



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

Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

ООП: Цифровые технологии в проектировании нефтегазохимических производств

Отделение химической инженерии

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА МАГИСТРАНТА

Тема работы
Моделирование процесса сульфирования линейных алкилбензолов с учетом массообмена

УДК 661.715.7.095.253.094.524.5

Обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Сладков Денис Юрьевич		

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	Креницына Зоя Васильевна	К.Т.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Сечин Андрей Александрович	К.Т.Н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП, должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Долганов Игорь Михайлович	К.Т.Н.		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий
УК(У)-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном (-ых) языке (-ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок
ОПК(У)-2	Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
ОПК(У)-3	Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку
ОПК(У)-4	Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способен разрабатывать и применять математические модели для описания физико-химических явлений, качественного и количественного анализа процессов химической технологии
ПК(У)-2	Способен использовать пакеты прикладных моделирующих программ при выполнении проектных и/или исследовательских работ
ПК(У)-3	Способен проводить технологические и технические расчеты по проектам, технико-экономический анализ эффективности проекта
ПК(У)-4	Способен к совершенствованию технологического процесса — разработке мероприятий по комплексному использованию сырья, по замене дефицитных материалов и изысканию способов утилизации отходов производства
ПК(У)-5	Способен осуществлять экспертный анализ технологий подготовки и переработки нефти и газа
ПК(У)-6	Способен осуществлять выбор технологического оборудования для подготовки и переработки нефти и газа



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

Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

ООП: Цифровые технологии в проектировании нефтегазохимических производств

Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП/ОПОП

_____ Долганов И.М.

(Подпись) (Дата) (ФИО)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
2ДМ14	Сладков Денис Юрьевич

Тема работы:

Моделирование процесса сульфирования линейных алкилбензолов с учетом массообмена	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	31-65/с от 31.01.2023

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	25.05.2023
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)</i></p>	<p>Объект исследования – процесс сульфирования линейных алкилбензолов. Сырьем для установки сульфирования являются линейные алкилбензолы и серный ангидрид. Режим работы – непрерывный. Установка предназначена для получения алкилбензолсульфокислоты.</p>
<p>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке <i>(аналитический обзор литературных источников с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе)</i></p>	<p>1) Литературный обзор на темы: способы получения сульфорирующего агента, сульфирование тяжелого нефтяного сырья, моделирование пленочного течения. 2) Объект и методы исследования 3) Экспериментальная часть: – 3.1 Разработка математической модели процесса; – 3.2 Программная реализация математической модели; – 3.3 Проверка модели на адекватность; – 3.4 Оценка влияния изменения технологических параметров на состав и выход продукта;</p>

	<ul style="list-style-type: none"> – 3.4.1 Влияние концентрации серного ангидрида на состав и выход продукта; – 3.4.2 Влияние температуры на состав и выход продукт; – 3.4.3 Влияние соотношения реагентов на состав и выход продукта; – 3.4.4 Исследование потенциала сульфирования тяжелых фракций линейных алкилбензолов; – 3.4.5 Оптимальные условия процесса. <p>4) Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение. 5) Социальная ответственность.</p>
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	Результаты исследования (графики, таблицы)
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i>	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	к.т.н., доцент ОСГН ШБИП Креницына З.В.
Социальная ответственность	к.т.н., доцент ООД ШБИП Сечин А.А
Названия разделов, которые должны быть написаны на иностранном языке:	
Modeling the process of sulfonation of linear alkylbenzenes with allowance for mass transfer	

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

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

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

Задание принял к исполнению обучающийся:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Сладков Денис Юрьевич		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ14	Сладкову Денису Юрьевичу

Школа	Инженерная Школа Природных Ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Бюджет проекта – не более 2 500 000 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 1 600 000 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Значение показателя интегральной эффективности – не менее 4,5 из 5
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	- Районный коэффициент- 1,3; - коэффициент доплат – 0,1; - накладные расходы – 16%; - отчисления во внебюджетные фонды – 30 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Анализ причин и следствия проблем, оценка коммерциализации проекта
2. Разработка устава научно-технического проекта	Устав проекта, организационная структура проекта, ограничения и допущения проекта
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Составление структуры работ и календарного плана проекта. Определение бюджета НТИ
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Проведение сравнительной оценки экономической эффективности научного исследования

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. «Портрет» потребителя результатов НТИ	
2. Сегментирование рынка	
3. Оценка конкурентоспособности технических решений	
4. Диаграмма Исикавы	
5. Иерархическая структура работ проекта	
6. График проведения и бюджет НТИ	

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

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Сладков Д.Ю.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 2ДМ14		ФИО Сладков Денис Юрьевич	
Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Моделирование процесса сульфирования линейных алкилбензолов с учетом массообмена	
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><i>Объект исследования:</i> процесс сульфирования линейных алкилбензолов в многотрубчатом пленочном реакторе</p> <p><i>Область применения:</i> химическая/нефтехимическая промышленность, аналитические центры</p> <p><i>Рабочая зона:</i> офис</p> <p><i>Размеры помещения:</i> 30.5 м²</p> <p><i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> персональные компьютер – 1 шт., монитор – 1 шт., клавиатура – 1 шт., мышь – 1 шт., стол – 1 шт., стул – 1 шт., - ноутбук 1 шт.</p> <p><i>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:</i> работа за ЭВМ (персональным компьютером), разработка математической модели, программная реализация 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>Рассмотреть специальные правовые нормы трудового законодательства;</p> <p>Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</p> <p>- Трудовой кодекс РФ от 30.12.2001 N 197-ФЗ</p> <p>- СП 2.2.3670-20 "Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда"</p> <p>- ГОСТ 12.1.004-91 «Пожарная безопасность. Общие требования»</p> <p>- СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-3. «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий».</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>Вредные факторы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Повышенный уровень и другие неблагоприятные характеристики шума; 2. Отсутствие или недостатки необходимого искусственного освещения; 3. Рабочая поза; 4. Умственное перенапряжение, в том числе вызванное информационной

	нагрузкой; 5. Эмоциональные перегрузки; 6. Длительность сосредоточенного наблюдения. Опасные факторы: 1. Производственные факторы, связанные с электрическим током, вызываемым разницей электрических потенциалов, под действие которого попадает работающий. Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов: отсутствуют. Расчет системы искусственного освещения.
3. Экологическая безопасность при разработке проектного решения	Воздействие на селитебную зону отсутствует. Воздействие на литосферу: использование литиевых батареек и аккумуляторов, макулатура. Воздействие на гидросферу: отсутствует Воздействие на атмосферу: отсутствует
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при разработке проектного решения	Возможные ЧС: пожар, аварии систем электро- и водоснабжения, опасно высокие уровни грунтовых вод Наиболее типичная ЧС: пожар
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Сладков Денис Юрьевич		

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 98 страниц, 40 рисунков, 23 таблицу, 92 источников, 5 приложения.

Ключевые слова: сульфирование, алкилбензол, алкилбензолсульфокислота, серный ангидрид, математическая модель, массоперенос, моделирование, сульфонаты.

Объектом исследования является процесс сульфирования линейных алкилбензолов.

Цель работы – разработка математической модели процесса сульфирования линейных алкилбензолов с учетом массопереноса вещества из газовой фазы в жидкую, программная реализация разработанной модели.

В настоящей работе рассмотрены принципы построения математической модели сульфирования; разработана программа расчета на языке программирования Python; проведена оценка точности описания реального процесса и влияние технологических параметров системы на выход и качество продукта с учетом процесса межфазного переноса вещества.

Научно-исследовательская работа направлена на определение закономерностей хода процесса с целью его оптимизации корректировкой технологического режима.

Область применения – нефтехимия, поверхностно-активные вещества.

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

АБСК – алкилбензолсульфокислота;

АПАВ – анионные поверхностно-активные вещества;

ВСГ – водородсодержащий газ;

ЛАБ – линейный алкилбензол;

ПАВ – поверхностно-активные вещества;

ПЭВМ – персональная электронно-вычислительная машина;

СМС – синтетические моющие средства;

ЭМИ – электромагнитное излучение;

ЭМП – электромагнитное поле;

ЭСП – электростатическое поле;

EOS – Equation of state – уравнение состояния

PR – уравнение состояния Peng Robinson

SRK – уравнение состояния Soave-Redlich-Kwong

Оглавление

Введение.....	13
1 Литературный обзор.....	15
1.1 Способы получения сульфлирующего агента	15
1.1.1 Лабораторный метод получения серного ангидрида	15
1.1.2 Промышленный метод получения серного ангидрида.....	19
1.2 Сульфирование тяжелых фракций	21
1.3 Моделирование пленочного течения.....	24
2 Объект и методы исследования	29
2.1 Технологическая схема процесса алкилирования	29
2.2 Технологическая схема процесса сульфирования.....	31
2.3 Химизм процесса сульфирования	35
2.3.1 Подготовка газовой смеси.....	35
2.3.2 Сульфирование.....	36
2.3.3 Механизм реакции сульфирования	36
3. Экспериментальная часть.....	39
3.1 Разработка математической модели процесса	39
3.2 Программная реализация математической модели	46
3.3 Проверка модели на адекватность	47
3.4 Оценка влияния изменения технологических параметров на состав и выход продукта.....	49
3.4.1 Влияние концентрации серного ангидрида на состав и выход продукта	49
3.4.2 Влияние температуры на состав и выход продукта	54
3.4.3 Влияние соотношения реагентов на состав и выход продукта	60

3.4.4 Исследование потенциала сульфирования тяжелых фракций линейных алкилбензолов	64
3.4.5 Оптимальные условия процесса.....	66
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	69
4.1 Предпроектный анализ.....	69
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	69
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	71
4.1.3 Диаграмма Исикавы.....	72
4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации	73
4.1.5 Выбор предпочтительного метода коммерциализации	75
4.2 Планирование исследовательских работ в рамках ВКР	76
4.2.1 Цели и результаты проекта	76
4.2.2 Иерархическая структура работ проекта.....	76
4.2.3 Определение трудоемкости выполнения работ.....	78
4.2.4 Разработка графика проведения научного исследования.....	79
4.2.5 Бюджет проводимого исследования	82
4.3 Оценка эффективности исследования	84
5 Социальная ответственность	87
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	87
5.2 Производственная безопасность	89
5.2.1 Повышенный уровень шума	90
5.2.2 Недостаточная освещенность рабочей зоны.....	91

5.2.3 Отклонение показателей микроклимата в закрытом помещении	94
5.2.4 Поражение электрическим током	94
5.2.5 Зрительное напряжение.....	96
5.2.6 Нервно-психические перегрузки.....	96
5.3 Экологическая безопасность	97
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	98
Заключение	101
Список использованных источников и литературы.....	102
Приложение А	112
Приложение Б.....	128
Приложение В	129
Приложение Г.....	130
Приложение Д	135

Введение

В современном мире необходимость в том или ином продукте определяется спросом. Так прогнозы 2016 года оценивали мировой рынок ПАВ и моющих средств в 2021 в 39,6 млрд. долларов США, но не текущий момент размер рынка составляет 42,1 млрд. долларов США, при к 2025 году ожидается рост на 24,5 % [1]. Также стоит отдельно выделить ситуацию на Российском рынке, где до сих пор существует значительный потенциал. Средний расход моющих средств на душу населения в России составляет порядка 5 кг, что ниже санитарно-гигиенической нормы на 1-2 кг и вдвое меньше аналогичного показателя в Европе [2, 3].

Анионные поверхностно активные вещества преобладают в составе большинства потребительских средств и продуктов для промышленности и составляют 60 % всех производимых ПАВ для СМС [4]. В первую очередь это обусловлено их ценой, на что влияет стоимость производства. К группе анионных ПАВ принадлежат алкансульфонат (SAS), алкилсульфат (FAS) и летучий алкилсульфат (FAES), которые получают сульфирование или сульфатированием соответствующего сырья. Продукт рассматриваемого в данной работе процесса не является исключением.

Алкилбензолсульфоокислота получается в результате сульфирования углеводородного сырья, состоящего из гомологов линейных алкилбензолов, серным ангидридом. Данное вещество нашло свое применение в качестве основы синтетических моющих средств и для флотации руд [5] еще во второй половине прошлого века. Данное вещество не утратило свою актуальность в настоящее время благодаря моющей способности, хорошей первичной биоразлагаемости, а также факту неспособности к накапливанию в биосреде [5].

Так же отдельный интерес в последнее время вызывает сульфирование большее тяжелых нефтяных фракций. Несомненно, основная причина такой ситуации санкционные ограничения и изоляция Российской экономики. Отечественные производители моторных масел и других смазывающих

материалов по полному циклу производства – дочерние предприятия «Газпром нефть», «Лукойл», «Роснефть» столкнулись с отсутствием доступа к ранее применяемым импортным присадкам, например серии «Hitec» компании Afton Chemical Corporation [6]. Без таких присадок невозможно удовлетворять современным стандартам качества. Несмотря на оперативный переход на использование пакетов присадок от китайских производителей, возникает потребность в собственных технологиях производства. Первым этапом импортозамещения, является производство сульфонатных присадок, оказывающих моющие и детергирующие действие. Так Омский завод смазочных материалов «Газпром нефти» [7] и Новокуйбышевского завода масел и присадок «Роснефти» [8] уже в 2020 – 2021 гг. выпустили первые партии присадок.

Эффективность любого химического процесса можно оценить благодаря критериям качества и количества продукта, экономическим показателям. При неудовлетворительных показателях оценки встает вопрос о возможности оптимизации процесса. Для этого необходимо установить взаимосвязь между критериями оценки, характеристиками конечного продукта, технологическими параметрами процесса, исходным сырьем. Математическая модель процесса является непосредственным описанием этих взаимосвязей. При разработки такой модели необходимо последовательно проработать отдельные ее части: термодинамику химических реакций; кинетику и гидродинамику процесса; явления диффузии, массообмена. При корректном математическом описании процесса становится возможным определение влияния тех или иных технологических и сырьевых параметров, на ход химического процесса и его результат.

Целью выполнения данной квалификационной работы является разработка математической модели процесса сульфирования линейных алкилбензолов с учетом массопереноса вещества из газовой фазы в жидкую, а также проведение исследований влияния основных технологических параметров, что позволит выработать рекомендации с целью повышения эффективности рассматриваемого процесса.

1 Литературный обзор

1.1 Способы получения сульфуряющего агента

По мере развития науки и технологий изучаемый процесс сульфирования каких-либо нефтяных или углеводородных фракций претерпевал различные изменения с целью совершенствования процесса. С годами изменялось не только аппаратное оформление, но и сам принцип работы технологии. Так, в качестве сульфуряющего агента в процессе получения сульфокислот могут использоваться следующие вещества [9]:

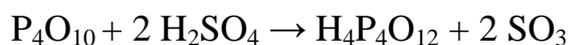
- концентрированная серная кислота (80 – 100 %);
- серный ангидрид (SO₃);
- хлористый сульфурил (SO₂Cl₂);
- олеум;
- хлорсульфоновая кислота (HO-SO₂-Cl);
- сульфаминовая кислота (SO₂(NH₂)₂);
- некоторые комплексы триоксида серы.

В наиболее современных технологиях имеет место сульфирование с участием двух фаз – жидкой и газовой, в качестве сульфуряющего агента применяется SO₃ содержащий газ, зачастую технический воздух.

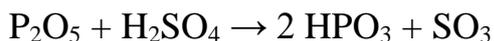
Оксид серы (VI) (серный ангидрид, трёхокись серы, серный газ) — высший оксид серы. В обычных условиях легколетучая бесцветная жидкость с удушливым запахом. Весьма токсичен. При температурах ниже 16,9 °С застывает с образованием смеси различных кристаллических модификаций твёрдого SO₃ [10].

1.1.1 Лабораторный метод получения серного ангидрида

Лабораторный способ получения ангидрида серной кислоты SO₃ [11] основан на следующей химической реакции между серной кислотой и оксидом фосфора (V):



или



Так же в процессе могут наблюдаться следующие побочные превращения:



В связи с этим присутствие влаги в данном процессе нежелательно, реактивы необходимо хранить в специальных емкостях с плотно закрытой крышкой и согласно иным требованиям изложенных в паспорте безопасности для используемых реактивов.

Ожидаемый выход SO_3 составляет 12-20 % от теоретического. Данный способ является наиболее доступным из всех исследованных, ввиду относительной простоты установки, сравнительно не большой цены реагентов и возможности их закупки [12], и будет применен для масштабированной установки в будущем.

Для осуществления данного метода требуются следующие приборы, реактивы, материалы: серная кислота концентрированная H_2SO_4 (98%), оксид фосфора P_2O_5 (V), колба круглодонная К-1-500-29/32, насадка Кляйзена 2-29/32-14/23, холодильник ХПТ-1-300-14/23-14/23, аллонж АИО-14/23-14/23-50 ТС, колба круглодонная К-1- 50-14/23, пробка притертая КШ 14/23, воронка капельная ВК-100-19/26-14/23, трубка фторопластовая Ф-4Д 9,0x1,5 мм, стакан лабораторный В-1-250, промывалка 250 мл КШ 29/32, плита нагревательная, мерный цилиндр, весы аналитические, воронка стеклянная, термометр.

Порядок проведения работы должен осуществляться в далее описанной последовательности. Перед началом работы необходимо убедиться, что вся лабораторная посуда тщательно вымыта и высушена, отсутствуют какие-либо сколы или трещины, провод питания нагревательной плитки заизолирован и не поврежден. Далее с помощью весов отмеряется необходимое количество реагентов. Количество отмеренной серной кислоты должно быть не менее стехиометрического соотношения – 0,345 г. на 1 г оксида фосфора (V),

допускается незначительный избыток кислоты. На следующем этапе происходит сборка лабораторной установки согласно схеме на рисунке 1.

