular film sulphurator Ballestra [3]

The reactor in Figure 5 consists of vertical reaction tubes, arranged as in a shell-and-tube heat exchanger, and gas nozzles. The capacity of one pipe is 40 kg/h LABSK, and the gas supply velocity is 30 m/s [17,18].

The power of the sulphonator depends on the number of pipes. The more pipes, the greater the power of the reactor. The difference between a conventional film reactor and a multiple pipe reactor is that a multiple pipe reactor consists of 144 tubes, while a film reactor consists of one tube [16].

During sulfonation, exhaust gases are released. They contain little to no sulfuric anhydride, but some sulfurous anhydride and particulate anionic materials such as acid mists of sulfonic and sulfuric acids. This gas stream is not suitable for direct release to the atmosphere. Therefore, a cleaning system (Figure 6) is needed, consisting of an electrostatic precipitator to collect the particulate mist and a packaged scrubber tower to absorb the SO_2 gas in the dilute caustic.

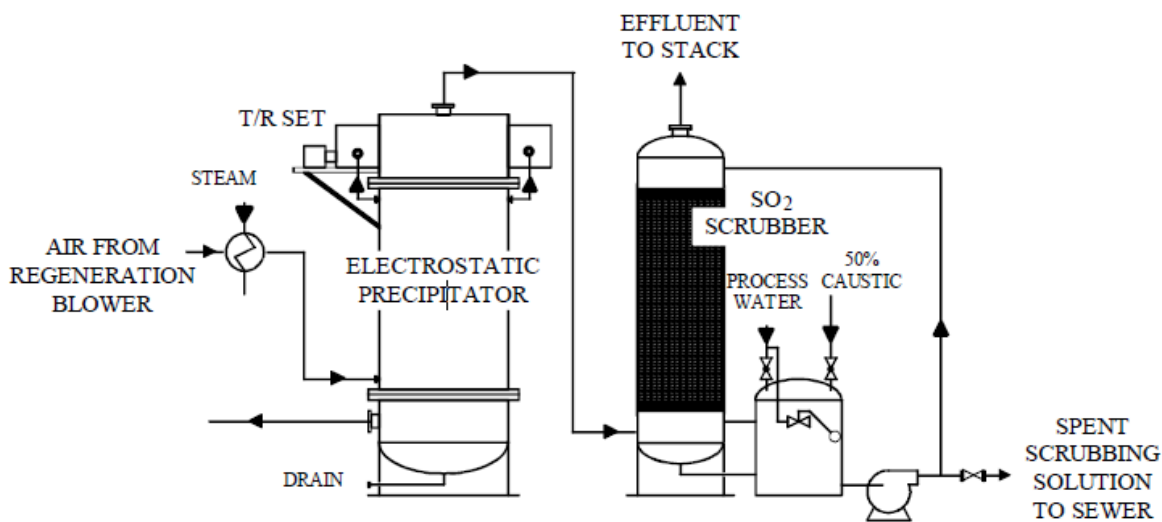


Fig.6 Waste gas treatment system [3]

1.5.3 Chemithon ring film reactor

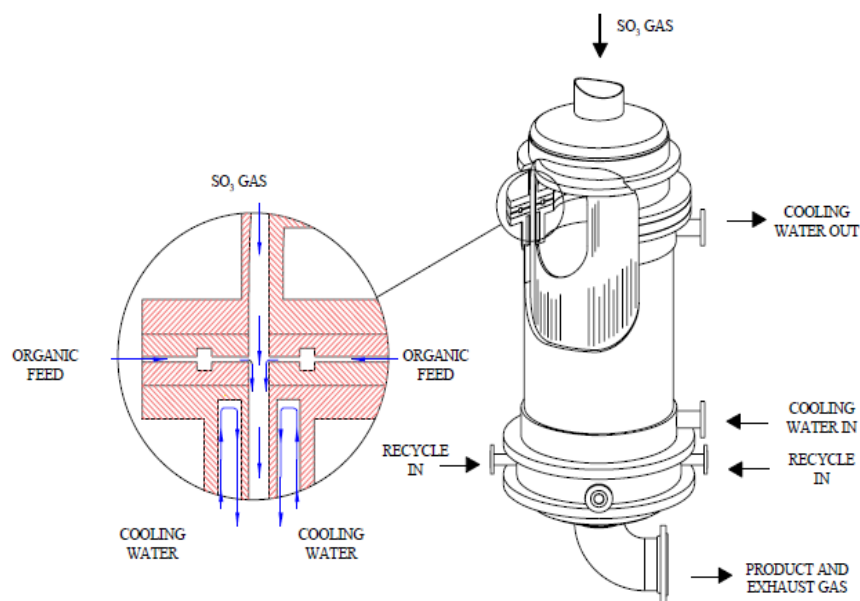


Fig.7 Ring film reactor Chemithon [3]

