ХИМИЯ И ТЕХНОЛОГИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

УДК 66.011 РАСЧЕТ МАТЕРИАЛЬНОГО БАЛАНСА МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОННЫХ ТАБЛИЦ «EXCEL»

В.В. Апанасенко, ведущий научный сотрудник ОАО «Гиредмет»

e-mail: asla new@rambler.ru

оказано, что для автоматизации расчёта материального баланса технологических процессов можно успешно использовать программу «Excel» из пакета Microsoft Office, что позволяет сделать балансовые расчёты менее трудоёмкими, без труда просчитывать большое количество вариантов и, таким образом, выбирать оптимальный вариант для реализации технологического процесса. Рассмотрены особенности балансовых схем, составленных в «Excel». Приведен пример расчёта материального баланса процесса газоочистки в производстве трихлорсилана.

It has been shown, that for automation of the calculation of material balance of technological processes one can successfully use Microsoft Excel, which allows to make balance calculations less laborious, to calculate large quantity of versions easily and thus to choose an optimal variant for the realization of technical process. Peculiarities of balance schemes made with the use of "Excel" were considered. An example of the calculation of material balance of the process of gas purification in production of trichlorosilane is given

Ключевые слова: материальный баланс, расчёт, Excel, материальные потоки, газоочистка, хлорсиланы. Keywords: material balance, the calculation, Excel, data materials of gas purification, chlorosilanesi

Расчет материального баланса производства относится, как известно, к одним из важнейших этапов процесса проектирования. Материальный баланс необходим для всестороннего анализа и оценки показателей технологической схемы, получения данных, требуемых при выборе оборудования и определения количества потребляемых и получающихся в процессе производства продуктов. По сути, материальный баланс являтся количественным выражением технологической схемы [1].

Существуют специализированные программные продукты, определяющие необходимые количественные характеристики технологического процесса, в том числе, и материальный баланс. Несмотря на их серьёзные возможности и очевидные несомненные достоинства, использование таких программ не всегда удобно, не говоря уже об их дороговизне. Например, в технологии редких металлов ряд ключевых технологических процессов характеризуется уникальностью, их химизм не изучен должным образом, а значительная доля расчётов основана на эмпирических зависимостях. Расчёт материального баланса подобного процесса также изобилует эмпирическими закономерностями и допущениями, что создаёт сложности при использовании специализированных программ, нацеленных, в первую очередь, на типовые процессы.

Расчёт материального баланса технологического процесса зачастую быстрее и удобнее выполнять с помощью балансовой схемы, составленной с использованием электронных таблиц, в частности, в программе «Excel» из пакета Microsoft Office [2]. Не пытаясь утверждать, что предлагаемый нами метод расчёта материального баланса является всегда лучшим, считаем, что в ряде случаев такой путь расчёта баланса является наиболее удобным и эффективным.

«Excel» – программный продукт, созданный специально для работы с таблицами, поэтому составление в нём балансовой схемы в форме таблиц легко и удобно. Кроме того, ввод формул в ячей-ки «Excel» осуществляется в естественной мате-матической форме, следовательно, он может быть легко освоен в необходимом объёме инженера-ми-технологами, проектировщиками и студен-тами металлургических специальностей без дополнительного специализированного обучения.

Балансовые расчёты в «Excel» особенно целесообразны для тех технологических схем, которые предполагается неоднократно тиражировать с теми или другими вариациями. Внесение изменений в схему расчёта, добавление или исключение из схемы балансовых операций, их объединение или, напротив, детализация не являются трудоёмкой процедурой, если, конечно, изменения не носят глобального для данной схемы характера.

Замена частей балансовой схемы не всегда имеет смысл, так как множит количество вариантов схем. Иногда удобнее создать универсальную балансовую схему, содержащую части с разными алгоритмами расчёта одних и тех же операций. Имеющаяся в «Excel» логическая функция «ЕСЛИ» позволяет вы-полнить расчёт баланса, используя либо одну часть расчётной схемы, либо другую. Нужно лишь выбрать соответствующее заданное значение.

Балансовую схему можно «разрезать» на несколько частей, каждая из которых будет

находиться в отдельном экселевском файле, и их можно разрабатывать независимо друг от друга. Затем разрезанные части балансовой схемы не сложно состыковать друг с другом, «сшив» их путём установления связей между соответствующими ячейками разных частей.