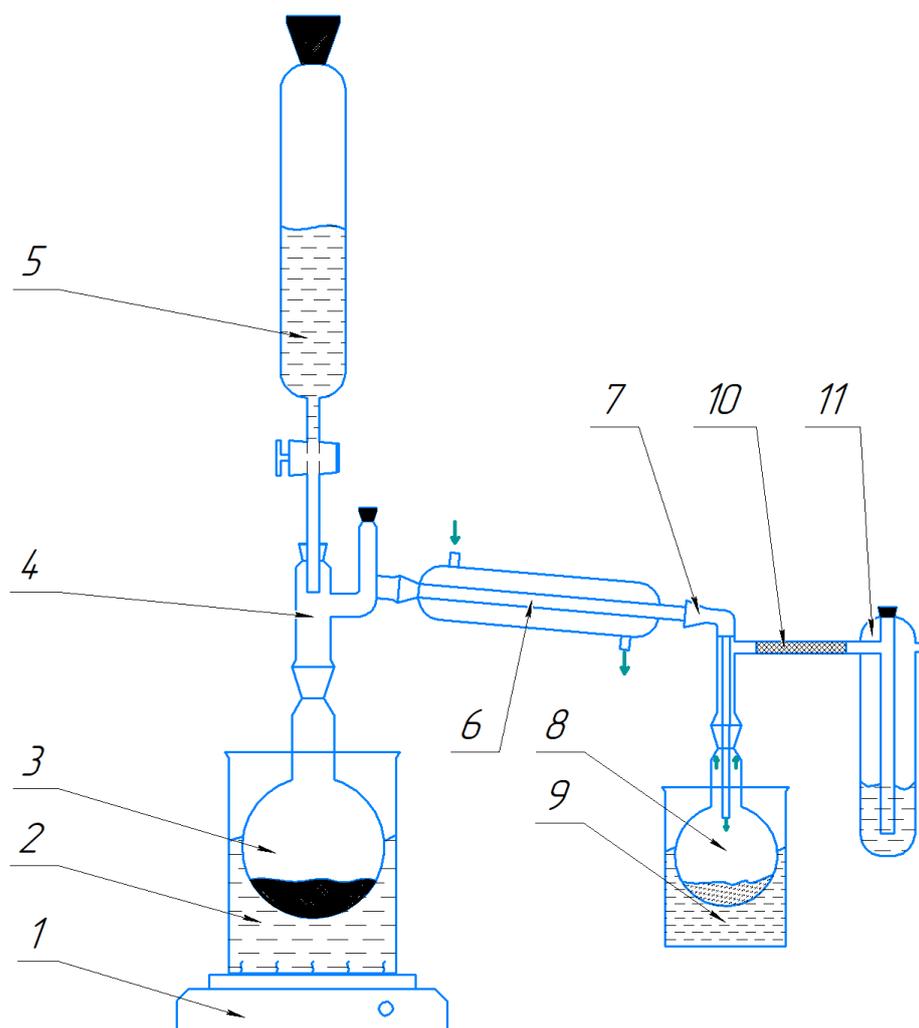


Рисунок 1 – Схема лабораторной установки

1 – электрическая плитка нагреватель, 2 – масляная баня, 3 – реакционная колба, 4 – насадка Кляйзена, 5 – воронка капельная, 6 – прямоточный холодильник, 7 – аллонж АИО (с боковым отводом), 8 – колба приемник, 9 – стакан с захлажденной водой, 10 – трубка фторопластовая, 11 – промывалка.

Навеска оксида фосфора (V) помещается в круглодонную реакционную колбу, которая помещается в масляную баню, подогреваемую электрической плиткой. Отмеренное количество серной кислоты переливается в капельную воронку через воронку с предварительно закрытым краном подачи. Капельная воронка с кислотой соединяется с реакционной колбой посредством насадки Кляйзена согласно рисунку 1. Верхние муфты насадки и капельной воронки

плотно закрываются притертыми пробками. К боковому керну насадки Кляйзена присоединяется прямоточный холодильник. Колба приемник, погруженная в стакан с заоложенной водой, соединяется с холодильником с помощью аллонжа. К боковому отводу аллонжа присоединяется фторопластовая трубка, другой конец которой вставлен в промывалку. Предварительно в промывалку необходимо набрать разбавленную серную кислоту так, чтобы трубка подвода газа была погружена в жидкость на 1,5-2,5 см. Перед началом процесса убедитесь, что все элементы установки плотно соединены между собой и из соединений не будет утечек газа. Процесс проводится строго в вытяжном шкафу с исправно функционирующей системой вентиляции.

Перед открытием крана подачи серной кислоты, включается подача холодной воды в холодильник. Затем необходимо включить нагревательную плитку. При достижении температуры масляной бани 75 °С, нагреватель выключается и открывается кран капельной воронки так, чтобы в реакционную колбу попадало 2-4 капли серной кислоты в секунду (подачу можно снизить или прекратить, если в ходе химических реакций температура масляной бани превысит 150 °С). В ходе химической реакции образуется газообразный ангидрид серной кислоты, который проходит насадку Кляйзена, холодильник, где происходит его охлаждение, аллонж и попадает в колбу приемник, где происходит его кристаллизация на дне колбы. Расход воды в холодильнике регулируется таким образом, чтобы не происходила кристаллизация SO_3 в значительном количестве, так как это может привести к закупориванию холодильника. При слишком высокой температуре колбы приемника кристаллизация не будет наблюдаться и весь газ будет подниматься на верх колбы, а затем через аллонж в промывалку, которая предусмотрена для растворения оксида серы (VI) в разбавленной серной кислоте. Процесс можно считать окончанным, когда перестанут наблюдаться пузырьки газа в промывалке. По окончании процесса колба приемник отсоединится и плотно закрывается притертой пробкой, а нижняя трубка аллонжа погружается в стакан с разбавленной серной кислотой, для растворения оставшегося SO_3 .

1.1.2 Промышленный метод получения серного ангидрида

Прежде чем, обсуждать промышленные технологии получения серного ангидрида, обратим свое внимание на производство серной кислоты, которую получают контактным способом путем окисления диоксида серы. Последний получают путем сжигания серы или сульфидов металлов, например пирита [13]. В различных источниках процесс производства серной кислоты, зачастую делят на 4 этапа при использовании руды и на 3 этапа при использовании элементарной серы в качестве изначального сырья.

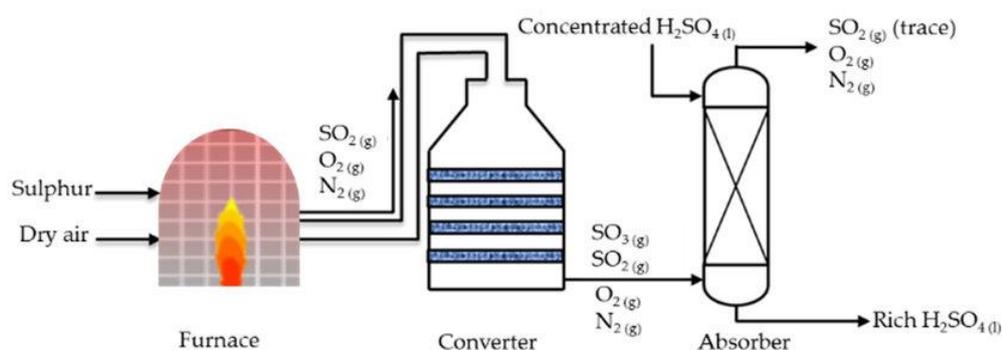


Рисунок 2 – Схема производства серной кислоты

Первый этап заключается в получение диоксида серы, путем сжигания элементарной серы при избытке воздуха с целью полного завершения реакции под давлением на уровне около 0,5 МПа. Весь этот процесс осуществляется при температуре около 150 °С [14] в баках, выложенных толстым слоем огне- и кислотостойкого кирпича. Расплавленную серу фильтруют с целью удаления примесей (в основном это железо и органические соединения). Часто в процессе применяют также известь, чтобы уменьшить кислотность расплавленной серы, тем самым ограничивая ее коррозионные свойства. Расплавленную серу подают в горелки, где она сгорает. Смесь диоксида серы и воздуха, выходящую из горелки, направляют на следующий блок производства, предварительно удаляя образующие нежелательные примеси путем пропускания полученного газа через фильтр.

На втором этапе диоксид серы окисляют для получения триоксида серы. Газовая смесь сернистого газа проходит охлаждение в холодильнике и поступает в конвертер. Конвертер представляет собой вертикальную башню, в которой размещены: фильтр для газа и три слоя катализатора на основе пентоксида ванадия (V_2O_5). Газовая смесь SO_2 проходит конвертер сверху вниз через фильтр и слои катализатора. Степень превращения SO_2 в SO_3 зависит от температуры газовой смеси. На практике ее поддерживают на уровне около $500\text{ }^\circ\text{C}$ [14], чтобы обеспечить достаточную скорость реакции при максимально высокой конверсии. Для обеспечения интенсификации теплоотвода, а также увеличения концентрации SO_3 предусмотрена разделяющая перегородка между выходом из первого слоя катализатора и входом во второй слой катализатора. Принципиальная схема реактора окисления представлена на рисунке 3, подробная технологическая схема представлена в приложении Б.

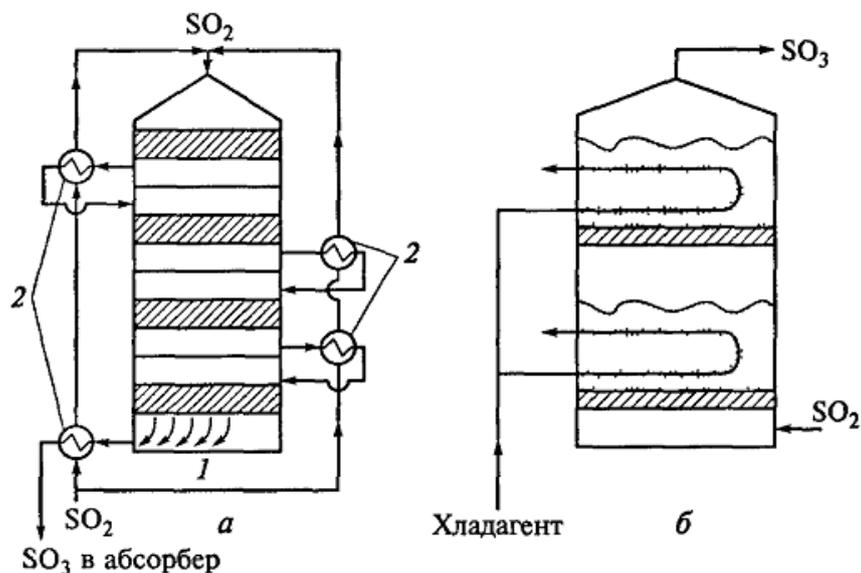


Рисунок 3 – Пример схемы реактора каталитического окисления SO_2 в SO_3

Поток реакционной массы из первого слоя катализатора конвертера направляется в теплообменный аппарат, где охлаждается перед поступлением во второй слой катализатора. После второго слоя катализатора подводится технологический воздух, охлаждающий газовую смесь. Завершение реакции превращения SO_2 в SO_3 происходит в третьем слое катализатора, где повышение температуры незначительное.

Последний этап производства серной кислоты заключается в абсорбции SO_3 в концентрированной H_2SO_4 или олеуме с целью предотвращения образования, трудно поддающегося конденсации тумана серной кислоты. Серная кислота с концентрацией 98% циркулирует с такой скоростью, что вновь поглощаемый SO_3 вызывает очень незначительное повышение ее концентрации. Весь процесс осуществляется при температуре около $70\text{ }^\circ\text{C}$, тем самым максимизируя эффективность поглощения SO_3 . Кроме того, в емкость с кислотой добавляют также воду, разбавляющую кислоту до соответствующей концентрации. Поток серной кислоты постоянно сливают и охлаждают с помощью пластинчатых теплообменников перед подачей в резервуары для хранения. Общее преобразование серы в серную кислоту составляет примерно 99%.

Таким образом можно заметить, что на втором этапе производства серной кислоты получается рассматриваемый нами серный ангидрид, т.е. для производства SO_3 достаточно исключить последний этап абсорбции.

1.2 Сульфирование тяжелых фракций

Еще в прошлом веке в достаточно широко, в том числе в советском союзе, производились сульфатные присадки к маслам. Это малорастворимы бариевые и кальцевые соли сульфокислот, полученных сульфированием нефтяных фракций, предварительно очищенных селективными растворителями. Бариевые присадки имели обозначение СБ-3, кальцевые – СК-3 [15]. Данные присадки обладали сравнительно хорошими моющими и противоизносными свойствами для своего времени.

Сульфирование ароматических углеводородов из фракций нефти преследует две цели: очистку фракции и непосредственно получение сульфокислот. По одной из технологий [16] процесс осуществляется в закрытых ректорах с механическими мешалками периодического действия или непрерывно в серии смесителей и промывочных емкостях, работающих попеременно. Схема технологии представлена на рисунке 4.

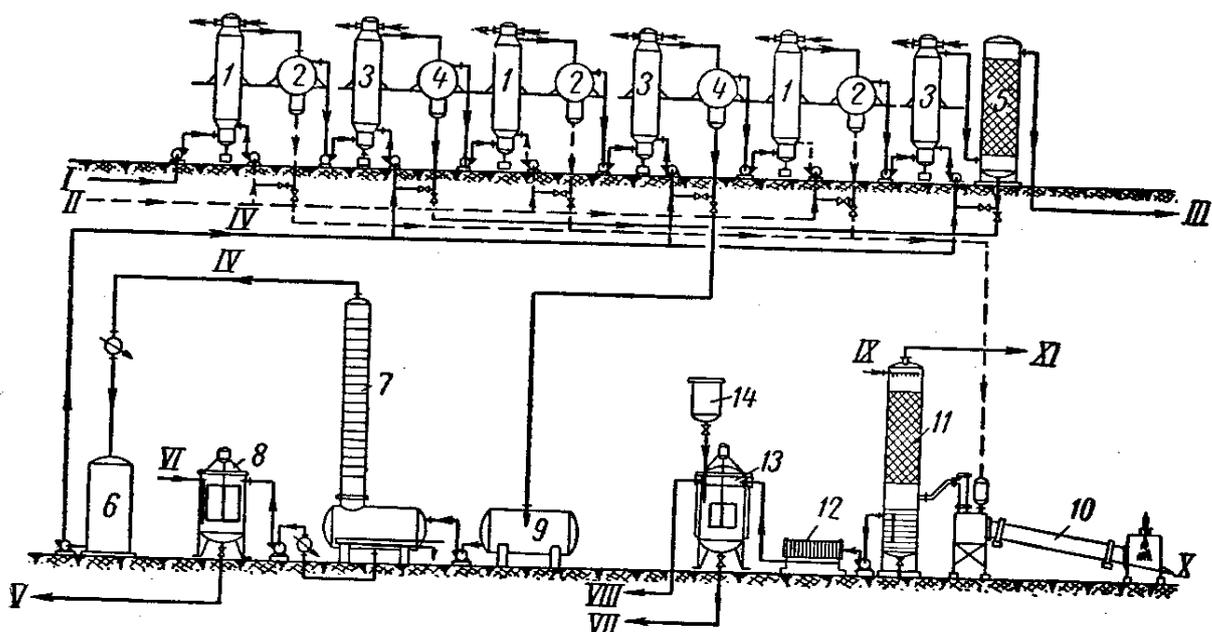


Рисунок 4 – Схема установки производства сульфокислот из дизельной фракции и регенерации ароматических углеводородов из кислого гудрона сульфирования [16]:

1 – емкость смешения и сульфирования; 2 – отстойник кислоты; 3 – емкость смешения и промывки; 4 – отстойник воды; 5 – колонна для осветления; 6 – емкость спиртных вод; 7 – колонна и киб для перегонки; 8, 13 – автоклав для нейтрализации; 9 – емкость промывочной воды; 10 – ротационная печь; 11 – колонна для промывки и разделения; 12 – фильтр-пресс; 14 – емкость раствора гидроксида натрия.

I – дизельное топливо; II – серная кислота; III – очищенное дизельное топливо; IV – водный раствор спирта; V – сульфокислоты; VI – аммиак; VII – остаток; VIII – ароматические углеводороды; IX – вода; X – кокс; XI – SO_2 содержащий газ на сжигание.

Установка сульфирования ароматических углеводородов из дизельной фракции с целью получения сульфокислот для приготовления моющих веществ на рисунке 4 работает непрерывно. Дизельная фракция проходит через три смесителя с серной кислотой и три промывочной емкости, в которых находится свежая серная кислота или разбавленный спирт – преимущественное 25–30 % раствор метанола или этанола. После каждого смесителя и емкости для

промывки в главном потоке дизельной фракции уславливаются по одному отстойнику, где собирается кислый гудрон и водный раствор сульфокислот.

Водный слабоспиртовой раствор красных сульфокислот перегоняют для удаления воды и получения его 40–65 процентной концентрации, а затем нейтрализуют, например аммиаком.

Полученные моющие вещества в таком виде и применяются. Кислый гудрон далее перерабатывается либо с целью перевода серной кислоты в сернистый ангидрид, из которого обратно получают серную кислоту по технологии, рассмотренной ранее, либо с целью регенерации и концентрирования разбавленной серной кислоты.

В обоих случаях ароматические углеводороды регенерируются только частично в виде зеленых сульфокислот. Остальные могут быть использованы в качестве ароматического масла, пригодного в производстве деэмульгаторов, или для гидрогенизации с целью получения нафталина.

Сульфокислоты, полученные из фракции керосина и дизельного топлива, помимо ранее озвученных областей применяются в качестве моющих веществ в текстильной промышленности в текстильной промышленности и в качестве агента распада жиров в мыльной промышленности и промышленности жирных спиртов.

В СССР ГОСТ 463-77 для сульфокислот содержит данные относительно технического продукта, названного контакт Петрова [17]. В настоящее время в России сульфокислоты выпускаются по собственным техническим условиям производителей. Однако сульфокислоты, получаемые при сульфировании нефтяных фракций, недостаточно гомогенны, а их химическая структура недостаточна стабильна. Поэтому физические свойства сульфокислот также неодинаковы. Разница между разлучными фракциями керосина и дизельного топлива наблюдаются даже тогда, когда физические константы их строго соответствуют ГОСТ 463-77. В настоящее же время данный факт так же имеет место быть, несмотря на научное и техническое совершенствование процессов и оборудования.

При одинаковых молекулярных массах природа ароматических углеводородов, размера и положения парафиновых радикалов разветвленного и неразветвленного строения влияют в определенной мере на физические свойства сульфокислот. Поэтому для более конкретного применения в химической промышленности в настоящее время стараются подвергать сульфированию более узкие фракции или группы веществ.

При создании высокоэффективных моторных масел, отвечающих ужесточенным требованиям современной и перспективной техники, широко применяют присадки различного функционального назначения, в том числе моюще-диспергирующие присадки сульфонатного типа [18]. Наиболее перспективны нейтральные и высокощелочные алкилфенолсульфонаты щелочноземельных металлов, которые в малых концентрациях одновременно улучшают несколько свойств (моющих, диспергирующих противокоррозионных, антиокислительных) смазочных масел, что позволяет их использовать в композициях как многофункциональные присадки. Показано, что для получения указанных присадок с высокими характеристиками наиболее приемлемым сырьем являются олигомеры этилена фракции $C_{20} - C_{28}$ [19]. Однако при высокотемпературной олигомеризации этилена в присутствии катализатора триэтилалюминия наряду с указанной фракцией образуется около 28% фракции олефинов с 10–14 атомами углерода, которые являются непригодными для синтеза сульфонатных присадок, так как их соли недостаточно растворимы в смазочных маслах и неэффективны.

1.3 Моделирование пленочного течения

Вычислительная гидродинамика (Computational fluid dynamics – CFD) представляет собой часть гидромеханики, занимающуюся численным анализом и структурами данных для изучения и решения проблем, связанных с движением жидкостей. При помощи компьютеров выполняются расчеты, необходимые для моделирования потока жидкости и взаимодействия жидкости (а также газов) с поверхностями, определенными граничными условиями. Для решения самых сложных задач требуются высокопроизводительные суперкомпьютеры, которые

позволяют достичь оптимальных результатов. Текущие исследования сфокусированы на разработке программного обеспечения, обеспечивающего более точные и быстрые моделирования сложных сценариев, таких как трансзвуковые и турбулентные потоки. В начальной стадии проверки такого программного обеспечения часто используется экспериментальное оборудование, например, аэродинамические трубы. Для сравнения результатов также может применяться аналитический или эмпирический анализ конкретной проблемы. Окончательное тестирование обычно выполняется с использованием полномасштабных испытаний, включающих, например, летные испытания.

