

Расширенное описание направлений и тематик в рамках совместной программы Фонда «Сколково» и ПАО «СИБУР Холдинг» «Полимерные инновации 3.0»

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
1	Разработка технических решений	Разработка технических решений, позволяющих измерять уровень сыпучих материалов в виде неподвижного и подвижного (псевдооживленного) слоя	Способ будет применяться для измерения уровня порошка полиэтилена и полипропилена в дегазаторах (емкость с неподвижным слоем) и реакторе полимеризации (псевдооживленный слой). При измерении уровня порошка полиэтилена и полипропилена в дегазаторах (емкость с неподвижным слоем) использование известных вибрационных датчиков уровня в данных условиях не подходит по причине налипания порошка на чувствительный элемент прибора и искажению получаемого сигнала, по которому невозможно определить действительно ли прибор контактирует со слоем или произошло залипание порошка. При измерении уровня реакторе полимеризации (псевдооживленный слой) применяются датчики перепада давления, и часто отборы на данные приборы забиваются порошком, что влечет за собой не корректные показания.	
2	Разработка технических решений	Разработка технологии и прототипа пилотной установки ректификационной колонны по технологии DWC (Dividing Wall Column) и её цифрового двойника применительно к процессам нефтехимии и газоразделения.	Научно-техническое обоснование применимости технологии DWC, разработка прототипа пилотной установки и её цифрового двойника для определения основных показателей эффективности на реальных средах, дальнейшего масштабирования и последующего внедрения на предприятиях компании. Колонна с разделительной стенкой (DWC) – это ректификационный аппарат, внутри которого установлена вертикальная перегородка, разделяющая часть сечения колонны на две или более зоны. Перегородка позволяет вести разделение трёхкомпонентной (или более) смеси в одном корпусе с получением трёх чистых продуктов: нижнего, верхнего и бокового отбора (последний выводится со стороны перегородки).	Можно скачать расширенное ТЗ https://polymerinnovations.sk.ru/files/110/tz1.docx

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
3	Разработка технических решений	Разработка технологии и пилотной установки центробежной ректификации RPB (Rotating Packed Bed) применительно к процессам нефтехимии.	Научно-техническое обоснование применимости технологии центробежной ректификации (RPB) и разработка пилотной установки для определения основных показателей эффективности на реальных средах для дальнейшего масштабирования и промышленной апробации на предприятиях компании. Технология центробежной ректификации (RPB) представляет собой процесс разделения многокомпонентных жидких смесей в поле высоких центробежных ускорений, создаваемых вращающимся насадочным ротором.	Можно скачать расширенное ТЗ https://polymerinnovations.sk.ru/files/110/tz2.docx
4	Разработка технических решений	Разработка технических решений и технологий очистки оборудования от полимеров, отложений (крио, лазер и т.п.)	•Подбор методов очистки теплообменников и трубопроводов от полимера стирола на производстве дегидрирования этилбензола (теплообменники неразборные, при забивке снижается пропускная способность и резко падает выработка товарного стирола). Применение – СИБУР-Химпром •Подбор методов очистки внутренних устройств реакторов дегидрирования изобутана от коксовых отложений. Применение - Нижнекамскнефтехим	
5	Разработка технических решений	Технологии и способы эффективной утилизации и/или применение отработанных катализаторов (металлоорганики, гетерогенных) и адсорбентов	• Подбор экономически эффективного метода применения отработанных катализаторов дегидрирования этилбензола (железоокисный катализатор ~100-200 тонн/год, дегидрирования изобутана – 2-5 тысяч тонн/год, а также гидратации и МТБЭ (ионообменная смола в H+ форме) • Для металлоорганических катализаторов Проработка их перевода на эффективную (с точки зрения времени протекания процесса) и безопасную (с точки зрения пожаровзрывоопасности) водную нейтрализацию, с максимальным использованием текущего оборудования. Возможность реализовывать образующийся водный раствор гидроксида алюминия как потенциальный продукт, а не отход.	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
6	Разработка технических решений	Износостойкие покрытия и технологии их нанесения для внутренних устройств реакторов (особенно работа с кипящими слоями, , перекачкой катализаторов, эрозионных потоков с твёрдыми частицами)	Подбор технологии нанесения износостойкого покрытия и самого покрытия или материала для изготовления внутренних устройств реакторов дегидрирования изобутана в кипящем слое, а также катализаторопроводов (пневмотранспорт), стойкого к эрозии частицами катализатора (проблема быстрого износа оборудования). Применение НКНХ, ЗСНХ	
7	Разработка технических решений	Технологии дробеструйной обработки трубопроводов пневмотранспорта для придания заданной шероховатости поверхностям	Подбор технологии обработки трубопроводов пневмотранспорта для создания шероховатости с целью снижения образования полимерных лент на производстве полиэтилена низкой плотности ПЭНП-Т (КОС). Далее может быть транслировано на другие производства при необходимости / оценке затрат к эффекту.	