Первоначальный вариант балансовой схемы в «Excel» может быть простым и компактным за счёт объединения балансовых операций, поэтому такой вариант будет сделан быстро. Затем, по мере необходимости, можно детализировать отдельные стадии балансовой схемы, увеличивая число балансовых операций и повышая тем самым точность расчёта.

Безусловно, подобная балансовая схема расчёта может быть составлена на каком-либо языке программирования, но это задача для специалиста-программиста, тогда как приложением «Excel» в требуемом объёме может овладеть практически любой производственник. Для составления балансовых схем в «Excel» вполне можно ограничиться скромной частью математического аппарата, заложенного в данной программе.

Что же представляет собой схема балансового расчёта в «Excel» и как она строится?

В основе балансовой расчётной схемы лежат таблицы, соответствующие балансовым операциям. Ячейки таблиц связаны между собой необходимыми формулами. Все другие требуемые величины рассчитывают из данных, полученных в ячейках этих таблиц.

Наиболее удачным типом балансовых таблиц, на наш взгляд, являются классические таблицы «Приход-расход», составляемые для каждой балансовой операции (рис. 1) и располагающиеся последовательно друг за другом на листе «Excel». Таблицы «Приход-расход» наглядны, удобны и легко читаются технологами и проектировщиками. Итоговые строки «Всего» позволяют контролировать правильность выполнения расчёта данной балансовой операции и тем самым избегать ошибок. В таблицах «Приход-расход» можно вставить столбцы, характеризующие материальные потоки во всех необходимых единицах измерения: т/год, кг/ч, тыс. нм³/год, кг на тонну какого-либо реагента или готового продукта и т.д., другими словами -«на все случаи жизни». В качестве базового столбца, определяющего расчёты в таблицах, целесообразно выбрать столбец массового потока с годовой производительностью («т/год»). Так как на разных технологических операциях возможно различное количество рабочих дней в году, то значения одних и тех же материальных потоков, приведённых из расчёта на час или сутки, в таблицах разных балансовых операций могут не совпадать. Тогда как потоки «т/год», как правило, не претерпевают подобных трансформаций. Столбцы материальных потоков в других единицах измерения рассчитывают на основе базового потока. Для того чтобы таблицы «Приход– расход» не становились слишком громоздкими из-за большого числа столбцов, имеет смысл отобрать самые необходимые для данной схемы столбцы потоков, а остальные – «до поры, до времени» скрыть, используя соответствующую опцию «Excel».

Формулы, помещаемые в ячейки базового столбца таблицы «Приход-расход», определяются видом расчёта. Процессы, основанные на химических реакциях, рассчитывают по их уравнениям. Для удобства расчётов такого типа в один из столбцов следует поместить молярные массы компонентов (рис. 1). Массообменные процессы рассчитывают в соответствии с принятым для каждого из них алгоритмом. Как правило, наиболее часто приходится рассчитывать процессы, связанные с механическим распределением потоков или их компонентов по продуктам данной операции. В этом случае долю перехода компонента в продукт относят к заданным значениям, для которых в балансовой схеме предусматривают возможность легкого и удобного изменения.

Компоненты материальных потоков, переходящих с одной балансовой операции на другую, связывают между собой соответствующими связями. Расчёт баланса по отдельным компонентам материальных потоков может осуществляться как от первой балансовой операции к последующим, так и наоборот, в зависимости от логики расчёта, т.е., «снизу вверх» или «сверху вниз». При этом возможны разнообразные варианты расчёта. Например, иногда расчёт по основному компоненту выполняют «снизу вверх» - от заданного количества конечного продукта до некой определяющей балансовой операции, где протекают основные химические реакции. Расчёт по остальным компонентам ведут с той балансовой операции, на которой они образуются, «сверху вниз» до конечных продуктов. Все эти варианты расчёта легко реализуются в «Excel».

В процессе редактирования схем «Excel» позволяет легко тиражировать отдельные формулы в ячейках таблиц, фрагменты балансовых таблиц и даже целые балансовые операции, поэтому создание последующих таблиц упрощается.