Применение CFD охватывает широкий спектр исследовательских и инженерных задач во многих областях и отраслях, таких как аэродинамика, аэрокосмический анализ, гиперзвуковые явления, моделирование погоды, естественные науки и экологическая инженерия, проектирование и анализ промышленных систем, биологическая инженерия, потоки жидкости и теплообмен, анализ работы двигателей и процессов сгорания.

Основой практически всех задач CFD являются уравнения Навье-Стокса, описывающие движение однофазных потоков (газовых или жидких). Для упрощения можно удалить вязкие члены и получить уравнения Эйлера. Дальнейшее упрощение путем исключения завихренности приводит к уравнениям потенциального потока, которые описывают безвихревое движение жидкости. Они широко применяются в аэродинамике для моделирования и анализа обтекания тел и аэродинамических профилей. Уравнения потенциального потока основаны на предположении, что жидкость является несжимаемой и не имеет вязкости, что позволяет упростить моделирование и ускорить расчеты. Но такой подход не совсем подходит для задач, решаемых в химической технологии.

Для решения уравнений Навье-Стокса или уравнений потенциального потока применяются различные численные методы, такие как метод конечных элементов, метод конечных разностей или метод конечных объемов. Эти методы разбивают пространство на сетку ячеек или элементов, на которых выполняются

вычисления. Численный анализ позволяет получить детальную информацию о характеристиках потока, таких как скорость, давление и распределение течения.

CFD является мощным инструментом для проектирования и оптимизации различных систем и устройств. Например, в авиации CFD используется для проектирования крыльев и корпусов самолетов с целью улучшения аэродинамических характеристик и уменьшения сопротивления. В автомобильной промышленности CFD применяется для оптимизации формы автомобилей с целью увеличения топливной экономичности и снижения аэродинамического шума. Помимо инженерных приложений, CFD также находит применение в научных исследованиях. Например, в климатологии CFD используется для моделирования атмосферных процессов и прогнозирования погоды. В медицинской науке CFD применяется для изучения потоков крови в сосудах и оптимизации дизайна искусственных клапанов и протезов.

Применительно к химической технологии для моделирования гидродинамических процессов, в том числе пленочного течения жидкости в основном используются два программных продукта «Aspen Plus» [20] и «Ansys Fluent» [21]. Для решения ряда узких задач могут использоваться SimFlow [22], SIMSCALE [23], FlowSquare [24], OpenFoam [25].

Так в настоящее время различными авторами представлено большое количество моделей на базе «Ansys Fluent» и статей на тему моделирования тонкопленочных испарителей, абсорберов, теплообменников [26–29], где наблюдается пленочное течение. Тонкопленочный испаритель обычно представляет собой вертикальный цилиндр с нагретыми стенками. Жидкость растекается по металлической стенке вверху и стекает по нагретой поверхности, где происходит испарение. Графически представленные результаты таких расчетов представлены на рисунках 5 и 6.

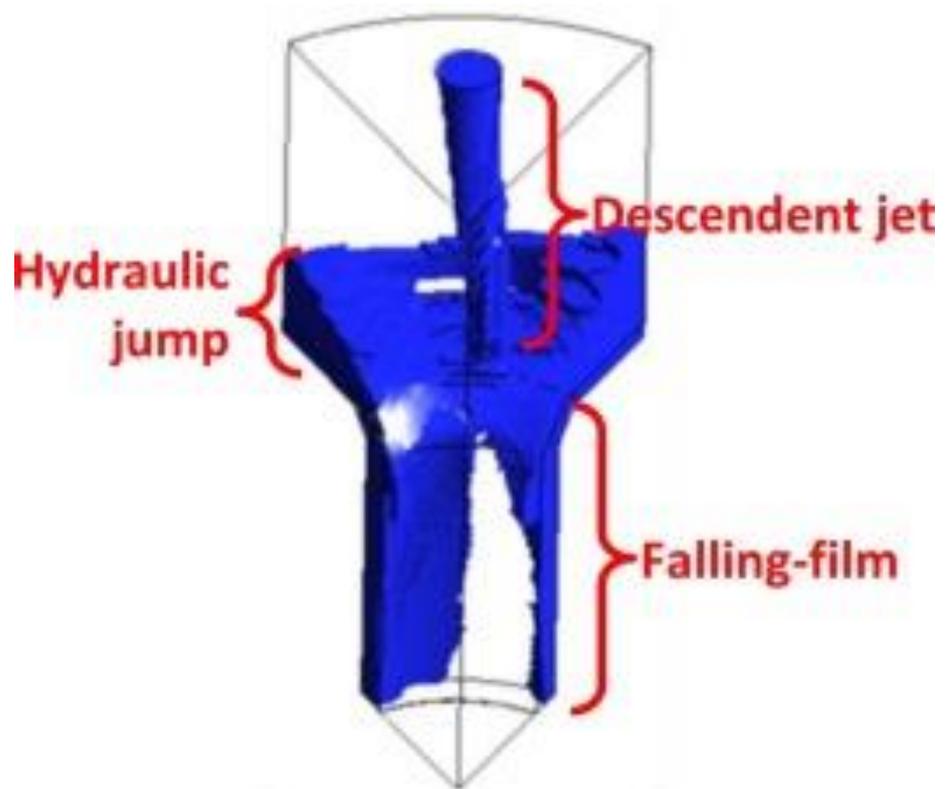


Рисунок 6 – Графические результаты моделирования пленочного течения в трубке [30]

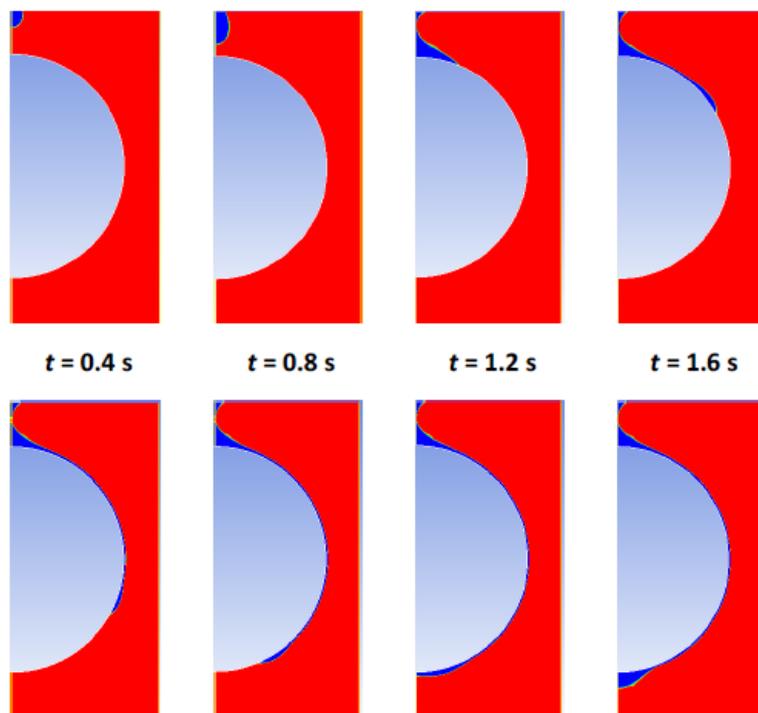


Рисунок 6 – Графические результаты моделирования обтекания цилиндра пленкой жидкости [31]

Тем не менее по ряду причин, данные продукты не могут в полной мере обеспечить весь требуемый функционал, например из-за отсутствия реагентов или продуктов в базах данных ПО.

Благодаря постоянному развитию вычислительной техники и методов анализа, CFD становится все более точным и эффективным инструментом для моделирования сложных гидродинамических явлений. В будущем ожидается дальнейшее совершенствование методов CFD и их более широкое применение в различных областях науки и промышленности.

2 Объект и методы исследования

Объектом исследования в данной работе является процесс сульфирования линейных бензолов. Данная технология применяется исключительно на некоторых НПЗ средней и крупной мощности. Одним из основных производителей алкилбензолсульфокислоты и сульфонола в России и СНГ является нефтеперерабатывающий завод в город Кириши - ООО «ПО Киришинефтеоргсинтез». Рассмотрим технологические схемы данного процесса и конструкцию сульфуратора, используемые в качестве основы для создания математической модели процесса.

2.1 Технологическая схема процесса алкилирования

Для комплексного подхода при разработке модели процесса необходимо понимать специфику входного сырья и его свойства. Для этого предлагается рассмотреть принципиальную технологическую схему процесса алкилирования бензола, предшествующую сульфированию ЛАБ и представленную на рисунке 7.

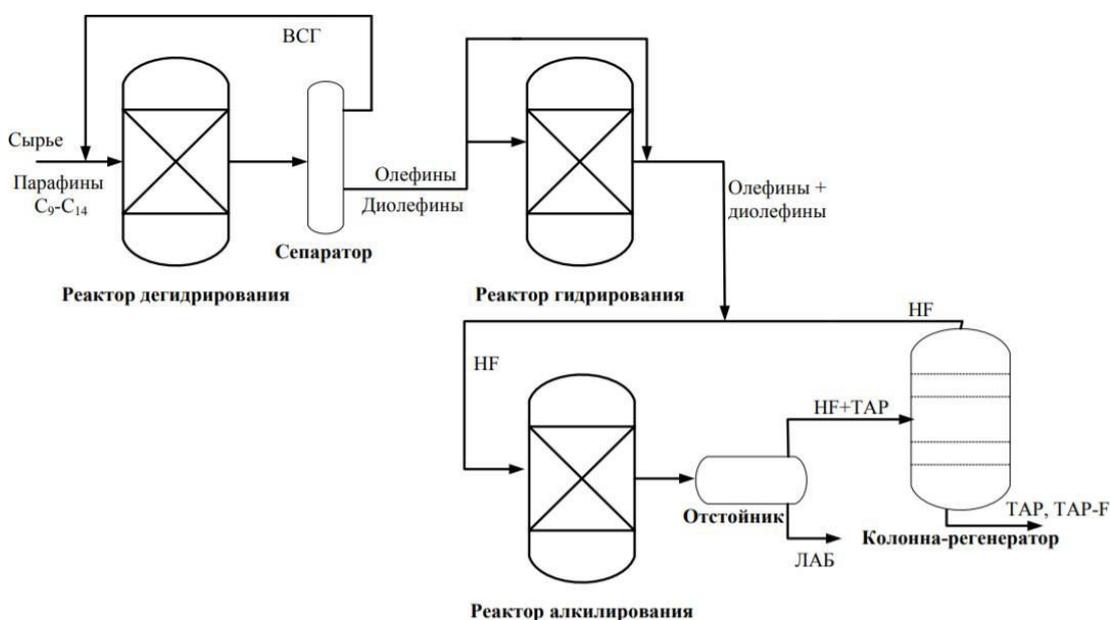


Рисунок 7 – Принципиальная технологическая схема процесса алкилирования бензола

Алкилирование бензола в данной технологической схеме происходит насыщенными углеводородами нормального строения с длинной цепи от 9 до 14 атомов углерода. Процесс является последовательностью этапов дегидрирования парафинов до диолефинов, гидрирование полученных диенов, алкилирование бензола [32].

Первый этап протекает в реакторе дегидрирования с применением платинового катализатора. Продуктами на данном тапе является водородсодержащий газ и диеновые углеводороды. Их разделение происходит в сепараторе. ВСГ направляется на рецикл в реактор дегидрирования, таким образом контролируется и поддерживается на заданном технологическом уровне выход диолефинов.

Диеновые углеводороды, полученные на предыдущем этапе, попадают после сепаратора в реактор, где происходит их селективное гидрирование на Ni содержащем катализаторе с целью получения олефинов нормального строения [33]. Затем происходит их смешение с жидким катализатором процесса алкилирования – плавиковой кислотой (HF).

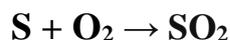
Смесь жидкого катализатора n-олефинов направляется в следующий реактор, туда же подается бензол. В ходе проводимого процесса алкилирования помимо образования линейных алкилбензолов идут побочные процессы, в результате которых образуются тяжелые ароматические соединения. Их присутствие в сырье сульфирования является крайне нежелательным, так как это ведет к образованию высоковязких продуктов. В результате происходит их накопление на стенках трубок реактора, что меняет режим течения пленки, увеличивает гидравлическое сопротивление и в целом снижает выход и качество целевого продукта [34]. Для снижения доли таких соединений в сырье сульфирования, выходящий из реактора алкилирования поток направляется в отстойник. В нем выделают смесь ЛАБ, а оставшуюся часть направляют на регенерацию в колонну, так как помимо тяжелых ароматических углеводородов в ней содержится отработанный катализатор.

2.3 Химизм процесса сульфирования

В данном разделе рассматривается химизм и условия протекания отдельных этапов процесса сульфирования ЛАБ.

2.3.1 Подготовка газовой смеси

Жидкая сера подвергается окислению в печи в условиях избытка осушенного воздуха, в результате чего образуется сернистый ангидрид SO_2 по следующей реакции:



Дальнейшее окисление происходит в присутствии катализатора содержащего оксид ванадия (V_2O_5), с образованием серного ангидрида:



Температура газовой смеси на входе в первый слой катализатора должна находиться в интервале 420-450 °С, а содержание сернистого ангидрида не превышать 7,5 % об. Именно на первом слое катализатора происходит окисление основной массы. При этом температура на входе газовой смеси также не должна быть ниже 420 °С. В таких условиях наблюдается резкое снижение скорости. Если же температура больше 450 °С, на выходе газовой смеси после первого слоя она будет превышать 600 °С, что отрицательно сказывается на выходе продукта и разрушает структуру катализатора, как следствие снижает его активность и срок службы.

В связи с наличием некоторого количества влаги в осушенном воздухе, SO_3 и H_2O взаимодействуют с образованием некоторого количества серной кислоты по следующей реакции:



Подготовленная газовая смесь с объемным содержанием серного ангидрида до 5,5 % об., поступает на сульфирование или абсорбцию.

2.3.2 Сульфирование

Органическое сырье с формулой $R-C_6H_5$, где R является радикалом молекулы n-парафина с числом углеродных атомов от 9 до 14, взаимодействует в реакторе с серным ангидридом, в результате чего образуется сульфоновая кислота по следующей реакции:



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



Кроме того, в процессе сульфирования образуются сульфоны. Их количество в сульфоновой кислоте мало зависит от параметров технологического режима и составляет около 1 % масс., но при превышении мольного соотношения $SO_3/ЛАБ$ более 1,08 происходит резкое увеличение скорости их образования. В АБСК сульфоны входят в несulfированную часть. Сульфоны имеют следующую структурную формулу:



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



2.3.3 Механизм реакции сульфирования

Механизм протекания реакции сульфирования по сей день остается не изученным полностью и существует несколько мнений.

Первое предположение заключается в электрофильном механизме замещения. На первой стадии механизма сульфирования ароматических соединений, в данном случае бензола, происходит электрофильная атака атома углерода молекулой SO_3 , что ведет к образованию промежуточных π - и σ -комплексов, которые представлены на рисунке 9.

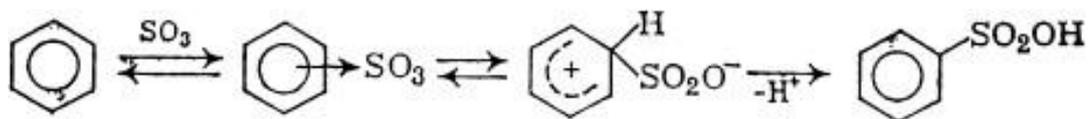


Рисунок 9 - Сульфирование по механизму электрофильного замещения

Данная реакция можно расценивать как реакцию первого порядка, с соответствующим достаточно быстрым ее протеканием. Скорость данной реакции зависит от диффузионных факторов и, в большей степени, от интенсивности перемешивания и отвода выделяющегося тепла [36].

Второе предположение является более распространенным. Известно, что реакция сульфирования начинается со взаимодействия SO_3 со смесью ЛАБ, что ведет к образованию алкилбензолсульфокислот и пиросульфокислот, как промежуточных соединений, что отражено на рисунке 10. На данном этапе, пиросульфоновая кислота реагирует со смесью ЛАБ (1) для получения 2-х моль АБСК (6), как показано на рисунке 10. Один из этих мольных эквивалентов можно рассматривать как замену одного потребляемого на первом этапе, а другой может рассматриваться как вклад в увеличение конверсии [37, 38].

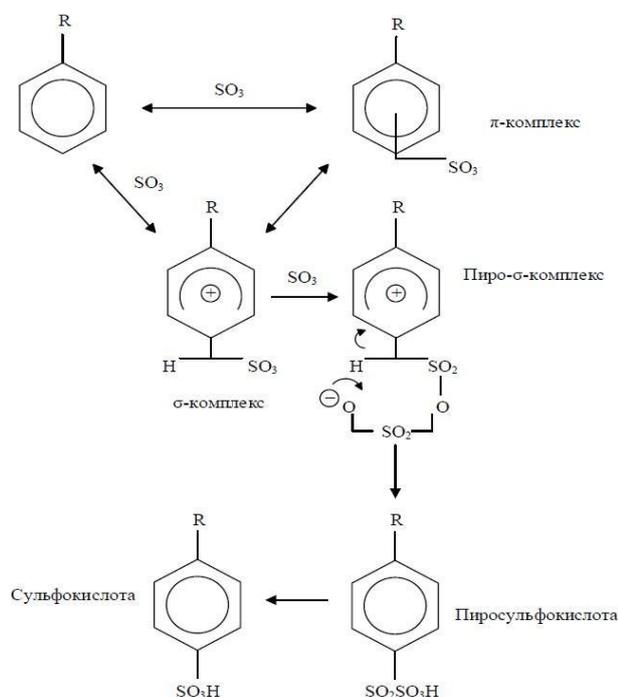


Рисунок 10 – Первичная реакция взаимодействия смеси ЛАБ с SO_3

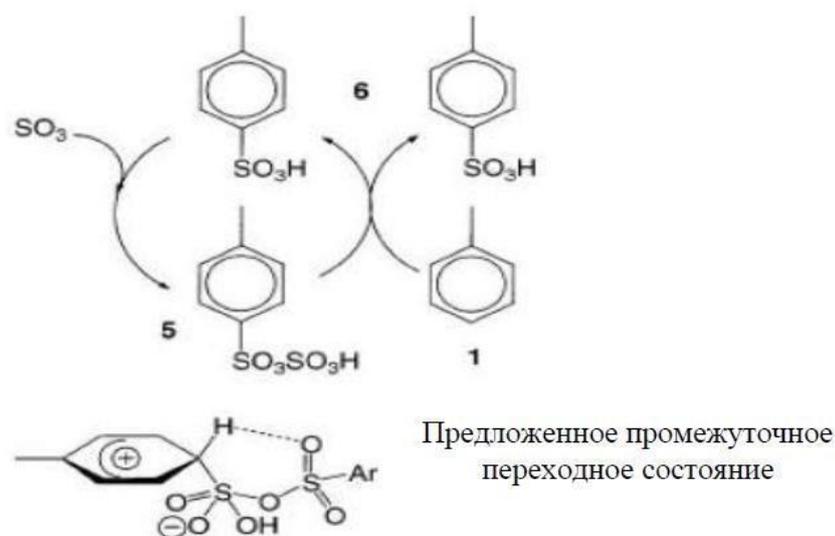


Рисунок 11 – Основная реакция: в качестве сульфлирующего агента выступает пиросульфоновая кислота

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

Промежуточные продукты, а именно ангидрид сульфоновой кислоты и пиросульфоновая кислота, затем вступают в реакцию со смесью ЛАБ или водой для получения целевого продукта – сульфоновой кислоты [39].