8	Разработка технических решений	Системы автоматизированной (роботизированной) загрузки сыпучих компонентов в стесненных условиях и ограниченном бюджете	Подбор недорогих компактных решений по загрузке сыпучих реагентов в аппараты без участия человека. Например, загрузка ингибитора на производстве акриловой кислоты СИБУР-Нефтехим , загрузка сыпучих реагентов на ППЭ (производстве простных полиэфиров) Нижнекамскнефтехим	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
9	Разработка технических решений	Технологии и оборудование для очистки промышленных сточных вод на предприятиях нефтегазохимии СИБУР	Разработка технологии/оборудования для очистки промышленных сточных вод Например, химически загрязненные воды, образующиеся в процессе производства ГПЭБ (гидропероксида этилбензола), окиси пропилена и стирола СДМФК (стирол, полученный дегидратацией метилфенилкарбинола в процессе совместного получения стирола и окиси пропилена) В настоящее время на пр-ве применяется узел огневого обезвреживания жидких отходов (850-1050 гр.С)	
1	Разработка цифровых решений	Системы сбора и анализа данных с промышленных установок разработки и переработки полимеров в готовые изделия	Система сбора и анализа данных с промышленных установок разработки и переработки полимеров в готовые изделия, включающая в себя подсистемы: 1. Извлечение данных из закрытых ПЛК-систем иностранных производителей 2. Промышленные IIoT-шлюзы и программно-аппаратные комплексы сбора данных 3. Внешние датчики и альтернативные источники данных для оборудования без цифрового доступа 4. SCADA- и MES-системы как слой агрегации, нормализации и хранения данных 5. Инфраструктура хранения данных для промышленного ИИ (Data Lake, временные ряды) 6. Предобработка, очистка и подготовка производственных данных для ИИ-моделей 7. Кибербезопасность промышленного контура сбора данных	Системы сбора и анализа данных с промышленных установок разработки и переработки полимеров в готовые изделия

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
2	Разработка цифровых решений	ИИ-системы выбора каталитической системы для синтеза полимеров	Программные комплексы и платформы на основе искусственного интеллекта, которые по заданному целевому паспорту полимера (показатель текучести расплава, плотность, модуль упругости, содержание сомомера и др.) подбирают оптимальную каталитическую систему: тип катализатора и сокатализатора, носитель, активность, селективность, химический состав. Поиск охватывает системы моделирования каталитических процессов, предсказательные ML-модели для подбора катализаторов, цифровые двойники реакторов полимеризации, а также информационно-аналитические системы выбора катализаторов по базам данных характеристик.	Разработка закрытого программного комплекса на базе искусственного интеллекта для автоматизации планирования экспериментов в полимерной химии, синтезе полимеров, диагностики причин брака готовой полимерной продукции и работой с базой накопленных знаний
3	Разработка цифровых решений	Системы рекомендации промышленной технологии синтеза полимеров	Решения, которые на основе требуемых характеристик готового полимера (морфология частиц — распределение размеров частиц PSD, насыпная плотность и другие свойства) рекомендуют тип промышленного процесса — газофазный (например, технология Unipol), суспензионный (например, Innovene S) или иной. Охватывает программные средства технологического выбора, симуляторы процессов полимеризации, цифровые двойники производственных линий, системы сравнения технологических схем по целевым параметрам продукта.	