Вестник МИТХТ, 2009, т. 4, № 4

		-									
	A	В	С	D	E	F	G	н		J	ĸ
1	Зада	анные значения:							_		
2	Материалі	ьные потоки, т/год:	H ₂	HCI	SiHCI ₃	SiCl₄	SiH ₂ Cl ₂	N ₂			
3	1	Газы на очистку:	284.72	14.82	113.62	5.68	58.40	365.36	1		
4									1		
5		Други	е усповия:					Pac	ссчитани	ые зна	чения:
6	Концонтрания			17.0	1		Солоржании				42.22
7	Концентрация	Naon B Raychineckom	растворе, /8.	17.0			Содержани	e noi b lasax	после очис	тки, мт/м .	42.32
-	коэффициенти	воытка маон сверх ст	ехиометрии:	1.00			¥				
0	Степень ула	вливания нст в неитра.	лизаторе, %:	99			уравнения реакции	, протекаюн	цих в проц	ессе очис	гки:
9		Про	мывка кека:	Нет	(Есть/Нет)		SIHCI ₃ + 3Na	$\mathbf{OH} = \mathbf{SiO}_2 + \mathbf{SiO}_2$	3NaCl + H ₂	$_2 + H_2O$	
10	Соотношение	Т : Ж при промывке ке	ка, Т:Ж = 1:	5			SiCl ₄ + 4NaOl	$H = SiO_2 + 41$	$NaCl + 2H_2$	0	
11	Влажность ке	ка (массовая доля вод	ы в кеке), %:	60			SiH ₂ Cl ₂ + 2Na	$OH = SiO_2 +$	- 2NaCl + 2	H ₂	
12	$HCl + NaOH = NaCl + H_2O$										
13		ПРИХОД на операцию РАСХОЛ на операции									
	Наименование			F		r					
14	операции	Наименование	Молярная	т/год	кг/ч	% масс.	Наименование	Молярная	т/гол	кг/ч	% масс.
		продукта	масса				продукта	масса			
15	Нейтрализация	Отходящие газы					Пульпа на				
16	отходящих	на очистку	5.3963	842.59	96.19	44.07	фильтрацию	22.2316	1 257.78	143.58	65.78
17	газов	в том числе:					в том числе:				
18		SiHCl ₃	135.4529	113.62	12.97	13.48	NaOH	39.9969	13.47	1.54	1.07
19		SiCL	169,898	5.68	0.65	0.67	NaCl	58 443	245.97	28.08	19.56
20		SiHaCla	101.0078	58 40	6.67	6.93	SiO	60.084	87.15	0.05	6.03
21		H.	2 0158	284 72	22.50	22 70	H O	19 0149	011 10	9.93	72.44
21		HC1	2.0130	14.02	1 40	33.79	120	18.0148	911.19	104.02	100.00
22			20.4009	14.82	1.09	1.76	F			сумма:	100.00
23		N ₂	28.014	365.36	41.71	43.36	1 азы на контроль-				
24					сумма:	100.00	ную очистку	4.1863	654.25	74.69	34.22
25		Каустический					в том числе:				
26		раствор	19.8714	1 069.43	122.08	55.93	H ₂	2.0158	288.74	32.96	44.13
27		в том числе:					HC1	36.4609	0.15	0.02	0.02
28		NaOH	39.9969	181.80	20.75	17.00	N ₂	28.014	365.36	41.71	55.84
29		H ₂ O	18.0148	887.63	101.33	83.00	2			CVMM9:	100.00
30			10.0110	007.05	CVMM9.	100.00				cymma.	100.00
21		D	0.10(7	1 012 02	210.27	100.00	D	0.000(1 0 1 0 0 0	010.05	100.00
31		Bcero:	9.1007	1 912.02	218.27	100.00	BCEFO:	8.9826	1 912.02	218.27	100.00
32		в том числе:					в том числе:				
33		SiHCl ₃	135.4529	113.62	12.97	5.94	H ₂	2.0158	288.74	32.96	15.10
34		SiCl ₄	169.898	5.68	0.65	0.30	HCl	36.4609	0.15	0.02	0.01
35		SiH ₂ Cl ₂	101.0078	58.40	6.67	3.05	N ₂	28.014	365.36	41.71	19.11
36		H ₂	2.0158	284.72	32.50	14.89	H ₂ O	18.0148	911.19	104.02	47.66
37		HCl	36.4609	14.82	1.69	0.77	NaOH	39.9969	13.47	1.54	0.70
38		N2	28.014	365.36	41.71	19.11	NaCl	58 443	245 97	28.08	12.86
39		NaOH	39 9969	181.80	20.75	9.51	SiO	60.084	87.15	0.05	4 56
40		H	18 0148	887.63	101 33	46.42	5107	00.004	07.15	9.95	100.00
41		1120	10.0140	887.05	101.55	100.00				сумма:	100.00
41					сумма:	100.00					
42											
43	Horn corronaria	Г	ІРИХОД на с	операцию			F	РАСХОД на	операции		
\square	паименование	Наименование	Модярная				Наименование	Модариза			
44	операции	пролукта	масса	т/год	кг/час	% масс.	полукта	масса	т/год	кг/час	% масс.
45	Dun man-	Пульпена					Напромуни	muccu			
40	Фильтрация	пульна из	22.2216	1 055 50	1 42 50	100.00	пепромытый кек			10.11	
40	пульпы	нентрализатора	22.2316	1 257.78	143.58	100.00	(кольматант)	24.9295	380.27	43.41	30.23
47		в том числе:					в том числе:				
48		NaOH	39.9969	13.47	1.54	1.07	NaOH	39.9969	3.37	0.38	0.89
49		NaCl	58.443	245.97	28.08	19.56	NaCl	58.443	61.59	7.03	16.20
50		SiO ₂	60.084	87.15	9.95	6.93	SiO ₂	60.084	87.15	9.95	22.92
51		H ₂ O	18.0148	911.19	104.02	72.44	H ₂ O	18.0148	228.16	26.05	60.00
52					сумма.	100.00	-			CVMM9.	100.00
53		Вола на промирии				100.00	Фильтрет			cymmd.	100.00
54		иенее	19 01 49	0.00	0.00	0.00		21 2257	077 50	100.17	(0.77
54		NCKA	10.0148	0.00	0.00	0.00	на перераоотку	21.2357	877.50	100.17	09.77
55		в том числе:					в том числе:				
56		H ₂ O	18.0148	0.00	0.00		NaOH	39.9969	10.09	1.15	1.15
57							NaCl	58.443	184.38	21.05	21.01
58							H ₂ O	18.0148	683.03	77.97	77.84
59										сумма:	100.00
60		Bcero:	22.2316	1 257.78	143.58	100.00	Bcero:	22.2316	1 257.78	143.58	100.00
61		в том числе:					в том числе:				
62		NaOH	30 0060	13 47	1.54	1.07	NaOH	30 0060	12 47	1 54	1.07
63		NaCl	58 //2	245.07	20.00	10.54	NaCl	59 442	245.07	20.00	10.54
03		INACI R:O	30.443	243.97	28.08	19.50	NaCI	58.443	245.97	28.08	19.56
64		SIO ₂	60.084	87.15	9.95	6.93	SIO ₂	60.084	87.15	9.95	6.93
65		H ₂ O	18.0148	911.19	104.02	72.44	H ₂ O	18.0148	911.19	104.02	72.44
66					evmme.	100.00					100.00