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение коммерческой привлекательности исследовательского проекта в рамках данной ВКР, оценка ресурсной, финансово-экономической, социальной базы, а также эффективности проекта.

Достижение цели обеспечивается решением задач:

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

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Нефтеперерабатывающая отрасль является частью нефтяной промышленности, которая составляет значительную долю экономики России. Так, согласно данным Министерства энергетики Российской Федерации за период март 2020 – март 2021 года на переработку было направлено немногим более 295 млн. тонн сырой нефти [53]. Что при цене нефти в 67 долларов США эквивалентно 144,9 млрд долларов США. Продуктом этой отрасли может быть не только топлива различных видов, но и нефтехимическое сырье.

Из углеводов получают широкий спектр продуктов – спирты, полимерные материалы и пластик, синтетический каучук и многие другие. Не исключением является алкилбензолсульфоукислота – продукт сульфирования линейных алкилбензолов. Преимущественно из нее получают сульфонаты

натрия и кальция, которые являются основой для производства синтетических моющих средств. Крупнейшим производством АБСК в России является ООО «ПО Киришинефтеоргсинтез». Исходя из применения данного продукта, потребителями являются производители СМС.

Целью проводимого научного исследования является разработка модели процесса получения АБСК, а одним из результатов – программное обеспечение, которое позволит провести качественный и количественный анализ закономерностей процесса, основывая на чем, могут быть выявлены «узкие места» технологии и разработаны рекомендации с целью повышения эффективности рассматриваемого процесса.

Проведем сегментирование рынка по приведенным признакам и составим карту сегментирования:

Таблица 4 – Карта сегментирования рынка

Потребитель	Вид Услуги		
	Продажа программного продукта	Оказание услуг по исследованию и оптимизации	Продажа в качестве тренажера
Малое производство			
Среднее производство			
Крупное производство			
Образовательные организации			
Проектные организации			

 – фирма А;

 – фирма Б;

 – фирма В.

В соответствии с таблицей, на существующем рынке существуют ниши, в которых не используются услуги с применением методов и программного обеспечения математического моделирования.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам. Важно реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов [54].

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

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

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

разрабатываемой системы. Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений представлена в таблице 5.

Таблица 5 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерий оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1.Выход продукта	0,25	5	5	4	1,25	1,25	1,0
2.Энергоемкость процессов	0,05	5	4	4	0,25	0,2	0,2
3.Качество продукта	0,3	4	4	3	1,2	1,2	0,9
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Цена	0,2	5	3	4	1	0,6	0,8
2.Финансирование научной разработки	0,1	2	5	4	0,2	0,5	0,4
Итого	1				3,9	3,75	3,3

ф – продукт проведенной исследовательской работы;

к1 – конкурент 1, «DESIDNI II»; к2 – конкурент 2, «КОМФОРТ»;

Оценочная карта позволяет сделать вывод, что продукт исследовательской работы относительно конкурентоспособен на российском рынке. Модель является чувствительной к составу сырья, адаптируется под изменение условий процесса. Цена на данный продукт значительно ниже цены, конкурентов. Однако, ее функциональность значительно ограничена, в то время как другие программные пакеты позволяют рассчитывать гораздо большее число процессов. Также не стоит забывать о высоком авторитете рассматриваемых компаний, который присутствуют на рынке не один год.

4.1.3 Диаграмма Исикавы

Диаграмма причины–следствия Исикавы (Cause–and–Effect–Diagram) – это графический метод анализа и формирования причинно–следственных

связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

Область применения диаграммы:

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

Выявленные факторы, влияющие на результат исследования – математическую модель представлены на рисунке 38. Наиболее вероятными являются – многообразие переменных (факторов) в математической модели (возможны коллизии и неправильный взаимоучет влияния), отсутствие требуемых знаний у исполнителя. Главным образом все возможные проблемы сводятся к одному – некорректному расчету в математической модели и получение несоответствующего действительности результата.

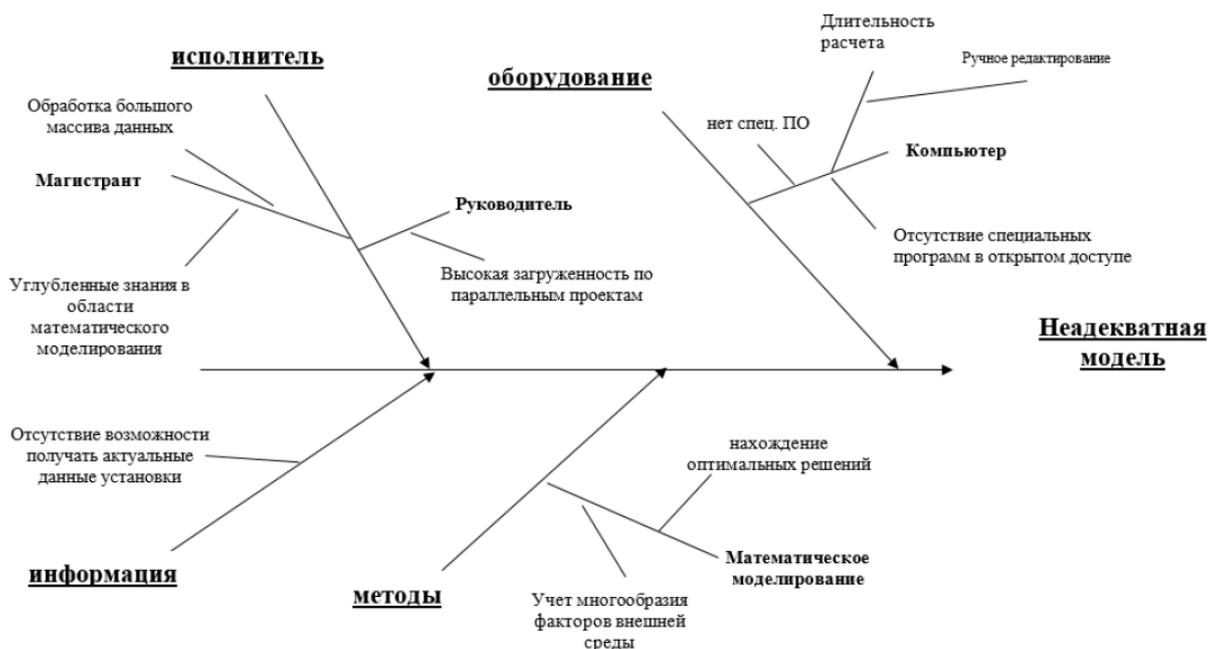


Рисунок 38 – Диаграмма Исикава

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. Для этого необходимо заполнить специальную форму, содержащую показатели о степени

проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта – таблица 6.

Таблица 6 – Оценка степени готовности научного 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	5	5
4	Определена товарная форма научно–технического задела для представления на рынок	5	4
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	3	3
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	3	3
7	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	4
8	Разработан бизнес–план коммерциализации научной разработки	3	3
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	3
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	4
11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	4	3
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	4
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	4
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	4
15	Проработан механизм реализации научного проекта	5	4
	Итого баллов	59	56

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 $B_{\text{сум}}$ по обоим направлениям попало в интервал от 59 до 45, следовательно, данная разработка считается перспективной.

Успешное развитие производства линейного алкилбензола (ЛАБ) составит хорошую конкуренцию зарубежным разработкам. Для этого необходимо вкладывать большие ресурсы в проект.

4.1.5 Выбор предпочтительного метода коммерциализации

Рассмотрев все предложенные методы коммерциализации, наиболее эффективным для данной разработки является инжиниринг. Имеется предприятие по производству ЛАБ ООО «Киришинефтеоргсинтез» (КИНЕФ), заинтересованные в разработке новых технологий, а также усовершенствование технологического процесса.

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

4.2 Планирование исследовательских работ в рамках ВКР

4.2.1 Цели и результаты проекта

Целью данного проекта является установление влияния свойств сырья и технологических параметров процесса на выход и качество линейного алкилбензола и представлена в таблице 7.

Таблица 7 – Цели и результаты проекта

Цели проекта	Разработка комплексной многопараметрической математической модели сульфирования.
Ожидаемые результаты проекта	Разработка рекомендаций по оптимизации технологического режима существующего процесса. Разработка технологического режима для иного вида сырья в существующей установке.
Критерии приемки результатов проекта	Адекватность полученной математической модели (минимальное расхождение между расчетными и экспериментальными значениями) должна составлять не более 5 %.
Требования к результату проекта	Результаты расчета с применением математической модели должны учитывать процессы массопереноса.
	В математической модели должны заложены побочные продукты: серная кислота, вода, высоковязкие сульфоны и ангидриды алкилбензол сульфокислоты. Их физико-химические свойства должны учитываться не только в конечном продукте, но и в самом процессе.
	Математическая модель должна воспроизводить режим работы реальной установки во всем рабочем диапазоне регулируемых параметров.
	Результаты расчета должны выводиться удобным для последующего анализа образом

4.2.2 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта. ИСР по проекту представлена на рисунке 39.

В соответствии с определенным перечнем работ строится календарный план работ (таблица 8).

Таблица 8 – Календарный план работ

№ п/п	Название	Длит., дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1.1	Составление и утверждение технического задания	7	07.02.2022	13.02.2022	Руководитель
1.2	Ознакомление с ТЗ и направлением работы	7	14.02.2022	20.02.2022	Инженер
1.3	Изучение исходных материалов по теме исследования	21	21.02.2022	13.03.2022	Инженер
1.4	Проведение теоретических исследований, изучение литературы	140	14.03.2022	31.07.2022	Руководитель, Инженер
2.1	Построение структуры математической модели	31	01.08.2022	31.08.2022	Руководитель, Инженер
2.2	Подбор, проверка расчетных формул	18	01.09.2022	18.09.2022	Инженер
2.3	Программная реализация модели	112	19.09.2022	30.12.202	Руководитель, Инженер
3.1	Проведение расчетов в модели	28	09.01.2023	05.02.2023	Инженер
3.2	Проверка полученных результатов расчета, отладка ошибок	28	06.02.2023	05.03.2023	Руководитель, Инженер
4.1	Проведение варьирования исходных параметров технологического режима в модели	26	06.03.2023	31.03.2023	Инженер
4.2	Обобщение полученных закономерностей	16	01.04.2023	16.04.2023	Руководитель, Инженер
4.3	Выработка оптимизационных решений	14	17.04.2023	30.04.2023	Руководитель, Инженер
4.4	Оформление результатов работы	21	01.05.2023	21.05.2023	Инженер
	Итого	469			

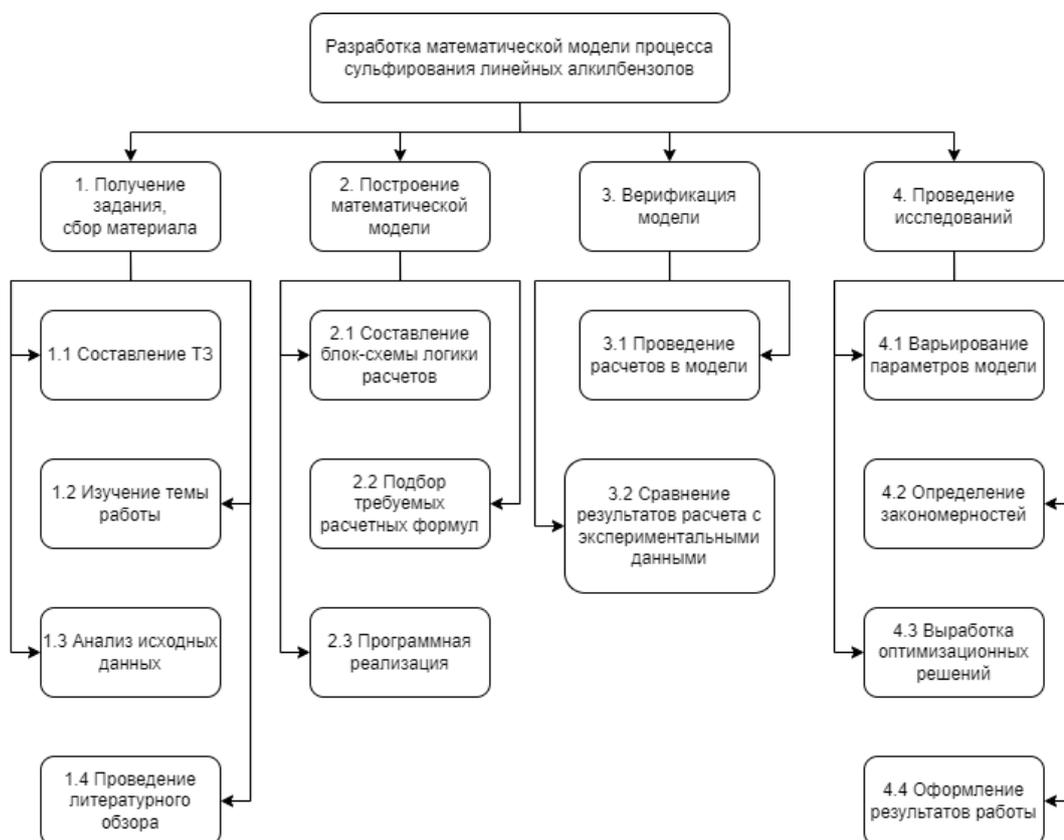


Рисунок 39 – Иерархическая структура работ по проекту

4.2.3 Определение трудоемкости выполнения работ

Рассчитаем ожидаемую трудоемкость выполнения работ по формуле:

$$t_{ожi} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}$$

где $t_{ожi}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

$t_{\min i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн. i t_{\max}

Для приведенных в таблице 8 этапов работы рассчитаем значения трудоемкости:

$$t_{ож1} = \frac{3*5+2*9}{5} = 6,6 \text{ чел.-дн.}$$

Для оставшихся 13 этапов расчеты аналогичны. Результаты расчетов отражены в таблице 9.

Рассчитаем продолжительность каждого из этапов выполнения работ по формуле:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}$$

Где T_{pi} - продолжительность одной работы, раб.дн.;

$Ч_i$ - численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Для полученных значений трудоемкости рассчитаем продолжительность работы:

$$T_{p1} = \frac{6,6}{1} = 6,6 \text{ раб.дн.}$$

Для оставшихся 13 этапов расчеты аналогичны. Результаты расчетов отражены в таблице 9.

4.2.4 Разработка графика проведения научного исследования

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} * k_{кал}$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

$k_{кал}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарной определяется по следующей формуле и равен:

$$k_{кал} = \frac{T_{кал}}{T_{раб}} = \frac{365}{299} = 1,22$$

где $T_{кал}$ – количество календарных дней в году;

$T_{раб}$ – количество рабочих дней в году;

Рассчитаем продолжительность каждого этапа работы

$$T_{K_1} = 6,6 * 1,22 = 8,1 = 9$$

Для оставшихся 16 этапов расчет аналогичен. Результат расчетов представлен в таблице 9.

Таблица 9 - Временные показатели проведения научного исследования

№ п/п	t _{ожі} , чел.- дн.	T _{р1} , раб.дн	T _{к1} , дн.	№ п/п	t _{ожі} , чел.- дн.	T _{р1} , раб.дн	T _{к1} , дн.
1.1	6,6	6,6	9	3.1	27,2	27,2	34
1.2	6,6	6,6	9	3.2	27,2	27,2	17
1.3	21,4	21,4	27	4.1	24	24	2
1.4	141,2	141,2	86	4.2	15,8	15,8	10
2.1	30,8	30,8	20	4.3	13,6	13,6	9
2.2	16,8	16,8	21	4.4	21,4	21,4	27
2.3	102	102	64				

Таблица 10 - Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№	Продолжительность выполнения работ																																															
	Фев			Мар			Апр			Май			Июнь			Июль			Авг			Сен			Окт			Ноя			Дек			Янв			Фев			Мар			Апр			Май		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3			
1.1	■																																															
1.2		■																																														
1.3			■	■	■	■																																										
1.4				■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■																																	
2.1																■	■	■	■	■	■																											
2.2																			■	■	■	■	■	■	■	■	■																					
2.3																			■	■	■	■	■	■	■	■	■																					
3.1																									■	■	■	■	■	■																		
3.2																												■	■	■	■	■	■															
4.1																															■	■	■	■	■	■												
4.2																																					■	■	■	■	■	■						
4.3																																								■	■	■	■	■	■			
4.4																																											■	■	■			
	■ – Инженер, Тр =448 дней;												■ – руководитель, Тр = 337 дней.																																			

4.2.5 Бюджет проводимого исследования

В процессе формирования бюджета затраты группировались по статьям расходов: материальные, заработная плата и другие расходы. Данные отражены в приложении.

Исполнение 1, 2, 3 являются различными наборами требуемого оборудования, перечисленного в приложении Д. Так исполнение 2 отличается от исполнения 1 более производительным и дорогим персональным компьютером, более качественным принтером, упаковка бумаги большего объема, флеш накопителем большего объема. Отличие 3 исполнения заключается в минимально производительном компьютере, большим количеством бумаги и канцелярских принадлежностей в наборе, отсутствует лицензионное программное обеспечение. В качестве альтернативы в таком случае используются бесплатное ПО, например: «Open Office» [55], операционная система «Linux», среда разработки «Pydev» [56].

Зарботная плата работникам является такой же неотъемлемой частью затрат проекта, как и затраты на материально-ресурсную базу исследования. Она включает в себя основную заработную в т.ч. премии и доплаты, а также дополнительную:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}$$

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

Основная заработанная плата работника может быть найдена по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} * T_p$$

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн в год,

$Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб. в день.

Среднедневная заработная плата в свою очередь находится как:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_M * M}{F_d}$$

Z_M – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение.

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

Для определения действительного годового фонда рабочего времени составим баланс рабочего времени, отраженный в таблице 11.

Таблица 11 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней: - выходные дни	44	48
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени: - отпуск	56	28
- невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	275

Месячный оклад работника находится умножением заработной платы $Z_б$, руб. по тарифной ставки на районный коэффициент $k_p = 1,3$. Расчет основной заработной платы приведен в таблице 12.

Таблиц 12 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$Z_б$, руб.	k_p	Z_M , руб.	$Z_{\text{дн}}$, руб./дн	T_p , раб.дн.	$Z_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	39300 [57]	1,3	51090	2239,0	337	754544,3
Инженер	26200 [58]	1,3	34060	1362,4	448	610355,2
Итого						1364899,5

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10 - 15% от основной заработной платы, работников. Примем этот показатель равным 10, тогда общие затраты на заработную плату составят:

Таблиц 13 – Расчет заработной платы

Заработная плата	Руководитель	Инженер
Основная, руб	754544,3	610355,2
Дополнительная, руб	75454,4	61035,5
Итого для работника, руб	829998,4	671390,7
Всего, руб	1501389,1	

Отчисления во внебюджетные фонды и накладные расходы составляют не малую часть расходов. Отчисления во внебюджетные фонды согласно 34 главе налогового кодекса Российской Федерации составляют 30 % [59], для накладных расходов этот показатель примем равным 16 %. Тогда общие затраты на проведение НТИ составят 922 715 руб., что отражено в таблице 14.