4	Разработка цифровых решений	Программные комплексы подбора рецептур стабилизации полимеров	Системы расчёта пакетов стабилизаторов — первичных и вторичных антиоксидантов, УФ-абсорберов, светостабилизаторов HALS — с учётом метода переработки (литьё под давлением, экструзия плёнки, выдувное формование) и заданных условий эксплуатации. Поиск охватывает экспертные системы подбора добавок, базы данных стабилизаторов, программное обеспечение для композиционного моделирования полимерных рецептур, а также цифровые платформы формулировочной оптимизации.	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
5	Разработка цифровых решений	ИИ-системы диагностики дефектов полимерной продукции	Программные и программно-аппаратные комплексы, которые по вводимым данным (тип дефекта — гели, расслоение, несоответствие цвета; данные партии) формируют ранжированный список вероятных химических и технологических причин возникновения брака. Охватывает системы машинного зрения для контроля качества полимеров, ML-модели классификации дефектов, экспертные системы диагностики причин брака с опорой на исторические прецеденты, системы корреляционного анализа параметров партии и дефектов.	
6	Разработка цифровых решений	Системы формирования чек-листов и алгоритмов устранения дефектов при синтезе полимеров	Решения, генерирующие пошаговые инструкции для R&D-сотрудников по устранению выявленных дефектов: какие пробы отобрать, какие узлы производственной линии проверить в первую очередь, в какой последовательности проводить диагностику. Охватывает системы автоматизированной генерации технологических предписаний, рекомендательные модули на основе знаний, программные средства планирования диагностических процедур, интегрированные с системами управления качеством.	
7	Разработка цифровых решений	Интеллектуальные базы знаний для полимерной химии	Системы накопления, структурирования и поиска по корпусу знаний в области полимерной химии: исторические прецеденты производства, результаты экспериментов, данные по партиям, связи «состав–процесс–свойства–дефекты». Охватывает базы знаний с семантическим поиском, системы управления R&D-данными (Electronic Lab Notebook, LIMS), графы знаний для материаловедения, онтологии полимерных материалов и процессов, платформы управления исследовательскими данными.	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
8	Разработка цифровых решений	Модели и алгоритмы машинного обучения для прогнозирования ключевых свойств ПАВ для синтеза полимеров	Модели и алгоритмы машинного обучения, которые типу гидрофильной группы, длине и разветвлённости гидрофоба, количеству ЕО/РО-звеньев, заряду, числу гидрофобных цепей — предсказывают ключевые свойства: критическую концентрацию мицеллообразования (СМС), поверхностное/межфазное натяжение, крафт-точку, точку помутнения, температуру инверсии фаз (PIT), параметры упаковки и др. Сюда же относятся базы данных экспериментальных свойств ПАВ (например, SurfPro) и дескрипторные подходы (топологические, квантово-химические, конформационные) для построения корреляций «структура–свойство. Прогноз необходимо строить по связке «структура ПАВ + условия среды», включая температуру, pH, минерализацию, природу водной и масляной фаз и концентрацию. HLB следует рассматривать как эмпирический дескриптор, а не как универсальную целевую характеристику. PIT применим главным образом к температурно-чувствительным неионогенным этоксилатам, точка Крафта — прежде всего к ионным ПАВ, точка помутнения к неионогенным оксиэтилированным системам. Следует добавить прогноз межфазного натяжения, динамического смачивания и фазового поведения, а также указывать область применимости, неопределённость и степень экстраполяции модели. Роль блока: базовый прогнозный слой «структура и среда → физико-химические свойства»; приоритет 1.	Системы с применением искусственного интеллекта для подбора молекулярной структуры и состава ПАВ для синтеза полимеров под заданные условия применения для синтеза полимеров.