Figure 7 shows a Chemithon ring film reactor. This reactor [3] is unique in many respects.

It uses replaceable, factory calibrated organic dosing flanges. The heat of reaction is removed by cooled jackets of the reactor. And the recirculation system allows the apparatus to overcome the increase in the viscosity of sulfonic acid.

The isolated product is instantly cooled by removing the acid, pumping it through a heat exchanger to cool it, and then returning it to the bottom of the reactor. This cooling process shortens the holding time of the sulfonic acid at elevated temperature and results in improved product quality. Also an advantage is the compactness of the reactor - less than two meters in height - and, therefore, much cheaper to install.

1.5.4 Film reactor of cylindrical type

The cylindrical film reactor was developed by Chemiton [19].

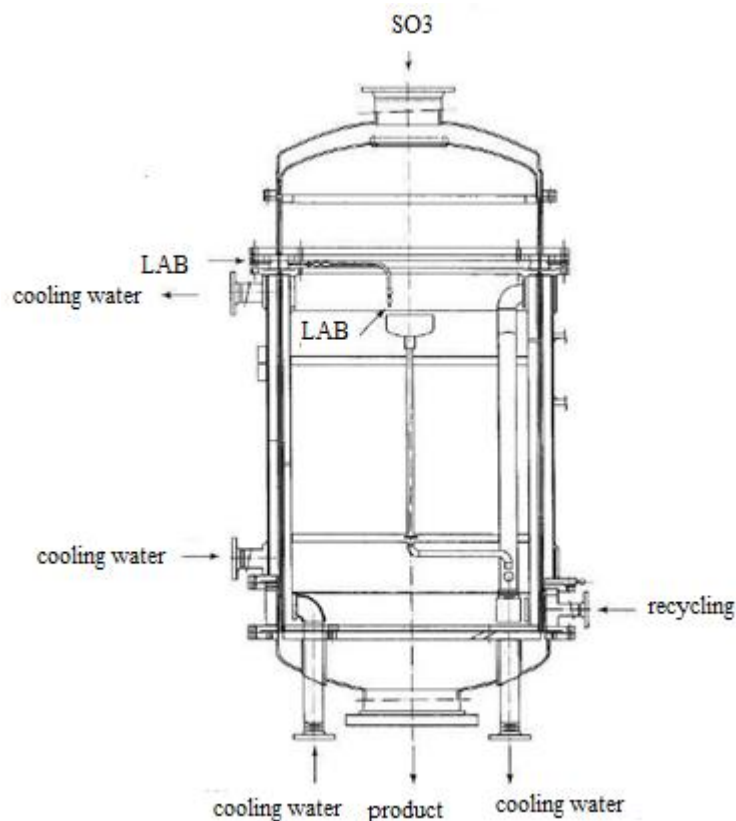


Fig. 8 Cylindrical film reactor [19, 20]

The design of the reactor (Figure 8) consists of two cylinders located one after the other. The annular space between these cylinders is the reaction space [19].

With the help of a pump, 50% LAB is supplied to the outer cylinder of the distribution chamber and 50% to the inner cylinder of the distribution chamber. LAB from these chambers enters the reaction space through the gaps. LAB flows as a thin film along the walls of the cylinder.

SO_3 is fed from the top of the apparatus and enters the reaction space, where sulfonation occurs immediately. The resulting product, LABSA, flows down to the bottom of the reactor.

The heat released during the reaction is removed by cooling water, which circulates through the jackets [19, 20]. Cooling water should not be lower than 30°C , since at temperatures below 28°C the walls are strongly cooled, the viscosity of the reaction mass increases, which will lead to a product mismatch [19].