Таблица 14 – Бюджет НТИ

Статья расходов	Сумма, руб.		
	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Материально-ресурсная база	156447,00	173374,00	51180,00
Основная заработная плата	1364899,50	1364899,50	1364899,50
Дополнительная заработная плата	136489,90	136489,90	136489,90
Отчисления во внебюджетные фонды	450416,73	450416,73	450416,73
Накладные расходы	240222,25	240222,25	240222,25
Итого	2348475,38	2365402,38	2243208,38

4.3 Оценка эффективности исследования

Определение эффективности исследования проводится расчетом интегрального показателя. Для этого необходимо вычислить средневзвешенные величины финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

$$I_{\Phi}^i = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}}$$

I_{Φ}^i – интегральный финансовый показатель разработки;

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

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

Расчеты интегрального финансового показателя для каждого исполнения приведены в таблице. Исполнения разработки соответствуют исполнениям материальной базы в главе 4.2.4 и приложении. При этом за счет более производительного оборудования в исполнении 2 по сравнению с исполнением 1 появляются дополнительные возможности для работы над качеством и скоростью разрабатываемого ПО. В случае исполнения 3 в процессе разработки появляется ряд неудобств и ограничений, сказывающихся на конечный продукт.

Таблица 15 – Расчет интегральных финансовых показателей

Исполнение	1	2	3
I_{Φ}^i	0,98	1	0,87

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

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i – бальная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания, таблица 16.

Таблица 16 – Сравнительная оценка исполнений проекта

Объект исследования / Критерии	Весовой коэффициент	Текущий проект	Исп. 2	Исп. 3
1. Адекватность разработки	0,2	5	5	3
2. Простота применения	0,2	5	5	3
3. Энергоэкономичность	0,1	4	5	2
4. Потенциал экономического эффекта	0,5	5	5	3
Итого	1	19	20	11

Расчеты интегрального показателя ресурсоэффективности для каждого исполнения приведены в таблице 17.

Таблица 17 – Расчет интегральных показателей ресурсоэффективности

Исполнение	1	2	3
I_{pi}	4,9	5	2,9

Для расчета сравнительной эффективности разработки необходимо воспользоваться следующими формулами:

$$I_{\varepsilon} = \frac{I_{pi}}{I_{\Phi}^i}$$

$$\varepsilon = \frac{I_{\varepsilon}^i}{I_{\varepsilon}^j}$$

где I_{ε} – интегральный показатель эффективности

ε – сравнительная эффективность проекта;

Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения разработки приведена в таблице 18.

Таблица 18 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения разработки

Исполнение	Текущий проект	Исп. 2	Исп. 3
Интегральный показатель финансовой эффективности	0,98	1	0,87
Интегральный показатель ресурсоэффективности	4,9	5	2,9
Интегральный показатель эффективности	5	5	3,33
Сравнительная эффективность проекта	1	1	0,666

Вывод: Сравнение эффективности текущей разработки с альтернативными вариантами показало, что текущий вариант позволяет достичь того же результата при меньших финансовых затратах. Следовательно ее можно назвать финансово и ресурс эффективной.

5 Социальная ответственность

Объектом исследования данной работы является процесс сульфирования линейных алкилбензолов (ЛАБ). Продуктом процесса является алкилбензолсульфокислота (АБСК), которая в свою очередь служит сырьем для производства алкилбензолсульфонатов — компонентов значительной доли потребительских синтетических моющих средств, а также поверхностно-активных веществ, использующихся в промышленности.

Данная дипломная работа выполнялась в аудитории 133 2-го корпуса Томского политехнического университета, что обусловлено выбранным методом исследования — математического моделирования с применением ЭВМ. Аудитория рассчитана на 13 рабочих мест, каждое из которых оборудовано персональным компьютером (далее ПЭВМ). Рабочая зона — помещение аудитории, оборудованное системами кондиционирования воздуха и отопления. Освещение рабочего места представляет собой сочетание естественного света из окон и искусственного.

Область применения результатов работы — промышленные предприятия нефтехимической отрасли, осуществляющие процесс сульфирования ЛАБ серным ангидридом.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Рабочее место в аудитории 133, 2 корпуса Томского Политехнического Университета должно соответствовать ГОСТ 12.2.032-78 [60]. Основные положения и принципы правового регулирования трудовых отношений между сотрудником и работодателем отражены в "Трудовом кодексе Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 19.12.2022, с изм. От 11.04.2023). В нем устанавливаются требования о режиме рабочего времени, отдыха, отпуска; к оплате и нормированию труда; гарантиях и компенсациях, связанные с трудовой деятельностью; об охране труда; иных правах и обязанностях работника и организации [61].

Рассматриваемый вид деятельности можно расценивать как работу в офисе. При соблюдении всех требований условий труда их можно классифицировать к 1 классу – оптимальному, при которых воздействие на работника вредных и (или) опасных производственных факторов отсутствует или уровни воздействия, которых не превышают уровни, установленные нормативами [62]. Продолжительность рабочего дня в таком случае не должна превышать 40 часов в неделю [61], за исключением лиц в возрасте до 16 лет, 16-18 лет, инвалидов I и II группы. Для них продолжительность рабочего дня не должна превышать 24, 35, 35 часов соответственно [61].

Ранее, требования в рабочем месте, оснащённому ПЭВМ, предъявляются СанПиНом 2.2.2/2.4.1340-03 «Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы». В настоящее время действительным считаются требования, изложенные в СП 2.2.3670-20 "Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда".

Площадь на одно постоянное рабочее место пользователей персональных компьютеров на базе электронно-лучевой трубки, должна составлять не менее 6 м, на базе плоских дискретных экранов (жидкокристаллические, плазменные) - не менее 4,5 м.

Оснащение светопроницаемых конструкций и оконных проёмов должно позволять регулировать параметры световой среды в помещении. Естественный свет должен падать сбоку, желательно с левой стороны от рабочего места.

На рабочем месте, предназначенном для работы в положении сидя, рабочие столы должны иметь пространство для размещения ног высотой не менее 600 мм, глубиной - не менее 450 мм на уровне колен и 600 мм на уровне стоп, шириной не менее 500 мм.

Клавиатура должна располагаться на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, со стороны работника. Также рекомендуется располагать плоскость экрана монитора ниже уровня глаз пользователя под углом 15°. При этом расстояние от глаз до монитора должно составлять 600-700 мм.

Таблица 19 – Требования к организации рабочего места при работе с ПЭВМ

Требование	Нормативное значение	Фактическое значение, соответствие
Высота рабочей поверхности	Регулируемая высота (680-800 мм) Нерегулируемая высота (725 мм)	Нерегулируемая высота, (725 мм), соответствует
Пространство для ног	600x500 мм	Соответствует
Расположение монитора	600-700 мм	650, положение и наклон регулируются, соответствует
Рабочий стул	Регулировка высоты, угла наклона спинки	Нерегулируемый стул, не соответствует

Из таблицы 19, видно, что для соблюдения норм требуется замена стульев на регулируемые. Рабочее место в аудитории 133, 2 корпуса Томского Политехнического Университета соответствует требованиям ГОСТ 12.2.032-78 [60].

5.2 Производственная безопасность

Специфика условий труда при разработке математической модели исследуемого процесса обусловлена работой с ПЭВМ и умственной деятельностью в помещении, что непосредственно отражается на опасных и вредных факторах, оказывающих влияние на работника.

В соответствии с «ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация» [63], учитывая особенности условий труда, были выделены следующие факторы (таблица 20).

Таблица 20 - Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этап работы		Нормативные документы
	Разработка	Эксплуатация	
1. Отклонение показателей микроклимата в закрытом помещении	+	+	ГОСТ 12.1.003-2014 «Шум. Общие требования безопасности» [64]
2. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	ГОСТ Р 55710-2013. Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений [65].
3. Отклонение показателей микроклимата в закрытом помещении	+	+	СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. [66]
4. Поражение электрическим током	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. «Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.» [67]
5. Зрительное напряжение	+	+	СП 2.2.3670-20 "Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда"[68]
6. Нервно-психические перегрузки, монотонность трудового процесса	+	+	Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 19.12.2022, с изм. от 11.04.2023) [69]

5.2.1 Повышенный уровень шума

При работе с ЭВМ в аудитории 133, 2 корпуса ТПУ характер шума – широкополосный с непрерывным спектром более 1 октавы. Шум в аудитории возникает при работе вентиляторов охлаждения ПЭВМ, кондиционера, а также источником служит шум с улицы.

Повышенный шум на рабочем месте оказывает вредное влияние на организм работника в целом, вызывая неблагоприятные изменения в его органах и системах. Длительное воздействие такого шума способно привести к развитию

у работника потери слуха, увеличению риска артериальной гипертензии, болезней сердечно-сосудистой, нервной системы и др. [67] Нормируемый показатель уровня шума на рассматриваемом рабочем месте не должен превышать 80 дБА. Фактические показатели шума варьируются в пределах 30-55 дБА в зависимости от количества работающих компьютеров, кондиционера, открытых окон.

Рекомендуемые мероприятия по снижению негативного воздействия - проведение периодического контроля шумовых характеристик ПЭВМ и в случае необходимости проведение профилактических, ремонтных работ, а именно очистка системных блоков от пыли, замена вентиляторов.

Таким образом условия труда по шумовому фактору соответствуют допустимым [70, 64].

5.2.2 Недостаточная освещенность рабочей зоны

В аудитории 133, 2 корпуса ТПУ имеется совмещенное освещение, которое предполагает комбинацию естественного освещения от окна с искусственным от ламп накаливания.

Недостаточная освещенность рабочей зоны помещения, оборудованной ПЭВМ – немаловажная причина снижения эффективности труда в следствии нарушения работы зрительного анализатора, что в долгосрочном периоде негативно отражается на здоровье зрительной системы работника.

При работе с персональным компьютером освещение должно быть общим и равномерным, если трудовая деятельность подразумевает дополнительно работу с документацией, то к общему освещению должны быть установлены светильники или иные устройства местного освещения.

Согласно рекомендациям, окна в помещениях с ПЭВМ должны быть расположены таким образом, чтобы естественный свет падал сбоку, желательно с левой стороны от рабочего места.

В таблице 21 представлены нормы освещенности рабочих мест.

Таблица 21 – Нормы освещенности рабочих мест [63]

Наименование помещений/вида деятельности	$E_{экс}$, лк	U_0 , не менее	R , не более	R_a , не более	K_n , не более
Производственные процессы с дистанционным управлением	50	0,4	-	20	-
Процессы с частичным применением ручного труда	150		28	40	
Постоянная ручная работа	300	0,6	22	80	20
Лаборатория	500		16		10

При недостатке на рабочем месте естественного света можно выполнить следующие мероприятия [63]:

- уменьшение времени пребывания работника в данном помещении;
- улучшение условий, создаваемых искусственным освещением;
- анализ степени загрязнения стекол в светопроемах, их чистка и последующие контрольные измерения;
- косметический ремонт помещения с использованием светлых отделочных материалов.

Условия труда по освещённости рабочей зоны советуют допустимым [70].

5.2.2.1 Расчет системы искусственного освещения рабочей зоны

Приведем расчет искусственного освещения для офисного помещения, в котором осуществляется разработка ПО. Площадь рассматриваемого помещения 30,5 м², ширина $A = 5$ м, длина $B = 6,1$ м, высота $H = 5$ м.

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим световой поток, отражённый от потолка и стен. Примем для использования светильник типа ОД-2-8

Световой поток лампы Φ определяется по формуле:

$$\Phi = \frac{E_H * S * K_3 * Z}{N_L * \eta} = \frac{400 * 30,5 * 1,5 * 1,1}{4 * 0,9} = 5591,7 \text{ лм}$$

где E_n – нормативная освещённость по СП 52.13330.2016, для рассматриваемого помещения 400 лк; S – площадь освещаемого помещения, м²; K_z – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение; Z – коэффициент неравномерности освещения, $N_{л}$ – число ламп в помещении; η – коэффициент использования светового потока.

Тогда потребуется 2 открытых двухламповых светильников ОД 2-125 с лампами ЛБ мощностью 8 Вт и световым потоком 5200 лм.

Свес светильника принимаем 1 м, тогда высота подвеса будет равняться 3,5 метра что равно наименьшей допустимой высоты подвеса над полом, 3,5 м для двухламповых светильников ОД при одиночной установке или при непрерывных рядах из одиночных светильников.

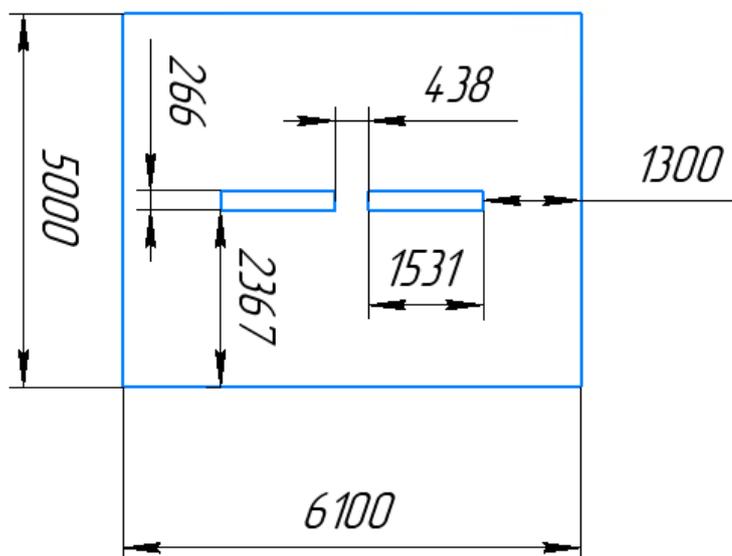


Рисунок 40 – Схема размещения светильников в помещении

Расстояние между светильниками L определяется как:

$$L = 1.1 * 3.5 = 3.85 \text{ м}$$

Тогда схема расположения светильников с учетом габаритов светильников и размера помещения может быть принята в соответствии с рисунком 40.

Таким образом номинальная мощность осветительной системы с учетом КПД ламп 75 % составит 426,7 Вт, а рассчитанная система освещения удовлетворяет все нормы и рекомендации СП 52.13330.2016 и ГОСТ Р 55710-2013.

5.2.3 Отклонение показателей микроклимата в закрытом помещении

Микроклимат определяется действующими на организм человека показателями температуры, влажности и скорости движения воздуха. Длительное воздействие на человека неблагоприятных показателей микроклимата ухудшает его самочувствие, снижает производительность труда и приводит к заболеваниям, поэтому в организации должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата, установленные СанПиН 2.2.4.548-96 «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений» [66]. Они представлены в таблице 22:

Таблица 22 - Оптимальные и допустимые величины показателей микроклимата на рабочих местах производственных помещений

Оптимальные значения характеристик микроклимата				
Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	22 – 24	21 – 25	40 – 60	0,1
Теплый	23 – 25	22 – 26	40 – 60	0,1
Допустимые значения характеристик микроклимата				
Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность воздуха, %	Скорость движения воздуха, м/с
Холодный	20 – 25	19 – 26	15 – 75	0,1
Теплый	21 – 28	20 – 29	15 – 75	0,1 – 0,2

5.2.4 Поражение электрическим током

Для предотвращения поражения электрическим током, где размещаются рабочее место с ЭВМ в аудитории 133, 2 корпуса ТПУ, оборудование оснащено защитным заземлением, зануление; предусмотрены предохранительные устройства; токопроводящие кабели заизолированы. По опасности поражения электрическим током рабочая зона относится к первому классу – помещения без повышенной опасности (сухое, хорошо отапливаемое, помещение с токонепроводящими полами, с температурой 18-20°, с влажностью 40-50%) [71].

Основными непосредственными причинами электротравматизма, являются:

- непосредственное прикосновение к открытым токоведущим частям и проводам;
- прикосновения к токоведущим частям, изоляция которых повреждена; прикосновение к металлическим частям оборудования, случайно оказавшихся под напряжением;
- касания к токоведущим частям при помощи предметов с низким сопротивлением изоляции;
- отсутствие или нарушение защитного заземления; ошибочная подача напряжения;
- воздействия электрического тока через дугу.
- воздействие шарового напряжения.

Мерами защиты от воздействия электрического тока на человека в рассматриваемом случае являются изолирующие устройства и покрытия, устройства защитного заземления, устройства автоматического отключения, предохранительные устройства, которые уже предусмотрены в аудитории. От исправности средств реализации данных мер напрямую зависит безопасность работника. Помимо технических мер защиты должны приниматься следующие меры: своевременное проведение инструктажей по электробезопасности для рабочего персонала, к работе допускаются сотрудники, прошедшие инструктаж и имеющие допуск к работе.

Условия труда рабочей зоны соответствуют установленным правилам электробезопасности [71].

5.2.5 Зрительное напряжение

Работа на ПК сопровождается постоянным и значительным напряжением функций зрительного анализатора. Одной из основных особенностей является иной принцип чтения информации, чем при обычном чтении. Чтобы снизить зрительное напряжение нужно соблюдать визуальные параметры экрана (таблица 23).

Таблица 23 – Допустимые визуальные параметры устройств отображения информации

Параметры	Допустимые значения
Яркость белого поля	Не менее 35 кд/кв.м
Неравномерность яркости рабочего поля	Не более $\pm 20\%$
Контрастность (для монохромного режима)	3:1
Пространственная нестабильность изображения (непреднамеренное изменение положения фрагментов изображения экрана)	Не более $2 \cdot 10L - 4L$, где L – расстояние наблюдения, м

5.2.6 Нервно-психические перегрузки

Нервно-психические перегрузки – совокупность таких сдвигов в психофизиологическом состоянии организма человека, которые развиваются после совершения работы и приводят к временному снижению эффективности труда. Состояние утомления (усталость) характеризуется определенными объективными показателями и субъективными ощущениями.

Нервно-психические перегрузки подразделяются на следующие:

- умственное перенапряжение;
- перенапряжение анализаторов;
- монотонность труда;
- эмоциональные перегрузки.

При первых симптомах психического перенапряжения необходимо:

- дать нервной системе расслабиться;
- рационально чередовать периоды отдыха и работы;
- начать заниматься спортом;
- ложиться спать в одно и то же время;
- в тяжелых случаях обратиться к врачу.

Естественно, что полностью исключить провоцирующие факторы из жизни вряд ли удастся, но можно уменьшить их негативное воздействие, давая нервной системе необходимый отдых.