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
9	Разработка цифровых решений	Цифровые платформы для подбора и оптимизации составов ПАВ для синтеза полимеров	Интегрированные программные системы, которые по заданным условиям применения (тип поверхности и фаз, природа масляной фазы, температура, pH, минерализация, давление, рабочая концентрация, требуемые функции — смачивание, эмульгирование, диспергирование, солюбилизация, пенообразование/гашение) подбирают класс, молекулярную архитектуру и состав ПАВ или смеси. Системы выдают ранжированный набор кандидатов с прогнозом свойств, областью рабочих условий и оценкой достоверности. Могут включать экспертные системы, базы промышленно реализуемых ПАВ и модули рекомендаций по лабораторной проверке. Необходимо разделить два режима: подбор существующего ПАВ или смеси и обратное проектирование новой молекулярной архитектуры. Следует добавить HLD/HLD-NAC для учёта природы масла, солёности и температуры, а также фильтры синтезируемости, доступного сырья, оборудования, стоимости, безопасности и биоразлагаемости. Роль блока: преобразование ТЗ применения в ранжированный набор готовых кандидатов либо в целевую область структуры для синтеза; приоритет 1.	
10	Разработка цифровых решений	Моделирование ПАВ-полимерных систем и молекулярная динамика	Вычислительные методы (молекулярная динамика, coarse-grained моделирование, DPD, методы самосогласованного поля), которые на атомарном или мезоскопическом уровне описывают самосборку ПАВ, образование мицелл, взаимодействие ПАВ с полимерами, адсорбцию на поверхностях, реологические свойства. Результаты МД-расчётов (коэффициенты диффузии, вязкость, поверхностное натяжение) могут использоваться как входные данные для ML-моделей или для валидации предсказаний. Для мицелл, крупных агрегатов и мезофаз требуются укрупнённые модели, DPD или методы поля, а макроскопическая реология требует многоуровневой модели и обязательной экспериментальной проверки. Из-за вычислительной стоимости этот блок целесообразно применять не для массового скрининга, а для физической проверки и углублённого анализа 5–20	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
			наиболее перспективных структур. Его результаты используются как физические дескрипторы и как средство валидации; приоритет 2.	
11	Разработка цифровых решений	Автоматизированные лабораторные системы и валидация прогнозов ПАВ для синтеза полимеров	Программно-аппаратные комплексы для автоматизации лабораторного тестирования ПАВ и смесей: высокопроизводительный скрининг (HTS) поверхностного натяжения, СМС, межфазного натяжения, фазового поведения, реологии; системы сбора и обработки экспериментальных данных; модули планирования минимального плана экспериментов на основе прогнозов ML-моделей; обратная связь «прогноз → эксперимент → обновление модели» «Минимальный план экспериментов» лучше заменить на «активное обучение и байесовская оптимизация»: алгоритм должен выбирать следующий наиболее информативный или перспективный опыт с учётом технологических ограничений и нескольких целевых свойств. Целевой цикл: «прогноз → следующий опыт → синтез/испытание → контроль качества данных → обновление модели». До полной роботизации необходимо обеспечить стандартные протоколы, прослеживаемость образцов и автоматический возврат результатов. В качестве референса подхода применимы AIChemBuddy/BoFire. Роль блока: замкнутый экспериментальный контур и самообучение модели; приоритет 1, возможен поэтапный запуск без полной роботизации.	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
12	Разработка цифровых решений	Разработка ИИ-модели или платформы для обучения ее на конкретном направлении синтеза полимеров	Создание ИИ и обучение его на конкретном направлении синтеза полиолефинов. Загрузка большого массива научных статей, регламентов, описания технологий и т.д. Предполагается, что на основе этих данных ИИ будет отвечать на любые сложные вопросы в области синтеза ПО. Конечная цель - формирование единой базы знаний по синтезу полипропилена/полиэтилена	
13	Разработка цифровых решений	Разработка единой ИИ-платформы поддержки жизненного цикла пилотных испытаний	На основе исторических данных ИИ предлагает сценарии ПИ, оценивает время, возможность совмещения испытаний, проводит приоритезацию, после проведения ПИ анализирует данные и формирует отчеты.	