1.6 Mathematical modeling of the process of sulfonation of aromatic hydrocarbons

Consider a sketch of a falling film reactor shown in Figure 9 [21].

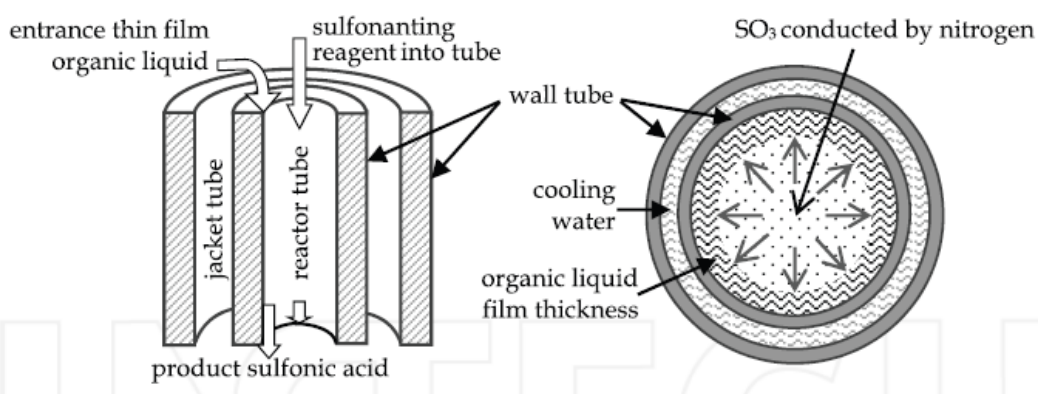


Fig. 9 Sketch of the falling film reactor [21]

The simplest configuration of a falling film reactor can be described as two tubes arranged vertically.

The organic matter forms a thin film covering the inner wall of the tube. This film flows down from the reactor in a laminar flow, forming an annular space, inside which the gas flow flows in a turbulent regime. In the first reaction section, sulfuric anhydride is contacted with fresh organic matter. The reaction rate and the amount of body released is high ($150\text{-}170\text{ kJ/mol}$). The coolant flow flows along the outer wall of the inner tube parallel to the reactant flows. As the reaction progresses the viscosity of the liquid phase increases (about 100 times). Depletion of reagents reduces the reaction rate, and an increase in viscosity slows down the process of mass transfer in the film. At this moment, the coolant with parallel current, which has already taken a

huge amount of heat from the first zone of the reactor, works as a heating current that controls the viscosity of the film.

The efficiency of the sulfonation process determines the composition of LABSA and the quality of the CD. Therefore, it is necessary to maintain optimal conditions. This problem can be successfully solved using the methods of mathematical modeling and the developed computer simulation systems, which allow changing the control parameters.

In 2012 Foster N.S. (Columbia) developed a mathematical model of the sulfonation reactor, where the following are important: the influence of interfacial resistance at the gas-liquid interface [21]. The model takes into account the change in physical properties with temperature, predicts the change in temperature at the gas-liquid interface and the average thickness of the liquid film along the length of the reactor. Since the reaction is highly exothermic, it is necessary to predict temperature changes for quality control [21]. This is necessary to prevent deterioration of the product.

The equations presented in sections 1.6.1 and 1.6.2 take into account mass transfer and heat transfer. In developing these equations, turbulent diffusion was taken into account for mass transfer with a chemical reaction.

1.6.1 Mass balance of sulfonation process

In the liquid phase, only three components are considered: organic liquid, acidic product and sulphurizing agent, so two microscopic balances are sufficient to determine the concentration profiles (Figure 10), where y varies from $y = 0$ (on the wall surface) to $y = \delta$ (on the surface liquids). The mass balance includes boundary conditions at the solid wall/liquid/gas interface.