5.3 Экологическая безопасность

На данном рабочем месте выявлен предполагаемый источник загрязнения окружающей среды, который связан с образованием отходов при поломке компьютерной и оргтехники, влияющих на литосферу. Особо должное внимание стоит обращать на литиевые аккумуляторы и батарейки широко, данные источники энергии могут представлять серьезную угрозу для окружающей среды и здоровья человека, если они не утилизируются должным образом. Литий является весьма реактивным металлом, который может вызвать пожар или взрыв при неправильном хранении или утилизации. Кроме того, при разложении литиевых батарей и аккумуляторов в окружающей среде, таких как свалки, отходы могут попадать в почву и воду.

Вышедшее из строя ПЭВМ и сопутствующая оргтехника относится к IV классу опасности и подлежит специальной утилизации. Для оказания наименьшего влияния на окружающую среду, необходимо проводить специальную процедуру утилизации ПЭВМ и оргтехники, при которой более 90% отправится на вторичную переработку и менее 10% будут отправлены на свалки. При этом она должна соответствовать процедуре утилизации ГОСТ Р 53692-2009 «Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов» [72].

В ходе любой трудовой деятельности так или иначе вырабатывается бытовой мусор (канцелярские, пищевые отходы, искусственные источники освещения). Этот вид отходов может оказывать негативное воздействие на окружающую среду и требует специальной утилизации или переработки. Для этого необходимо разделить отходы на соответствующие категории в соответствии с их классом опасности и провести процедуру утилизации или переработки согласно установленным нормам и правилам.

5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

К возможным чрезвычайным ситуациям на рассматриваемом рабочем месте можно отнести внезапное пожар, взрыв с частичным или полным обрушением здания, аварии систем электро- и водоснабжения.

Аудитория 133, 2 корпуса ТПУ оснащенная ПЭВМ относится к категории «В» по взрывопожарной и пожарной опасности, рабочая зона относится к категории П-Ша [73, 74].

Основной причиной пожара на рабочем месте могут послужить: короткое замыкание в электросети или технике, неисправность устройства компьютера, повреждение изоляции электросети, попадание влаги на незаизолированные части оборудования, небрежная работа с ПЭВМ.

Согласно ГОСТ 12.1.004-91 «Пожарная безопасность. Общие требования», при работе с компьютером необходимо соблюдать следующие нормы пожарной безопасности [75]:

- запрещено превышать допустимое количество электропотребителей;
- не допускается работа с электротехникой при ее неисправности или неисправности электропроводки;
- помещение должно быть снабжено средствами пожаротушения;
- установить количество, размеры и соответствующее конструктивное исполнение эвакуационных путей и выходов, а также обеспечить беспрепятственный доступ к ним.

В случае возникновения пожара в здании автоматически срабатывают датчики пожаротушения, и звуковая система оповещает всех сотрудников о немедленной эвакуации из здания и направляются на выход в соответствии с планом эвакуации при пожарах и других ЧС, размещенных на стенах в корпусе. Компьютерный класс оснащен огнетушителем ОУ-3, ближайшие дополнительные средства пожаротушения находятся в учебной лаборатории, размещенной в 129 аудитории. В случае возникновения незначительного возгорания необходимо обесточить электросеть помещения отключением питания в электрощите, расположенным справа у входа в аудиторию и воспользоваться средствами пожаротушения. При значительном возгорании необходимо так же обесточить электросеть, эвакуироваться из помещения, вызвать пожарную службу на место.

Мерами пожарной безопасности могут служить: проведения инструктажа о пожарной безопасности рабочего персонала, обеспечение свободного доступа к эвакуационным выходам, соблюдение правил при работе с ПЭВМ и иным электрооборудованием, а также соблюдение остальных правил пожарной безопасности.

Аудитория 133, 2 корпуса ТПУ соответствует нормам пожарной безопасности, отраженным в федеральном законе N 123-ФЗ [76].

Дополнительную опасность для помещений, оборудованных электротехникой, в том числе ПЭВМ, на территории города Томска могут также представлять штормы, грозы, сильные дожди. При прямом попадании молнии может возникнуть пожар, произойти разрушение оборудования, поражение и гибель людей. Поэтому в случае грозových явлений предусмотрена молниеотводы. Ветер со скоростью более 30 м/ч способен повредить стволы деревьев, которые в свою очередь могут повредить линии электропередачи, окна здания.

Обилие осадков способствует возможностям затопления подвальных помещений, образования оползня в весенний период из-за таяния снегов. Эти явления могут привести к частичному или полному разрушению здания. Для

предотвращения возможной ситуации предусмотрены инженерно-технические меры, включающие в себя: ливневые коммуникации, плановый вывоз снега, укрепления грунта насаждениями.

Вывод: в данном разделе ВКР проведен анализ проекта с точки зрения социальной ответственности, производственной и экологической безопасности. Работы выполнены в соответствии с нормативной документацией и предъявляемыми требованиями.

Список использованных источников и литературы

1. Surfactants Market by Type, Application, Region - Global Forecast to 2025. [Электронный ресурс]: – Режим доступа: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/biosurfactants-market-493.html>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. Рус (дата обращения: 21.04.2023).
2. Демидова А. Россияне сократили покупки моющих средств и бытовой химии / А. Демидова // РБК. – 2017.
3. Фурсова И. Условия диктует потребитель. Российский рынок бытовой химии растет, несмотря на кризис/ И. Фурсова // Российская Газета. – 2016.
4. Николаев П. В. Основы химии и технологии производства синтетических моющих средств: учеб. пособие / П. В. Николаев, Н. А. Козлов, С. Н. Петрова; Иван. Гос. хим.-технол. ун-т. – Иваново, 2007. – 116 с.
5. Ланге К.Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение / К.Р. Ленге. - СПб.: Профессия, 2004. 240.
6. Присадка к моторным маслам HiTEC® 11410. [Электронный ресурс]: статья в интернете. – Режим доступа: https://www.aftonchemical.com/ru-ru/products/engine-oil-additives/passenger-car/hitec-11410/?__cf_chl_rt_tk=I2QmhVn4OPxFLf7L3sgQ5bUnLjn.m7om1Z_zAtNzLdQ-1683962425-0-gaNycGzNC6U, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. (дата обращения: 21.04.2023).
7. Сульфонатные присадки от «Газпром нефти» заменят импортные аналоги. [Электронный ресурс]: статья в интернете. – Режим доступа: https://www.toplivnaya-karta.ru/articles/sulfonatnye_prisadki_ot_gazprom_nefti_zamenyat_importnye_analogi_/, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. (дата обращения: 21.04.2023).
8. Роснефть произвела синтетические сульфонатные присадки к моторным маслам. [Электронный ресурс]: статья в интернете. – Режим доступа: <https://neftegaz.ru/news/petroleum-products/720921-rosneft-proizvela-sinteticheskie->

sulfonatnye-prisadki-k-motornym-maslam//, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. (дата обращения: 21.04.2023).

9. Вынту В. Технология нефтехимических производств. пер. с румынского // под ред. Исагулянц В.И. - М.: Химия, 1968. - 351 с.

10. Ахметов Н. С. «Общая и неорганическая химия» М.: Высшая школа, 2001.

11. Карапетьянц М. Х., Дракин С. И. «Общая и неорганическая химия» М.: Химия 1994.

12. ХИММЕДСНАБ оснащение лабораторий. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <https://himmedsnab.ru/>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. (дата обращения: 21.04.2023).

13. Некрасов Б.В. Основы общей химии. — 3-е изд. — М.: Химия, 1973. — Т. I. — С. 344. — 656 с.

14. Химическая технология серной кислоты: учебное пособие / Р. Т. Ахметова, Т. Г. Ахметов, А. А. Юсупова [и др.]. — Казань: КНИТУ, 2019. — 140 с. — ISBN 978-5-7882-2649-1. — Текст: электронный // Лань: электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/166305> (дата обращения: 23.05.2023). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

15. Гальперин, А. Е. Производство присадок к моторным и трансмиссионным маслам / А. Е. Гальперин. - М.: Химия, 1974. - 198 с.

16. Деби, Н. К. Нефтехимическая технология: Процессы нефтехимического синтеза / Н. К. Деби, пер. с румын. инж. Д. К. Иорга; под ред. д-ра хим. наук. И. Б. Рапопорта. - Москва: Изд-во Гостоптехиздат, 1963. - С. 231-232.

18. Суховерхов В.Д., Василькевич И.М. Современные аспекты производства и применения масел и присадок к ним // Мир нефтепродуктов. 2008. № 6. С. 31-34.

19. Агаев А.Н., Велиева С.М., Зейналова Н.Н., Кулалиев И.Д. Синтез маслорастворимых многофункциональных сульфонатных присадок на основе

низкомолекулярных алкилфенолов // Журнал прикладной химии. 2012. Т. 85. № 1. С. 89-92. EDN: EZUKXX.

20. Aspen-Plus. [Электронный ресурс]: статья в интернете. – Режим доступа: <https://www.aspentech.com/ru/products/engineering/aspen-plus>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. (дата обращения: 21.04.2023).

21. ANSYS Fluent. [Электронный ресурс]: статья в интернете. – Режим доступа: <https://cae-expert.ru/product/ansys-fluent/>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. (дата обращения: 21.04.2023).

22. Simscale. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <https://www.simscale.com/product/cfd/>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. (дата обращения: 21.04.2023).

23. SIMFLOW. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <https://sim-flow.com> //, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. (дата обращения: 21.04.2023).

24. Flowsquare. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <http://flowsquare.com/> //, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. (дата обращения: 21.04.2023).

25. Openfoam. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <https://openfoam.org> //, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. (дата обращения: 21.04.2023).

26. Numerical simulation of horizontal tube falling film flow under tilt and sloshing conditions / Hui Han, Chongzheng Sun, Yu Wang, Yuxing Li // Energy Procedia. Volume 142, December 2017, Pages 3888-3894. doi: 10.1016/j.egypro.2017.12.293.

27. A comprehensive review on computational studies of falling film hydrodynamics and heat transfer on the horizontal tube and tube bundle / Chuang-Yao Zhao, Di Qi, Wen-Tao Ji, Pu-Hang Jin, Wen-Quan Tao // Applied Thermal Engineering. Volume 202, 5 February 2022, 117869. doi: 10.1016/j.applthermaleng.2021.117869.

28. Simulation analysis of flow velocity and liquid film of saline wastewater in falling film evaporation / Bing Liu, Xinlong Wang, Youle Liu, Yu Gao, et al // Applied Environmental Technology & Innovation. Volume 19, August 2020, 100790. doi: 10.1016/j.eti.2020.100790.

29. P.F. Arroiabe, Manex Martinez-Agirre, M. Mounir Bou-Ali. Numerical analysis of different mass transfer models for falling film absorbers // International Journal of Heat and Mass Transfer, Volume 182, January 2022, 121892. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121892.

30. Hydrodynamic analysis of the falling-film formation in evaporators using CFD simulation/ Julio Frías-Esquivel, Guillermo González-Alatorre, Christian O. Díaz-Ovalle, Raúl Lesso-Arroyo, et al // Food and Bioproducts Processing. Volume 101, January 2017, Pages 56-67. doi: 10.1016/j.fbp.2016.10.006

31. Furqan Tahir. CFD Analysis of Falling Film Hydrodynamics for a Lithium Bromide (LiBr) Solution over a Horizontal Tube // Energies. Volume 13(2). 2020. P.307.

32. Долганова И.О. Направления оптимизации работы системы «реактор–регенератор» в технологии производства линейных алкилбензолов // Фундаментальные исследования. – 2013. – № 4-2. – С. 281-285; URL: <http://www.fundamental-research.ru/ru/article/view?id=31183>. Дата обращения: 27.04.2023.

33. Каюмов Н. А. Современные промышленные технологические процессы дегидрирования углеводородов и их аппаратное оформление / Н. А. Каюмов, А. А. Назаров, С. И. Поникаров, П. В. Вилохина. – Текст: электронный // Вестник Казанского технологического университета. 2013. №15. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/sovremennye-promyshlennye-tehnologicheskie-protsessy-degidrirovaniya-uglevodorodov-i-ih-apparaturnoe-oformlenie>. Дата обращения: 27.05.2020.

34. Иванчина Э. Д. Влияние конструкции пленочного реактора сульфирования линейного алкилбензола на скорость образования тетралинов и сульфонов / Иванчина Э. Д., Ивашкина Е. Н., Долганов И. М., Солопова А. А.,

Долганова И. О. Бунаев А. А., Пасюкова М. А. // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний - 2020. - № 2. – С. 42-49

35. ТР. СМК П-032-2011: Постоянный технологический регламент на производство алкилбензолсульфокислоты методом сульфирования линейных алкилбензолов ООО «КИНЕФ», 2011. – 247 с.

36. Ланге К. Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение – СПб.: Профессия. 2004. – 240 с.

37. Roberts D. W. Sulfonation technology for anionic surfactant manufacture // Organic Process Research & Development. – 1998. – № 2. – P 194-202.

38. Roberts D. W. Optimisation of the linear alkyl benzene sulfonation Process for surfactant manufacture // Organic Process Research & Development. – 2003. – №7. – P 172-184.

39. Cross J. Anionic Surfactants-Analytical Chemistry // New York. – 1998. – 368 p.

40. 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.

41. Lanteri A. Sulfonation and Sulfation Technology // Journal of the American Oil Chemists' Society. – 1978. – №55. – P 128-133.

42. Соколов В.Н. Газожидкостные реакторы: учебник / В.Н. Соколов, И.В. Доманский. - Л., «Машиностроение» (Ленингр. отд-ние). - 1976. - 216 с.

43. Riazi M. R. Characterization and Properties of Petroleum Fractions / M. R. Riazi - ASTM International, 2005 – 407 p.

44. Denis, J., Briant, J., and Hipeaux, J. C., Lubricant Properties Analysis and Testing, Translated to English by G. Dobson, Editions Technip, Paris, 1997

45. Касаткин А. Г. Основные процессы и аппараты химической технологии: учебник для вузов / А. Г. Касаткин. – Изд. стер. – М.: Альянс, 2014. – 750 с.

46. Колдоба Е. В. Метод построения констант фазового равновесия многокомпонентных растворов / Е. В. Колдоба. – Текст; электронный // Матем. моделирование. – 2018. - том 30, номер 4. – с. 84–96.

47. Soave G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state // Chemical Engineering Science. – Vol. 27. – I. 6. – 1972. – p. 1197-1203.

48. Peng D. Y., Robinson D. B.. A new two-constant equation of state // Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals. – Vol. 15. – 1976. – p. 59–64.

49. Рейтц К. Автостопом по Python. / К. Рейтц, Т. Шлюссер. — СПб.: Питер, 2017. — 336 с.

50. Патрихин, М. Ю. Моделирование процесса низкотемпературной сепарации газа / М. Ю. Патрихин ; науч. рук. И. М. Долганов // Химия и химическая технология в XXI веке : материалы XXIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л. П. Кулёва и Н. М. Кижнера, Томск, 16-19 мая 2022 г. : в 2 т. — Томск : Изд-во ТПУ, 2022. — Т. 2. — [С. 89-91].

51. Мойзес, О. Е. Информатика. Углубленный курс: учебное пособие для среднего профессионального образования / О. Е. Мойзес, Е. А. Кузьменко. — Москва: Издательство Юрайт, 2023. — 164 с.— ISBN 978-5-534-07980-7.

52. НЕФТЕОРГСИНТЕЗ Кириши. Цена АБСК. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: [https://absk.ru/price/#:~:text=%D0%A1%D1%82%D0%BE%D0%B8%D0%BC%D0%BE%D1%81%D1%82%D1%8C%20%D0%90%D0%91%D0%A1%D0%9A%20%D0%BC%D0%B0%D1%80%D0%BA%D0%B8%20%D0%90%20%D0%9A%D0%B8%D0%BD%D0%B5%D1%84,200%20%D0%BB\)/](https://absk.ru/price/#:~:text=%D0%A1%D1%82%D0%BE%D0%B8%D0%BC%D0%BE%D1%81%D1%82%D1%8C%20%D0%90%D0%91%D0%A1%D0%9A%20%D0%BC%D0%B0%D1%80%D0%BA%D0%B8%20%D0%90%20%D0%9A%D0%B8%D0%BD%D0%B5%D1%84,200%20%D0%BB)/), свободный. – Загл. с экрана. – Яз. рус. (дата обращения: 21.04.2023).

53. Сайт Министерства энергетики Российской Федерации: [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://minenergo.gov.ru/activity/statistic> (дата обращения: 05.05.2023).

54. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р.

Тухватулина, И.Г. Видяев; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. – 73 с.

55. OpenOffice. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <https://www.openoffice.org/ru/> //, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. (дата обращения: 21.04.2023).

56. PyDev. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <https://www.pydev.org/> //, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. англ. (дата обращения: 21.04.2023).

57. Приказ ТПУ № 16544 от 18.12.2019 Об установлении размера должностных окладов по отдельным профессиональным квалификационным группам.

58. Федеральный закон "О минимальном размере оплаты труда" от 19.06.2000 N 82-ФЗ (последняя редакция)

59. НК РФ Страховые взносы (введена Федеральным законом от 03.07.2016 N 243-ФЗ).

60. ГОСТ 12.2.032-78 система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.

61. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30 декабря 2001 г. № 197-ФЗ (ред. от 30.04.2021) // Собрание законодательства РФ. 2002. № 1 (ч. 1). Ст. 3.

62. Федеральный закон "О специальной оценке условий труда" от 28.12.2013 N 426-ФЗ.

63. ГОСТ 12.0.003-2015. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация

64. ГОСТ 12.1.003-2014. ШУМ Общие требования безопасности

65. ГОСТ Р 55710-2013. Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений. – М.: Стандартинформ, 2016. – 20с.

66. СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

67. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. «Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.»
68. СП 2.2.3670-20 "Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда"
69. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 19.12.2022, с изм. от 11.04.2023)
70. Федеральный закон "О специальной оценке условий труда" от 28.12.2013 N 426-ФЗ.
71. ПУЭ. Правила устройства электроустановок. Седьмое издание, 2002.
72. ГОСТ Р 53692-2009. Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Этапы технологического цикла отходов.
73. Полимерные и полимерсодержащие строительные материалы, изделия и конструкции. Гигиенические требования безопасности: санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.1.2.729-99: Постановлением Главного государственного санитарного врача РФ от 27 января 1999 г. № 3. Москва.
74. Правила по охране труда при эксплуатации электроустановок; приказ Минтруда России от 24.07.2013 N 328н, зарегистрировано в Минюсте России 12.12.2013 N 30593.
75. ГОСТ 12.1.004-91. Пожарная безопасность. Общие требования
76. Федеральный закон "Технический регламент о требованиях пожарной безопасности" от 22.07.2008 N 123-ФЗ (последняя редакция)
77. Львова Л.А. Основы технологии нефтехимического синтеза / Л.А. Львова, А. И. Динцес, Л. А. Потоловский; Гостоптехиздат. – Москва, 1960 г. – 343 с.
78. Химия и технология нефти и газа / В.Н. Эрих, М.Г. Расина, М.Г. Рудин. «Химия» - Л., изд 2-е, пер. 1977. – 424 с.
79. Белов П .С. Основы технологии нефтехимического синтеза: учебник / П. С. Белов; 2-е изд., перераб. — М.: Химия, 1982. — 280 с.