14	Разработка цифровых решений	Разработка программно-аппаратной ИИ-платформы для планирования минимально достаточной серии синтезов полимеров на действующей пилотной установке	Создание отечественной программно-аппаратной платформы, в которой ИИ-модели с калиброванной оценкой неопределённости планируют минимально достаточную серию синтезов на действующей пилотной установке, а результаты синтеза и характеристики автоматически возвращаются в модель, замыкая цикл «предсказание → эксперимент → переобучение». Целевой результат — выход на заданный набор свойств марки за 50–70% от исходно прогнозируемого числа экспериментов, что соответствует показателям мировой практики применения последовательного обучения, а в полностью автоматизированном контуре — ускорение до 10–25 раз. В мировой практике есть Citrine Informatics — платформа для материаловедческой информатики и AI-ориентированной разработки продуктов. Самообучающийся контур ускоренной разработки марок полиолефинов: платформа материаловедческой информатики, интегрированная с пилотной установкой синтеза (Closed-Loop AI-Driven Polyolefin Development) Разрабатываются косвенные предикторы, позволяющие оценивать свойства материалов Citrine позволяет компании (Lyondell Basell применяет): ускорять продуктовую разработку;	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
			получать дополнительные инсайты по всей цепочке создания ценности — от сырья до готовых продуктов; эффективно открывать новые возможности на стыке разработки материалов и дискретных продуктов.	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
15	Разработка цифровых решений	Разработка ИИ-модели, объясняющей и предсказывающей свойства марки полимера	Цель работы — построить ИИ-модели, объясняющие и предсказывающие свойства марки полипропилена по данным структуры, применяемого катализатора, технологическим параметрам синтеза и переработки. Построение ИИ-моделей по связи молекулярной и надмолекулярной структуры со свойствами полипропилена: перенос закономерностей с титан-магниевых на металлоценовые каталитические системы по данным пилотной установки синтеза полиолефинов Модели строятся по иерархии трёх уровней: Уровень 1 — молекулярная структура: молекулярная масса и ширина её распределения, стереорегулярность (mm-fraction, состав триад), растворимая фракция; для сополимеров — содержание этилена и равномерность его распределения по цепи. Уровень 2 — надмолекулярная организация: степень кристалличности, температуры и интервалы плавления и кристаллизации, распределение длин кристаллизуемых последовательностей, доля аморфной фазы, вязкость расплава. Уровень 3 — свойства: модуль упругости, предел текучести и прочность при разрыве, относительное удлинение, ударная вязкость при рабочих и низких температурах, твёрдость, температура размягчения по Вика. Принципиальное требование: уровень 1 связывается с уровнем 3 только через уровень 2. Именно это отличает подход от прямых производственных зависимостей вида «показатель текучести расплава (ПТР) — свойство», которые работают лишь внутри одной каталитической системы и теряют силу при её смене. Обучающая база — гомополимеры с ПТР 3, 25 и 45 г/10 мин, полученные на титан-магниевых катализаторах различного типа, с полными данными по структуре, условиям синтеза и свойствам.	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
			Проверка — гомополимеры с ПТР 3, 25, 55 и 1500 г/10 мин, синтезируемые на собственном металлоценовом катализаторе на пилотной установке, с фиксацией предсказания до синтеза. Целевой результат — распространение моделей на рандом-сополимеры пропилена металлоценового синтеза.	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