Рис. 1. Материальный баланс переработки газообразных отходов производства трихлорсилана, составленный в «Excel». Вариант без промывки кека.

Каждый файл (рабочая книга) приложения «Excel» способен содержать не менее 255 рабочих листов, ячейки которых можно связать нужным образом. Такое количество

листов в балансовых расчётах почти наверняка востребовано не будет, но это позволяет не заниматься их чрезмерной экономией. Поэтому на разных листах целесообразно разместить отдельные расчётные блоки баланса. Например, для расчёта материального баланса переработки отходов производства на отдельных листах можно расположить блоки переработки газообразных отходов, переработки жидких отходов, переработки твёрдых отходов и др.

Представляется целесообразным поместить на отдельном листе удельный расход потребляемых и получающихся в процессе производства продуктов и их соответствие контрактным показателям. На другом отдельном листе можно привести итоговую балансовую таблицу «Приход-расход» рассчитываемого процесса в целом, где собраны количества всех реагентов, используемых в технологическом процессе, и всех получаемых продуктов производства. Данные для итоговой таблицы берутся из таблиц отдельных балансовых операций Итоговая схемы. балансовая таблица даёт возможность проанализировать долевой вклад потребляемых и получающихся в процессе произволства продуктов, в том числе, и с использованием графических диаграмм.

Весьма полезными для анализа технологического процесса являются балансовые таблицы по важнейшим элементам или веществам, которые легко составить в «Excel» на основе таблиц «Приход-расход» или итоговых таблиц. Например, для процессов с участием водных растворов целесообразно представить баланс воды данного производитоговой ства в отдельной таблице «Приход-расход». В этой таблице сводят количество всей воды, используемой для приготовления реагентов, промывки осадков, аппаратов и т.п., а также воды, уходящей из схемы в составе товарной продукции и отходов производства, сокового пара и т.д. Анализ баланса воды позволяет облегчить решение вопросов, связанных с её экономией и использованием повторным в ланном технологическом процессе. Поскольку вода нередко является участником химических реакций, то количества потребляемой получающейся в процессе производства воды могут быть не равны, однако невязка баланса будет точно соответствовать суммарному количеству реакционной воды. которая выделяется и поглощается на всех стадиях производственного процесса.