80. Шевердяев О. Н. Основы технологии поверхностно-активных веществ и синтетических моющих средств / О. Н. Шевердяев, П. С. Белов, А. М. Шкитов. – Москва: МГОУ, 2001. – 201 с.

81. Всемирная организация здравоохранения. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: [https://www.who.int/ru/emergencies/diseases/novel-coronavirus-2019/technical-guidance/naming-the-coronavirus-disease-\(covid-2019\)-and-the-virus-that-causes-it](https://www.who.int/ru/emergencies/diseases/novel-coronavirus-2019/technical-guidance/naming-the-coronavirus-disease-(covid-2019)-and-the-virus-that-causes-it), свободный. – Загл. с экрана. – Яз. Рус (дата обращения: 21.04.2023).

82. Кабанов В. А. Циглера — Натта катализаторы: статья // Энциклопедия полимеров, т.3, Советская энциклопедия – 1977.

83. Зефиоров Н. С. Циглера — Натта катализаторы: статья // Химическая энциклопедия, т.5, Большая Российская энциклопедия, 1998.

84. Бухштаб З. И. Технология синтетических моющих средств / З. И. Бухштаб, А. П. Мельник, В. М. Ковалев. - М.: Легпромбытиздат, 1988 - 320 с.

85. Desmet ballestra. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <https://www.desmetballestra.com/>, свободный. – Загл. с экрана. – Яз. Англ. (дата обращения: 21.04.2023).

86. Бесков В. С. Общая химическая технология: учебник / В.С. Бесков; - М.: Академкнига, 2005. – 452 с.

87. Плановский А. Н. Процессы и аппараты химической и нефтехимической технологии: учебник / А.Н. Плановский, П.И. Николаев. — М.: Химия, 1987. – 540 с.

88. Лаптева, Елена Анатольевна. Математические модели и расчет тепломассообменных характеристик аппаратов: учеб. пособие / Е.А. Лаптева, Т.М. Фарахов ; Казан. гос. энергет. ун-т ; под ред. А.Г. Лаптева. - Казань: Отечество, 2013. – 169 с.

89. Johnson G. R. Modeling of a thin-film sulfur trioxide sulfonation reactor / G.R. Johnson, B.L. Crynes – Text: electronic // Ind Eng Chem Process Des Dev. – 1974. – Vol. 13 (1). - pp. 6-14

90. Davis E. J. An analysis of the falling film gas-liquid reactor Chem / E.J. Davis, M. Van Ouwkerk, S. Venkatesh. – Text: electronic // Eng. Sci. – 1979. – Vol. 34. - pp. 539-550

91. Yih S.M. Prediction of heat transfer in turbulent falling liquid films with or without interfacial shear / S.M. Yih, J.L. Liu. – Text: electronic // AIChE J. – 1983. - Vol. 29. - pp. 903-909

92. Russo V. Falling film reactor modelling for sulfonation reactions / V. Russo A. Milicia, M. Serio, R. Tesse. – Text: electronic // Chemical Engineering Journal. – 2019. – Vol. 377. – pp. 84-90.

Приложение А

(обязательное)

Modeling the process of sulfonation of linear alkylbenzenes with allowance for mass transfer

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ14	Сладков Денис Юрьевич		

Руководитель ВКР:

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

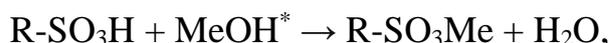
Консультант – лингвист отделения иностранных языков ШБИП:

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

1.1 Methods for obtaining sulfonate components of synthetic detergents

Anionic surfactants are amphiphilic organic substances, which are capable of dissociation in the aquatic environment. During this process anions and hydrocarbon radicals (surface activity carrier) are formed [9]. Nowadays various sulfates and phosphates still prevail in industrial production.

An independent process for obtaining sulfonates is not difficult either from a technological or chemical point of view, because it's simple the alkalization of sulfonic acids. In general, a chemical reaction can be written as follows:

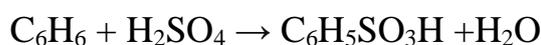


where R – hydrocarbon radical;

Me – metal ion (mainly sodium, calcium, magnesium);

* - it is possible to use ammonia or amines instead of metal hydroxide.

More complex is the previous alkalization process stage - the production of sulfonic acids. Aromatic sulfonic acids are obtained by sulfonation of benzene and its derivatives:



The following substances can act as a sulphurizing agent [77]:

- concentrated sulfonic acid (80 – 100 %);
- sulfur anhydride (SO_3);
- sulfuryl chloride (SO_2Cl_2);
- oleum;
- chlorosulfonic acid ($\text{HO-SO}_2\text{-Cl}$);
- sulfamic acid ($\text{SO}_2(\text{NH}_2)_2$);
- some complexes of sulfur trioxide.

On the one hand, sulfuric anhydride is currently the most widely used from this list, which is due to two factors - product color (especially important for cosmetic preparations) and the content of impurities and by-products in the final product. On the other hand, sulfonation with sulfur trioxide has a significant disadvantage - a highly exothermic reaction. In comparison with sulfonation with oleum, the thermal effect is

lower due to the energy consumption for breaking the bonds of excess SO_3 molecules with H_2SO_4 .

Aliphatic sulfonic acids can be obtained in a number of ways:

- reaction of nucleophilic exchange of a halogen atom of haloalkanes for a sulfo group;
- sulfochlorination of alkanes by a free-radical mechanism;
- sulfoxidation of alkanes;
- oxidation of thiols and organic disulfides with strong oxidizing agents (eg potassium dichromate).

For the first time, a synthetic detergent without the use of fatty raw materials was obtained by professor G.S. Petrov in 1912, so product of this reaction received the appropriate name – «Petrov's contact» [9, 78]. The resulting substance is a mixture of petroleum sulfonic acids, which was widely used in various industries from textiles to lubricating oils. To obtain a «Petrov's contact», a kerosene-gas oil fraction is required [8], the proportion of aromatic compounds in which reaches 20-40%. This raw material is subjected to sulfonation with sulfuric acid. A distinctive feature is the separation of the product into two phases, called acid oil and acid tar. The main product dissolves well in a lighter phase, which is mechanically separated from the acid tar. Further extraction of sulfonic acids occurs by extraction with fresh water. For neutralization, a sodium hydroxide solution (30–40%) is used, followed by treatment of the sulfonates with silica gel [77]. Nowadays, this process has lost its relevance, because the petroleum sulfonates thus obtained have relatively low surface activity and other undesirable properties.

1.1.1 Production of alkyl sulfates

Alkyl sulfates are obtained from the sulfonation of α -olefins and alcohols. Alcohols are the products of paraffin oxidation in the presence of H_3BO_3 . In this case, primary higher fatty alcohols or their mixture with secondary ones are used. The detergent properties are influenced by the length of the hydrocarbon chain, C_{14} - C_{17} is

considered optimal, and a pattern is also traced - when the sulfate group is mixed to the center of the radical chain, the target properties deteriorate.

Sulfonation of primary fatty alcohols is carried out with sulfuric acid with a concentration of 98% in the following ratio: 70-75:100 wt. pure acid to alcohol [79]. The technological scheme of the process is shown in Figure 1.

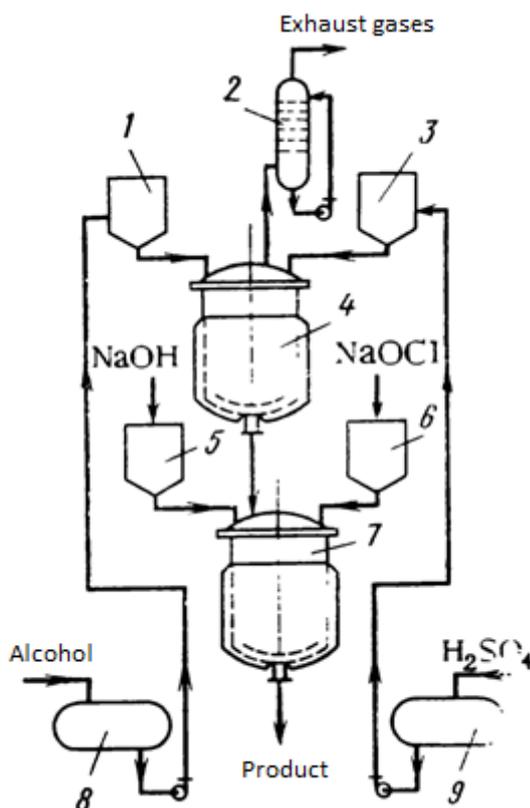


Fig. 1 The technological scheme of the production of primary alkyl sulfates process [79]:

1, 3, 5, 6 – measuring vessels; 2 – absorber; 4 – main reactor; 7 – neutralizer reactor; 8, 9 – buffer tanks.

Sulfuric acid from buffer tank 3 is loaded into the capacitive reactor with a stirrer and a cooling coil 4 (temperature from 30 to 50 °C) through a measuring vessel 3. Also, alcohol is fed into the reactor from the buffer tank 8 through the measuring vessel 1 in a thin stream, while the stirrer is operating. The process is periodic, the residence time of the raw material in the reactor is on the order of several hours. The product from the reactor 4 is fed into neutralizer 7, where it reacts with sodium hydroxide at a

temperature of 50 to 60 °C. Gaseous products are pumped out through the absorber. The resulting pasty mixture is sent for drying or storage.

In the case of sulfonation of secondary alcohols or α -olefins, the problem arises of the formation of by-products: sulfate anhydrides and polymers. In connection with this, the yield of the target product. To assess this effect, the concentration of sulfur acid is decreased up to 90%, the contact time is approximately 1 minute, and the temperature in the reactor keeps in the range of 5-10 °C [80]. The technological scheme differs from previous (Figure 2):

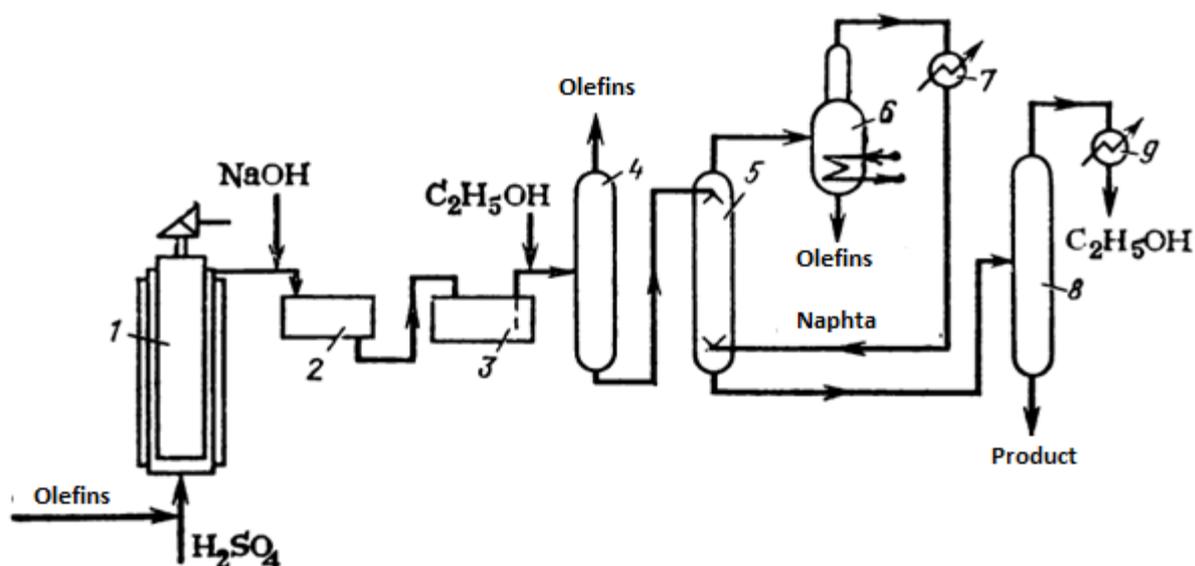


Fig.2 The technological scheme of the production of secondary alkyl sulfates [79]:
 1 – reactor; 2 – neutralizer; 3 – hydrolyzer; 4 – separator; 5 – extraction column; 6 – reboiler; 7, 9 – condensers; 8 – alcohol distillation column.

A mixture of olefins and sulfuric acid is fed through the bottom of the reactor 1, the vessel of which is cooled by refrigerant. The product is neutralized with 18% sodium hydroxide solution in apparatus 2. Dialkyl sulfates are hydrolyzed in apparatus 3 for 1 hour at elevated temperature (70-80 °C). To separate from the mixture formed during hydrolysis and unreacted substances, mixture is treated with 20% ethyl alcohol. Undissolved fatty alcohols and olefins are separated from the top of separator 4. The remaining solution is extracted with naphtha in extractor 5, then mixture evaporates in

reboiler 6. The final separation of alkyl sulfates is carried out in distillation column 8, where alcohol is distilled off.

1.1.2 Production of alkylbenzen sulfonates

Alkylbenzen sulfonates are salts (mainly sodium and calcium) of sulfonic acids of alkylaromatic compounds. Linear alkylbenzene sulfonates (LAS) are prepared industrially by the sulfonation of linear alkylbenzenes (LABs), which can themselves be prepared in several ways [1]. In the most common route benzene is alkylated by long chain monoalkenes (e.g. dodecene) using hydrogen fluoride as a catalyst [78]. The purified dodecylbenzenes (and related derivatives) are then sulfonated with sulfur trioxide to give the sulfonic acid [79]. The sulfonic acid is subsequently neutralized with sodium hydroxide [81]. The term "linear" refers to the starting alkenes rather than the final product, perfectly linear addition products are not seen, in-line with Markovnikov's rule. Thus, the alkylation of linear alkenes, even 1-alkenes such as 1-dodecene, gives several isomers of phenyldodecane [80].

Consider the full cycle of obtaining this product based on alkenes. There are two ways to obtain alkenes of the required fraction: thermal cracking and ethylene oligomerization on a Ziegler catalyst [82, 83]. In the second case, the yield of the target fraction is 1.4 times higher (35 vs. 50% wt.) and does not contain alkanes [84], which reduces the proportion of non-sulfonated compounds in the final product before purification.

The next stage is the alkylation of benzene with the resulting alkenes. Hydrogen chloride, hydrofluoric and sulfuric acids can act as a promoter. In this case, undesirable reactions of isomerization, polymerization and polyalkylation proceed in parallel. To reduce their rate relative to the main reaction, low temperatures are maintained in combination with an excess of benzene. At the output after sequential distillation all by-products are removed. Then final product of this stage is alkylate, which is a mixture of linear alkylbenzenes with different long hydrocarbon chains of the radical corresponding to the starting alkenes.

Sulfonation using oleum or sulfuric acid as a sulphurizing agent is technologically obsolete. The most effective is the use of sulfur trioxide; the

development of this technology dates back to the 60-s of the 20-th century [85]. The fundamental principles of this technology are used to this day. Sulfonation takes place with a mixture of sulfuric anhydride and air with a concentration of 3-8% vol. at temperatures not exceeding 45-50 °C. The ratio of the starting substances is close to stoichiometric. The reaction is carried out in a bubbling or film reactor, film reactors are currently preferred. The technological scheme of one of these processes is shown in Figure 3:

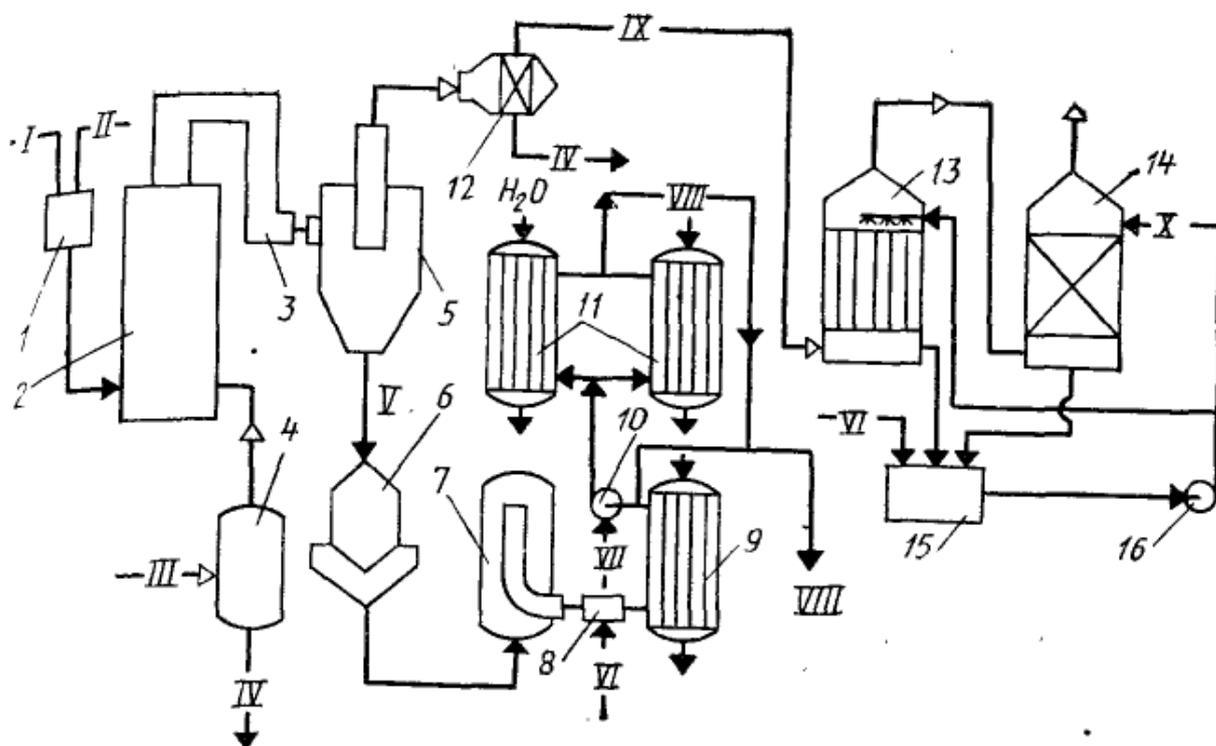


Fig.3 Two-stage sulphation process technological scheme [84]:

1 – mixer; 2, 3 – sulfators; 4 – sulphurizing agent separator; 5 – separator 6 – buffer tank; 7, 9 – autoclave; 8 – hydration mixer; 9 – cooler; 12 - cyclone; 13 - filter; 14 - scrubber; 15 – tank for sulfite-sulfate solution; 15 – circulation pumps; Flows: I - H_3PO_4 ; II - alkylbenzene; III – sulphurizing agent; IV – H_2SO_4 ; V – sulfonation product; VI – H_2O ; VII - NaOH ; VIII – neutralized mixture; IX – air for purification; X – sulfite-sulfate solution

The reactors in this technological scheme are heat-exchange type apparatuses with 23 inner tubes, into which a sulphurizing agent is supplied in the form of a gas and alkylbenzenes in the form of a draining liquid, with a cooling jacket.

1.2 Mass transfer through the phase boundary

Mass exchange processes are phenomena of transfer of substances from one phase to another. They are the basis of impurity removal, separation, fractionation processes and are also an integral part of any heterogeneous chemical reaction.