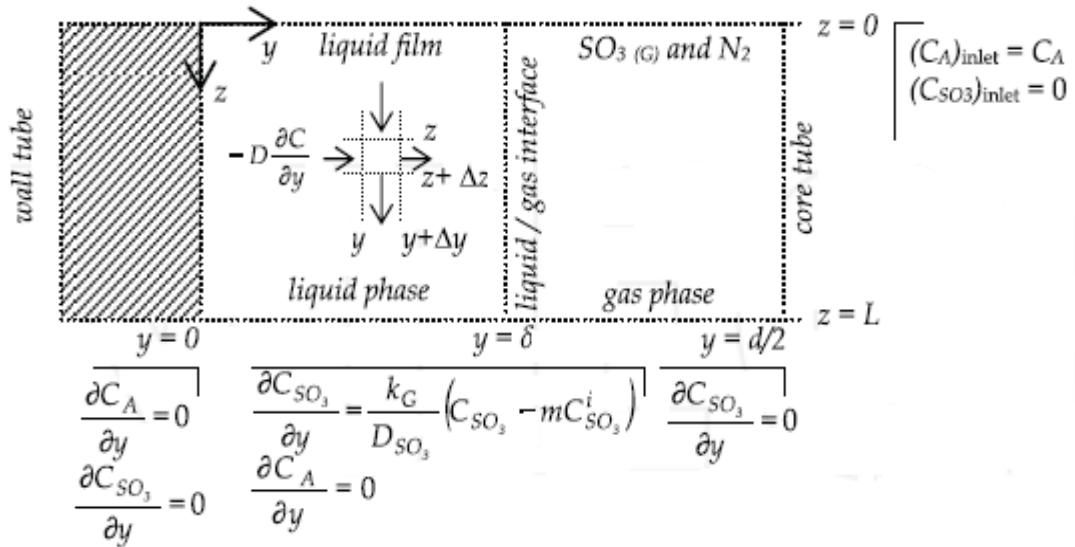


Fig. 10 Mass balance of sulfonation [21]

Mass balance for $SO_{3(G)}$ absorbed by the liquid (equation 1) can also be applied to the reactant in the liquid phase where the reaction occurs, then equation 2 is the steady state mass balance for the absorbing species A in the liquid phase [21].

$$v_z \frac{\partial C_{SO_3}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_{SO_3} + D_T) \frac{\partial C_{SO_3}}{\partial y} \right] - r \quad \delta \leq y \leq \frac{d}{2} \quad (1)$$

$$v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_A + D_T) \frac{\partial C_A}{\partial y} \right] - r \quad 0 \leq y \leq \delta \quad (2)$$

1.6.2 Heat balance of sulfonation process

The sulfonation process is an exothermic reaction, it can develop, the boundary conditions shown in Figure 11 are applicable for heat balance.

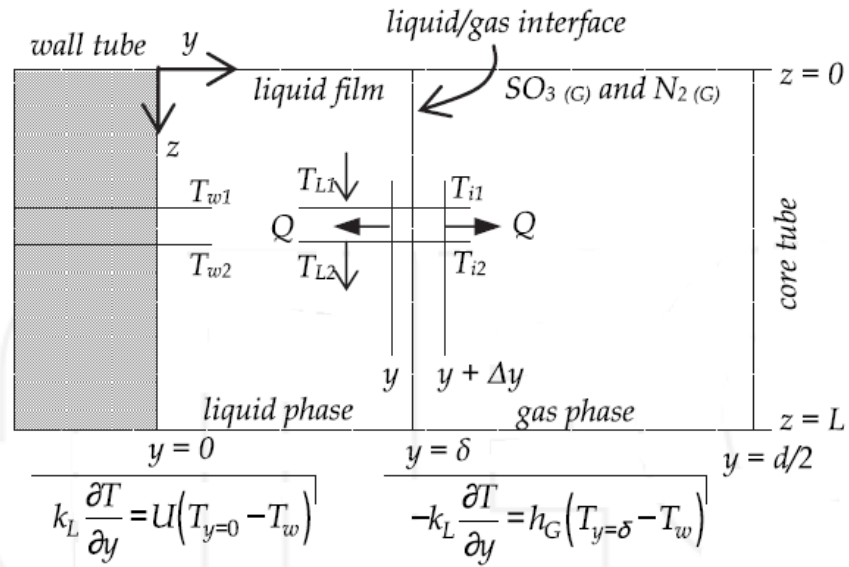


Fig. 11 Heat balance of sulfonation [21]

$$v_z \frac{\partial \rho c T}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial y} \left[-k_L \frac{\partial T}{\partial y} \right] + (\Delta H)r \quad (3)$$