Основанные на таблицах «Приход-расход», результаты расчёта материального баланса могут

быть представлены в любом необходимом для разработчика или заказчика виде, например, в потоковой форме, требуемой иногда для проектирования. Для этого на отдельном листе «Excel» создают таблицы соответствующего вида, ячейки которых связывают с ячейками таблиц «Приход-расход».

Важным дополнением к балансовым материальным потокам являются их физико-химические как плотность. свойства. такие. вязкость. теплоёмкость, поверхностное натяжение, теплопроводность и др. Плотность необходима объёмных вычисления балансовых для потоков (м³/ч и т.п.). Другие свойства нужны выполнения проектных для и конструкторских работ, отталкивающихся от балансовых расчётов. Для вычисления свойств потоков также удобно использовать специально вылеленные листы «Excel». Свойства рассчитывают, подбирая соответствующие аналиучитывающие уравнения, тические состав. агрегатное состояние, температуру и давление если это необходимо - потока. Состав потока переносится ИЗ таблиц «Приход-расход» материального баланса. Температура и давление потоков являются заданными значениями. Для увеличения надёжности расчёта свойств можно провести сопоставление значений, полученных по различным уравнениям, или сравнить с табличными литературными данными и выбрать наиболее адекватные аналитические зависимости.

При изменении пользователем заданных значений «Excel», как электронная таблица, осуществляет автоматический пересчёт всех связанных с этими значениями частей расчетной схемы: соответствующих материальных потоков, их физико-химических свойств, удельных расходных показателей и т.д. Это позволяет без труда просчитывать большое количество вариантов, проводить их сравнительный анализ и выбирать оптимальный вариант для реализации технологического процесса.

Теперь о некоторых особенностях расчёта материального баланса в «Excel».

Количество значащих цифр в ячейках, показанных на экране монитора или в печатном варианте таблицы «Excel», обычно невелико, однако «Excel» осуществляет вычисления с высокой точностью, более чем достаточной для балансовых расчётов. В электронной версии материального баланса можно увидеть точное число в любой интересующей пользователя ячейке (обычно это 15 значащих цифр). Поэтому печатной версии баланса должна сопутствовать его электронная копия.

Среди достоинств программы «Excel» следует отметить возможность выполнения вычислений методом итераций (эту опцию необходимо включить в параметрах «Excel»), что позволяет рассчитывать схемы с оборотами, т.е. с возвратом материальных потоков на предыдущие балансовые операции. Однако в некоторых случаях со сложными видами итерационных расчётов возможны сбои с «зацикливанием» работы «Excel», когда программа не может найти решение. Поэтому следует минимизировать количество итерационных расчётов, по возможности заменяя их формулами, не содержащими циклических ссылок.

Рассмотрим конкретный пример расчёта материального баланса очистки отходящих газов в производстве трихлорсилана щелочным реагентом (рис. 1) [3].

Заданные значения материальных потоков неочищенных газов, направляемых на нейтрализацию, а также другие заданные условия, определяющие процесс переработки отходов, помещаем слева на верхних строках листа. Справа на верхних строках размещаем ячейки с некоторыми принципиально важными рассчитанными значениями, на которые надо обращать внимание, вводя или изменяя заданные значения. Для примера здесь приведено получаемое в процессе расчёта значение объёмной концентрации хлористого водорода в очищенном газе, которое необходимо контролировать с целью его соответствия санитарным нормам.

Из таблицы заданных значений (ячейки C3:H3) потоки компонентов неочищенного газа переносим в первую балансовую таблицу «Нейтрализация отходящих газов» в графу «Приход на операцию, т/год» (ячейки D18:D23).

Принимаем, что SiHCl₃, SiCl₄ и SiH₂Cl₂ в процессе газоочистки полностью гидролизуются Небольшая щелочным раствором. часть хлороводорода, содержавшегося в неочищенных газах, не улавливается каустическим раствором и в составе очищенной газовой смеси направляется на контрольную газоочистку. Основная же часть хлороводорода (в нашем примере это 99% заданное значение) нейтрализуется щёлочью. Количество газообразного HCl, уходящего на контрольную газоочистку (ячейка I27). рассчитываем, исходя из заданного количества хлороводорода в неочищенных газах с учётом улавливания степени HCl каустическим раствором, = D37*(100 - D8)/100, получаем 0.15 т/гол.