In the general case, any heterogeneous chemical reaction consists of the following stages, which proceed continuously and simultaneously relative to each other [86]:

- Diffusion of reagents to the interface.
- Mass transfer of reagents through the phase boundary
- Diffusion of reagents into the core of the reaction medium.
- Chemical transformation at the phase boundary and in the core of the reaction medium.
- Diffusion of the resulting reaction products from the core of the reaction medium.
- Mass transfer of products across the phase boundary.
- Diffusion of products into the flow core.

It is worth separating the concepts of mass transfer and mass transport. Mass transfer is the transfer of matter from the core of the flow of one phase to the boundary of its section. Mass transport is the transfer of a substance from the core of a flow saturated with a substance (with a higher concentration) through the phase boundary to the core of an unsaturated phase (with a lower concentration) [45]. The main mass transfer equation can be written as follows [87]:

$$m = \frac{dM}{dF * d\tau} = \frac{\Delta}{R}$$

where m – mass transfer rate, $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$, $\text{mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$;

dM – amount of a substance that came from one phase to another, kg , mol ;

dF – phase contact surface, m^2 ;

$d\tau$ – contact time, s;

Δ - driving force of process, mole, kg;

R – resistance to mass transfer, the reciprocal of the mass transfer coefficient (β), (m^2*s).

1.2.1 Diffusion boundary layer model

Diffusion boundary layer model allows describing the processes taking place in systems of two phases gas-liquid and liquid-liquid. It is based on two assumptions: within an individual phase, mass transfer proceeds independently of the other; at the interface, the phases are in equilibrium, which is achieved much faster than the concentrations in the phases change.

Assuming that the phase flows are turbulent and the distributed substance passes from the gas phase y to the liquid x , the mechanisms of the ongoing processes are described as follows, Figure 4:

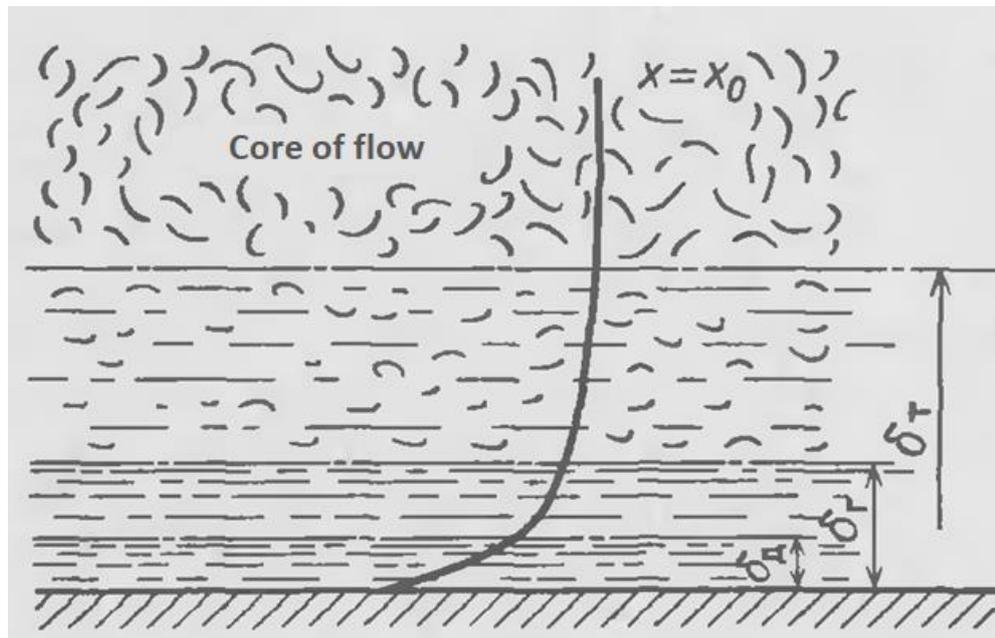


Fig. 4 Change in the concentration profile of the distributed substance

Transfer within a phase:

- molecular (diffusion), carried out by the movement of substance molecules (in immobile laminar moving media).

- convective, carried out by the movement of macroparticles (transfer by flow).
- Convective transfer is much faster than diffusion

The core of the flow is considered remote from the phases boundary, and the transfer is carried out by turbulent (convective) phenomena. With approach, this effect weakens due to the forces of friction and surface tension.

The boundary layer, in turn, is subdivided into two sublayers: viscous and diffusion. In the viscous sublayer, the hydrodynamic regime becomes close to laminar. The role of molecular diffusion in the transfer of matter increases, the concentration changes relatively faster. The diffusion sublayer is inside the viscous one. There are no turbulent fluctuations in it, the transfer is carried out exclusively by molecular diffusion [88]. Here, the largest change in concentration is observed, in other words, this layer is decisive for the driving force of the process.

Then Fick's first law, which determines the transfer of a substance by molecular diffusion per unit time through a unit surface at a concentration gradient equal to unity, can be written as follows [45]:

$$N = -D * F * \frac{dC}{dn}$$

where N – amount of substance transferred by molecular diffusion per unit of time, mole/s;

$\frac{dC}{dn}$ – substance concentration gradient, mole/(m³*m);

D – molecular diffusion coefficient.

The molecular diffusion coefficient reflects the physical properties of the substance and medium, which depend on the size of the molecules, the molecular weight of the substance, pressure, and temperature [88]. With increasing temperature, the diffusion process accelerates, and with increasing pressure, it slows down. This coefficient can be calculated using approximate formulas, calculated experimentally or found in reference literature.

1.3 Mathematical models of processes occurring in a thin film

The continuous development of the scientific and technological process consists not only in new discoveries that can replace existing technologies or offer something

fundamentally new, but in the improvement of existing technologies. This direction of development allows to reduce the effect of negative factors of various technological processes and mainly affects the quality of the products obtained and the final profit of production.

The process of sulfonation of linear alkylbenzenes studied in this work is also subject to changes in order to improve the technology. In a constantly evolving competitive market, it is impossible to “stay afloat” and even more so to effectively produce and profit from it using outdated technologies. To this end, in recent years, industrial enterprises, including domestic ones, are increasingly turning their attention to the issues of process optimization. And one of the methods for solving this problem is mathematical modeling. This approach is often much less costly and more efficient, there is no need for a huge number of experiments, stopping individual devices or the entire production line. The use of actual data on the input and output parameters of the processes makes it possible to establish the relationship between them, but in some cases additional targeted experiments are still required to obtain the missing data. Thus, by implementing the established relationships in the form of a mathematical model and checking them for compliance with reality, it becomes possible to conduct research in an extremely wide range of changes in the technological parameters of the process. In turn, this allows you to identify the "bottlenecks" of the real process and offer solutions to eliminate them, which is optimization.

When developing such models, first of all, it is necessary to analyze previous studies and proposed solutions. This will allow to assess the need for a new development, considering the required specifics, as well as draw the foundations laid down in these solutions, and identify their shortcomings.

As part of the process under study, the first models were proposed in the last century. Many assumptions were made in them, most of the parameters were calculated or found empirically and taken constant, and the process itself seemed to be homogeneous [89-91]. Modern developments have gone far ahead.

The most recent development in the simulation of a film sulphuration reactor was made by a scientific team composed of V. Rousseau, A. Milici, M. Serio, R.

Tesser. The model developed by them can describe the process in both laminar and turbulent film flow regimes and considers the change in film thickness along the reactor. The coordinate system used and the change in the concentration and temperature profiles in this model are shown in Figure 5. The main assumption of the model is that the liquid phase flows in a transitional regime between laminar and turbulent, and the gas phase is turbulent. The material and heat balance equations are written in a dimensionless form, which makes it possible to consider the mobility of the boundary between the gas and liquid phases, since the liquid film can vary in thickness along the reactor axis.

The mass balance in the stationary mode of operation, including the kinetic, hydrodynamic and diffusion components, is described by equations (1-3) [92].

$$C_{SO_3,G} = C_{SO_3,G,0} \left(1 - \frac{x_A}{\frac{R_{SO_3}}{A}} \right) \quad (1)$$

$$\frac{u_L}{L} \frac{\partial C_{SO_3,L}}{\partial \varepsilon} = +k_G a_G (C_{SO_3,G} - m C_{SO_3,L}|_{y=0}) + \frac{1}{\delta_L} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{D_{SO_3} + D_T}{\delta_L} \frac{\partial C_{SO_3,L}}{\partial y} \right) - rxn \quad (2)$$

$$\frac{u_L}{L} \frac{\partial C_{SO_3,L}}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{\delta_L} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{D_A + D_T}{\delta_L} \frac{\partial C_{A,L}}{\partial y} \right) - rxn \quad (3)$$

The heat balance in the stationary mode of operation for the liquid and gas phases is described by equations (4-5) [92].

$$\frac{u_L}{L} \frac{\partial \rho_G c_{p,G} T_G}{\partial \varepsilon} = \frac{h_G}{\delta_L} (T_L|_{y=1} - T_G) \quad (4)$$

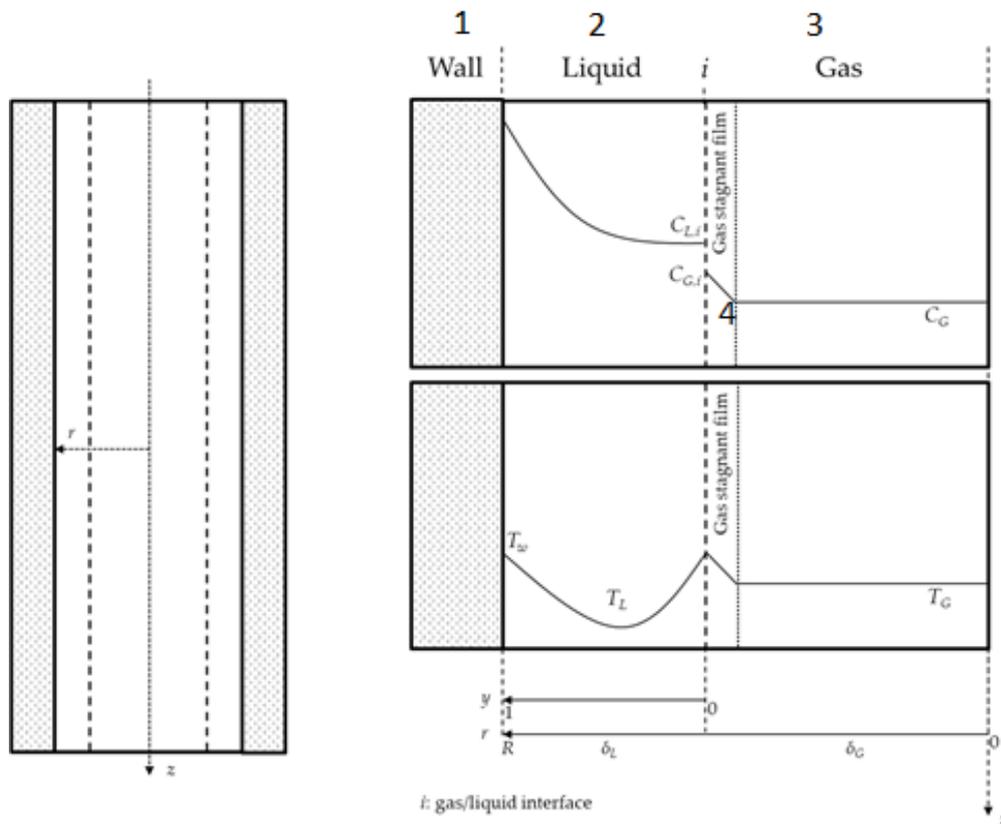


Fig. 5 Coordinate system of the model and substance concentration and temperature profiles [92]:

1 – wall; 2 – liquid phase; 3 – gas phase

$$\frac{u_L}{L} \frac{\partial \rho_L c_{p,L} T_L}{\partial \varepsilon} = - \frac{1}{\delta_L} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{-k_L}{\delta_L} \frac{\partial T_L}{\partial y} \right) + \Delta H_{rxn} rxn \quad (5)$$

It should be noted that the jacket temperature in this model is a constant value. This is mainly due to the strong dependence of the final differential equation of temperature change on the design, volume, refrigerant and material of the apparatus. To obtain this equation, which describes the process with sufficient accuracy, in a general form is an extremely difficult task.

The expression rxn in equations (1-5) is nothing more than a kinetic component written according to the law of mass action - equation (6).

$$rxn = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{T_L}\right) C_A C_{SO_3,L} \quad (6)$$

After analyzing the above model, its obvious advantage is a detailed description of the hydrodynamics of the process. Establishing a relationship between the Reynolds

criterion of moving liquid and gas phases at each point along the axis of phase movement in the reactor makes it possible to estimate the change in film thickness along the length of the tube, an example of such a change is shown in Figure 6.

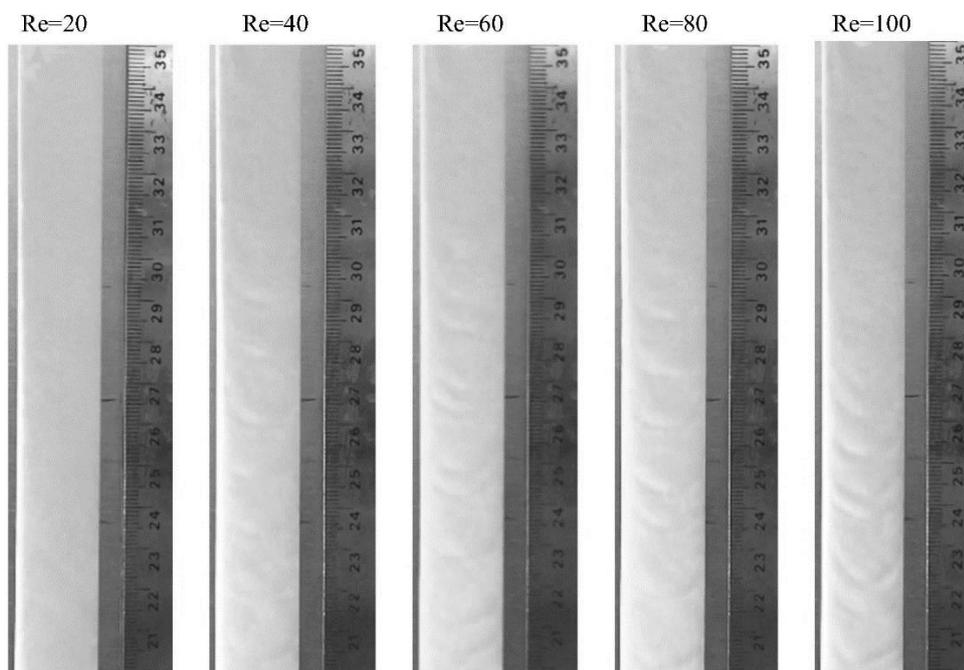


Fig. 6 Visual change in the film flow mode

Nevertheless, all the models studied during this work, including the one described above, have common shortcomings. They lack any description of the processes of formation of by-products and their influence on the thickness and flow regime of the film. Therefore, the influence of by-products on the yield of the target product and quality is not considered. In this case, the sulfonated substance is presented as an individual substance; in fact, it is a mixture of homologues. These assumptions allow us to conclude that the specificity of the process allows for the further development of new models and the expansion of previously developed ones.

1.4 Problems of film flow hydrodynamics solved using software packages

Nowadays, there are many software solutions for computational fluid dynamics (CFD), for example: SimFlow [23], SIMSCALE [22], FlowSquare [24], OpenFoam [25]. The use of such products in the field of chemical technology is rather narrow, because it is incorrect to consider hydrodynamic processes in reactors separately from chemical reactions. The leader in this area is the software products of ANSYS Inc. [29], namely, the most suitable for solving problems of film flow in the ANSYS Fluid reactor. This software module provides a comprehensive solution for performing engineering analysis in the field of fluid and gas flow simulation, for example, to compare performance at different design points or several alternative designs.

The main distinguishing feature, along with integration with other software products, which ultimately makes it possible to carry out a complete engineering calculation of the process, is the ability to simulate chemical reactions, incl. under conditions of turbulence and multiphase flows [29].

To simulate the behavior of the film in various modes, this product uses a model based on the Lagrange-Euler equation, considering changes in mass, energy, forces in the system and its individual parts. In this case, it is possible to simulate both a static film - Figure 7, and a moving one - Figure 8.

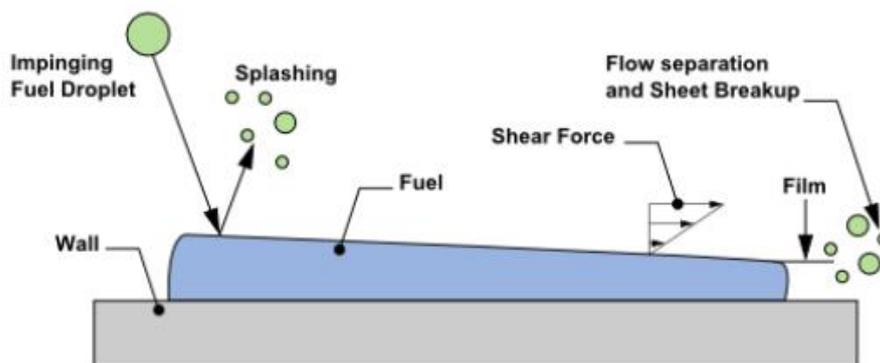


Fig. 7 An example of a process with a static film simulation [29]

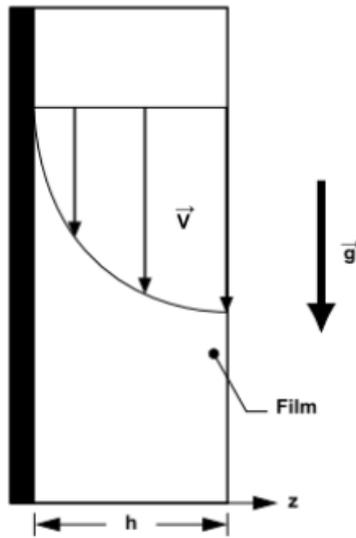


Fig. 8 Simulation of the motion of a film moving under the action of gravity [29]

Thus, considering all the possibilities of ANSYS Fluid, it is impossible to simulate the film flow considering chemical reactions.

Приложение Д

(обязательное)

Затраты на материальные ресурсы, оборудование и программное обеспечение

Наименование	Ед. измерения	Кол-во			Цена за ед. с НДС, руб.			Общие затраты, руб.		
		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Бумага на печать	Упаковка	2	1	3	250	400	200	500	400	600
Персональный компьютер	Шт.	1	1	1	56999	86990	45690	56999	86990	45690
Принтер	Шт.	1	1	1	13980	15999	11500	13980	315	500
Набор канцелярских принадлежностей	Шт.	1	1	1	315	315	500	315	315	500
Флеш накопитель	Шт.	1	1	1	1299	1500	2390	1299	1500	2390
Лицензия Microsoft Office Standart 2019	Шт.	1	1	0	29616	29616	29161	29616	29616	0
Лицензия операционной системы	Шт.	1	1	0	14689	14689	14689	14689	14689	0
Лицензия Visual Studio Profession	Шт.	1	1	0	34549	34549	34549	34549	34549	0
Затраты по статьям расходов								151947	168374	49680
Транспортные расходы								4500	5000	1500
Итого затрат								156447	173374	51180