16	Разработка цифровых решений	Разработка ИИ-инженерной платформы для технологической проработки процессов нефтехимии и нефтепереработки.	Современные нефтехимические и нефтеперерабатывающие производства требуют ускорения предпроектной и проектной проработки, обработки большого объема инженерной документации и снижения доли повторяющихся ручных операций. Задача - Разработать минимально жизнеспособный продукт (MVP) и проверку концепции (PoC) ИИ-агента, а также архитектурный задел промышленной системы для автоматизированной подготовки Process Design Basis, канонической модели процесса, графа PFD, черновых PFD/P&ID, вариативности реализации технологии, расчетных спецификаций, моделей в симуляторе процесса и инженерных экспортных пакетов.	Можно скачать расширенное ТЗ https://polymerinnovations.sk.ru/files/110/tz3.docx
17	Разработка цифровых решений	Разработка ИИ-инструментов для ускорения CFD-анализа в процессах синтеза полимеров.	Разработать программный инструмент для ускорения CFD-расчетов с одновременным учетом тепломассообмена и кинетики химических реакций при допустимой потере точности на примере моделирования химического реактора приготовления ЭККЭ (Это органическое соединение, которое используется в качестве мономера для получения термостабильных полимеров, в том числе полиэфиркетонкетонов) . В рамках проекта предполагается использование кинетической модели синтеза 1,4 бис(феноксibenзоил) бензола ЭККЭ. Наиболее ресурсоемким этапом CFD-анализа является итерационный расчет, поэтому основной целью проекта является его ускорение. Второстепенной целью является ускорение других этапов CFD-анализа.	Можно скачать расширенное ТЗ https://polymerinnovations.sk.ru/files/110/tz4.docx
18	Разработка цифровых решений	Разработка ПО для определения размеров частиц, распределения по размерам частиц, формы частиц с использованием методов машинного зрения.	Разработка программного обеспечения или ИИ-агента для определения размеров частиц (в диапазонах 5-50 мкм и 75-4000 мкм), распределения по размерам частиц, формы частиц по заранее сделанным снимкам. В первом модуле происходит обучение модели по анализу изображений, во втором модуле - статистический анализ полученных изображений.	

№	Направление	Тематика	Описание тематики (всплывающий список при нажатии на название тематики или стрелочку для раскрытия)	Приложения к тематике/Область
19	Разработка цифровых решений	Разработка методов онлайн-анализа содержания веществ в товарной продукте без использования стандартных дорогостоящих хроматографов для оперативного контроля и управления	Подбор онлайн-анализаторов для определения содержания спирта (метанола) в товарном МТБЭ (метил-трет-бутиловом эфире). В настоящее время контроль осуществляется по лабораторному анализу (большие затраты времени) или с помощью дорогостоящего хроматографа.	
20	Разработка цифровых решений	Системы мониторинга работы реакторов, в т.ч. реакторов гидрирования для отслеживания потенциально опасных изменений режимов работы в реальном времени	Подбор методов мониторинга реакторов адиабатического и изотермического гидрирования этан-этиленовой фракции (либо фр. С2-) на производствах этилена в СИБУР - АГХК, ЗСНХ, НКНХ, КОС, СК, ТНХ, СХП. Контролируемые параметры (в зависимости от типа реактора): - температуры входа / выхода ЭЭФ / фр. С2— расчет теплового эффекта реакций, определение оптимального температурного профиля, определение степени протекания побочных реакций (гидрирования этилена в этан), определение тепловой мощности реактора (сравнение с проектным); - давление паров метанола в контуре охлаждения реактора (для изотермических реакторов), температура метанола в контуре, расход воды на охлаждение и конденсацию паров метанола – расчет тепловой производительности контура, его сравнение с проектными показателями, соотнесение с тепловыми эффектами реакций гидрирования, расчет прямых и побочных реакций.	