В процессе нейтрализации отходящих газов раствором щёлочи для более полного связывания хлороводорода гидроксид натрия берут в некотором избытке, который определяется заданным значением коэффициента избытка NaOH сверх стехиометрии (в данном случае это 1.08). Количество NaOH в свежем каустическом растворе (D28) рассчитываем, исходя из количества нейтрализуемых хлорсиланов и хлороводорода в соответствие с уравнениями реакций, приведёнными на рис. 1, т.е. = (D33/C33*3 + D34/C34*4 + D35/C35*2 + (D37 - I27)/C37)*C28*D7 (181.80 т/год). Количество воды в свежем каустическом растворе (D29) определяем по количеству в этом растворе гидроксида натрия и по заданному значению концентрации щелочи (в массовых долях): = D28/D6*(100 – D6) (887.63 т/год).

Остаточное количество NaOH в пульпе на фильтрацию (I18) вычисляем по разности между потоком гидроксида натрия в свежем каустическом растворе и его количеством, израсходованным на нейтрализацию: = D28 – (D33/C33*3 + D34/C34*4 + D35/C35*2 + (D37 – I27)/C37)*H18 (13.47 т/год).

Весь SiO₂, содержащийся в пульпе (I20), образуется по реакциям взаимодействия хлорсиланов с каустическим раствором и рассчитывается по соответствующим уравнениям реакций (рис. 1), исходя из количества хлорсиланов: = (D33/C33 + D34/C34 + D35/C35)*H20 (87.15 т/год). Количество хлорида натрия в пульпе на фильтрацию (I19) вычисляем также по уравнениям реакций = (D33/C33*3 + D34/C34*4 + D35/C35*2 + (D37 – I27)/C37)*H19 (245.97 т/год). Количество воды в пульпе (I21) определяем как сумму воды в свежем каустическом растворе и реакционной воды = D40 + (D33/C33 + D34/C34*2 + (D37 – I27)/C37)*H21 (911.19 т/год).

Поток водорода, уходящий с газами на контрольную очистку (I26), определяется как сумма количества исходного водорода (в отходящих газах на очистку) и водорода, образующегося по реакциям взаимодействия трихлорсилана и дихлорсилана со щелочью: = D36 + (D33/C33 + D35/C35*2)*H26 (288.74 т/год).

Потоки компонентов пульпы, получаемой в процессе нейтрализации отходящих газов (ячейки I18:I21), переносим на следующую балансовую операцию – операцию фильтра-(ячейки D48:D51), шии пульпы гле поступающие вещества распределяем по двум продуктам – кеку (cake) и фильтрату (filtrate). Возможны два варианта осуществления процесса фильтрации пульпы - с промывкой кека на фильтре и без таковой. В первом случае к потоку воды в пульпе добавляется промывная вода – G(H₂O)_w. Поток воды на промывку кека вычисляем следующим образом:

$$G(H_2O)_w = n \cdot G(SiO_2), \tag{1}$$

где n – заданное соотношение количеств промывной воды и твёрдой части кека (т.е. $n = \mathcal{K}$: T, ячейка D10).

Для варианта без промывки кека поток промывной воды, естественно, отсутствует, т.е $G(H_2O)_w = 0.$

Расчёт состава и количества кека и фильтрата основывается на известных для данной операции потоках, к которым относятся потоки щелочи – G(NaOH), ячейка D62 (13.47 т/год), хлорида натрия – G(NaCl), ячейка D63 (245.97 т/год), и диоксида кремния – $G(SiO_2)$, ячейка D64 (87.15 т/год). Ещё одной известной величиной является поток воды – $G(H_2O)$, который, кроме воды, содержащейся в пульпе, может включать и промывную воду (ячейка D65). Кроме этих потоков в расчётах используем и заданную влажность кека (W), т.е. массовую долю воды в получаемом в процессе фильтрации кеке (в нашем примере W = 60%, ячейка D11).

Расчёт распределения твёрдого SiO₂ прост: принимаем, что SiO₂ полностью переходит в кек, т.е $G(SiO_2)_c = G(SiO_2)$. Что касается других компонентов, то, в первую очередь, определим потоки воды и растворимых соединений, которые переходят в кек. Количества каждого из веществ в фильтрате выразим в виде разности соответствующих потоков, приходящих на операцию фильтрации и переходящих в кек, например: $G(H_2O)_f = G(H_2O) - G(H_2O)_c$.

Сложность нахождения $G(H_2O)_c$, $G(NaOH)_c$ и G(NaCl)_с в варианте без промывки кека заключается в том, что мы не можем вычислить их непосредственно, используя известные потоки и заданные условия. Для определения потоков необходимо составить данных систему соответствующих уравнений, откуда можно будет их выразить в явной форме. $G(H_2O)_c$, Формулы для определения G(NaOH)_c и G(NaCl)_c в каждом из двух вариантов процесса - с промывкой кека на фильтре и без промывки – будут разными.

Рассмотрим сначала первый вариант – вариант без промывки кека.

В этом случае растворённые соединения – NaOH и NaCl – распределяются между твёрдой и жидкой фазами пропорционально распределению воды между этими фазами. Обозначим за x количество воды в кеке, т.е. $x = G(H_2O)_c$. Тогда

$$G(NaOH)_{c} = x \cdot \frac{G(NaOH)}{G(H_{2}O)}, \qquad (2)$$

$$G(NaCl)_c = x \cdot \frac{G(NaCl)}{G(H_2O)}.$$
 (3)

Таким образом, определив x, можно затем найти $G(NaOH)_c$ и $G(NaCl)_c$. Для нахождения x выразим заданное значение влажности кека (W):

$$W = \frac{G(H_2O)_c}{G(H_2O)_c + G(NaOH)_c + G(NaCl)_c + G(SiO_2)_c} \cdot 100.$$
(4)

Или

Откуда

 $\frac{W}{100} = \frac{x}{x + x \cdot \frac{G(NaOH)}{G(H_2O)} + x \cdot \frac{G(NaCl)}{G(H_2O)} + G(SiO_2)}$ (5)

$$x = \frac{G(SiO_2)}{\frac{100}{W} - \left(1 + \frac{G(NaOH) + G(NaCl)}{G(H_2O)}\right)}$$
(228.16 т/год). (6)

Второй вариант – вариант с промывкой кека на фильтре. Для этого случая принимаем, что в результате промывки водой в кеке не остаётся растворимых веществ, т.е. $G(NaOH)_c = 0$ и $G(NaCl)_c = 0$. Формула для расчёта *х* упрощается:

$$x = \frac{G(SiO_2)}{\frac{100}{W} - 1}$$
(130.72 т/год). (7)

Для того, чтобы предусмотреть возможность функционирования обоих вариантов процесса (с промывкой кека и без промывки) в одной балансовой схеме, можно воспользоваться встроенной в «Excel» логической функцией «ЕСЛИ». Для этого в качестве дополнительного заданного условия вводим условие, называющееся «Промывка кека:» и имеющее только два значения - «Есть» и «Нет» (ячейка D9). В ячейку I51, где вычисляется значение x, помещаем формулу: = ЕСЛИ(D9 = "Есть"; D64/(100/D11 -1); D64/(100/D11 – (1 + (D62 + D63)/D65))). Тогда, если выбран вариант с промывкой кека, то расчёт количества воды в кеке (x) производится по формуле (7), для варианта без промывки кека – по формуле (6). Функцию «ЕСЛИ» с выбором данных вариантов необходимо также использовать в ячейках І48 и І49, где рассчитываются количества растворённых соединений в кеке. Для ячейки I48 (поток NaOH в кеке), формула выглядит следующим образом: = ЕСЛИ(D9 = "Есть"; 0; I51*D62/D65). В ячейку I49 (поток NaCl в кеке) введена аналогичная формула. В ячейку

Вестник МИТХТ, 2009, т. 4, № 4

D56, где вычисляется поток промывной воды, также необходимо ввести формулу с логической функцией: = ЕСЛИ(D9 = "Есть"; D50*D10; 0).

Функцию «ЕСЛИ» удобно использовать и в тех ячейках, в которые вводятся названия операций или отдельных потоков (они зависят от выбранного варианта фильтрации пульпы). Например, в ячейку А47 введена формула: = ЕСЛИ(D9 = "Есть"; "и промывка кека"; ЕСЛИ(D9 = "Нет"; "")).

Остальные связи в таблицах «Excel» приведённого примера, на наш взгляд, очевидны и в комментариях не нуждаются.

На рис. 2 приведена балансовая таблица операции фильтрации пульпы для варианта с промывкой кека на фильтре.

					-						
	А	В	С	D	E	F	G	н	I	J	к
1	Заданные значения:										
9		Есть (Есть/Нет) SiHCl ₃ + 3NaOH = SiO ₂ + 3NaCl + H ₂ +						, + H ₂ O			
10	Соотношение Т	5			SiCl ₄ + 4NaOH	$I = SiO_2 + 4I$	$NaCl + 2H_2$	0			
11	Влажность кек	60	$\mathbf{SiH}_2\mathbf{Cl}_2 + 2\mathbf{N}\mathbf{a}\mathbf{OH} = \mathbf{SiO}_2 + 2\mathbf{N}\mathbf{a}\mathbf{Cl} + 2\mathbf{H}_2$					H ₂			
12							HCl + NaOH =	= NaCl + H ₂ C)		

юшение г. ж при промывке кека, г. ж – г.	5
ность кека (массовая доля воды в кеке), %:	60

43	Наименование	ПРИХОД на операцию					РАСХОД на операции					
44	операции	Наименование продукта	Молярная масса	т/год	кг/час	% масс.	Наименование продукта	Молярная масса	т/год	кг/час	% масс.	
45	Фильтрация	Пульпа из					Промытый кек					
46	пульпы	нейтрализатора	22.2316	1 257.78	143.58	74.27	(кольматант)	25.0230	217.86	24.87	12.86	
47	и промывка кека	в том числе:					в том числе:					
48		NaOH	39.9969	13.47	1.54	1.07	NaOH	39.9969	0.00	0.00	0.00	
49		NaCl	58.443	245.97	28.08	19.56	NaCl	58.443	0.00	0.00	0.00	
50		SiO ₂	60.084	87.15	9.95	6.93	SiO ₂	60.084	87.15	9.95	40.00	
51		H ₂ O	18.0148	911.19	104.02	72.44	H ₂ O	18.0148	130.72	14.92	60.00	
52					сумма:	100.00				сумма:	100.00	
53		Вода на промывку					Фильтрат вместе с					
54		кека	18.0148	435.73	49.74	25.73	промывной водой	20.4789	1 475.64	168.45	87.14	
55		в том числе:					в том числе:					
56		H ₂ O	18.0148	435.73	49.74		NaOH	39.9969	13.47	1.54	0.91	
57							NaCl	58.443	245.97	28.08	16.67	
58							H ₂ O	18.0148	1 216.20	138.84	82.42	
59										сумма:	100.00	
60		Всего:	20.9687	1 693.50	193.32	100.00	Bcero:	20.9687	1 693.50	193.32	100.00	
61		в том числе:					в том числе:					
62		NaOH	39.9969	13.47	1.54	0.80	NaOH	39.9969	13.47	1.54	0.80	
63		NaCl	58.443	245.97	28.08	14.52	NaCl	58.443	245.97	28.08	14.52	
64		SiO ₂	60.084	87.15	9.95	5.15	SiO ₂	60.084	87.15	9.95	5.15	
65		H ₂ O	18.0148	1 346.92	153.76	79.53	H ₂ O	18.0148	1 346.92	153.76	79.53	
66					сумма:	100.00				CVMM9.	100.00	

Рис. 2. Балансовая операция фильтрации пульпы с промывкой кека.

Материальные потоки и их отдельные компоненты, выраженные в других единицах (в данном примере - это «кг/ч»), а также состав потоков в массовых долях вычисляем на основе данных базового столбца «т/год». Среднюю молярную массу потока рассчитываем, используя данные базового балансового столбца и столбца молярных масс по соответствующим общеизвестным формулам.

Ограниченность объёма данной статьи не позволила рассмотреть в качестве примера существенно более сложный вариант балансовой схемы расчёта. Однако опыт автора по созданию балансовых схем для ряда производств кремнийсодержащих соединений и редких металлов позволяет утверждать, что программа «Excel» является удобным инструментом для расчёта материального баланса производства и в случае гораздо более сложных технологических схем, в том числе, с разветвлениями и оборотами. Поэтому «Excel» может быть рекомендован технологам и проектировщикам для выполнения балансовых расчётов и «привязанных» к ним свойств материальных потоков. Материалы данной статьи также могут оказаться полезными для выполнения курсового и дипломного проектирования студентами вузов.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Болотников, Л. Е. Технологическое проектирование производства редких металлов / Л. Е. Болотников. – М. : Металлургия, 1973. – 472 с.

2. Глушаков С.В. Microsoft Excel 2007 / С. В. Глушаков, А.С. Сурядный. – М.: АСТ, 2009. – 512 с.

3. Кожемякин, В. А. Утилизация отходов в производстве трихлорсилана и поликристаллического кремния / В. А. Кожемякин, А. Н. Почтарев // Цветные металлы. – 2008. - № 10. - C. 65-68.