BRENNISTEINSVETNISAÐFERÐIN TIL FRAMLEIÐSLU Á ÞUNGU VATNI - NOKKRIR ÚTREIKNINGAR

eftir

Guðmund Pálmason

Desember 1957

Brennisteinsvetnisaðferðin
til framleiðslu á þungu vatni

I. Almenn lýsing á aðferðinni og þeim kemisku lögmálum, sem hún byggist á.

Bæði brennisteinsvetni, H_2S, og vatn innihalda nokkurt magn af þunga vetnisisotópnum D (deuterium). Þegar H_2S og vatn standa í snertingu hvort við annað kemst á jafnvægi milli þeirra með tilliti til D-innihalds samkvæmt efnalíkingunni:

$$H_2O + HDS \rightleftarrows HDO + H_2S$$

Jafnvægisstuðullinn fyrir þessa líkingu verður

$$K(T) = \frac{[HDO]\,[H_2S]}{[H_2O]\,[HDS]}$$

Hann er háður hitastiginu, fer minnkandi með vaxandi hitastigi, og á því byggist aðferð sú til framleiðslu á þungu vatni, sem hér er lýst. Einu upplýsingarnar, sem virðast vera fyrirliggjandi um breytingu jafnvægisstuðulsins með hitastigi eru frá A.E. Suess 1), sem gefur eftirfarandi formúlu:

$$K(T) = 0{,}871 \cdot e^{\frac{523}{RT}}$$

þar sem R er í cal/°K-mól og T í °K. Í öllum útreikningum hér á eftir er K(T) reiknað út samkvæmt þessari formúlu. Á línuriti 1 er sýnt, hvernig K breytist með T. Telja má víst, að síðar hafi verið gerðar víðtækari mælingar á K(T) til undirbúnings að byggingu þungavatnsverksmiðju í Bandaríkjunum og mun þær sennilega að finna í eftirfarandi skýrslum, sem ekki munu þó vera fáanlegar enn þá:

1) A.E. Suess: Isotopenaustauschgleichgewichte; FIAT Review of German Science, 1936-1946.

A-364; Theoretical Values of Equilibrium Constants for Deuterium Exchange Reactions Involving Hydrogen Sulfide, Oct. 29. 1942.

M-4323: Deuterium Exchange Equilibrium Constants, - 46 pp Via SAM Laboratories.

100, Rd-146; The Hydrogen Isotopes Deuterium Exchange Equilibrium Constants (Addition and Corrections); Sept. 1942, Fox. T.G.

100, Rd-147; The Hydrogen Isotopes Deuterium Exchange Equilibrium Constants. Aug. 1942, Fox. T.G,

Breytileiki jafnvægisstuðulsins með hitastigi er notaður til að auka innihald vatns af þungu vatni á þann hátt, sem sýnt er lauslega á 1. mynd. Vatn og H_2S streyma hvort á móti öðru gegnum tvo turna, kaldan turn með hitastiginu T_1 og heitan með hitastiginu T_2. Í kalda turninum leitar þunga vatnið úr gasinu í vatnið og D-innihald vatnsins vex því, en í heita turninum leitar þunga vatnið í hina áttina. Milli turnanna er því D-innihald vatnsins og gasins mest. Þaðan er hluti af vatns- og H_2S-streyminu leiddur yfir í annað þrep þar sem D-innihaldið er enn aukið o.s.frv.

Efnarás fyrir verksmiðju

Hagkvæmt er að skipta verksmiðju niður í þrep, sem fara minnkandi eftir því sem D-innihaldið eykst. Fyrsta þrepið verður þá lang stærst og þeir útreikningar, sem gerðir eru hér eiga fyrst og fremst við um það, þó að síðari þrepin séu í engu verulegu frábrugðin því fyrsta. Efnarás fyrir fyrsta og annað þrepið er sýnd á 2. mynd. Til skýringar á táknum þeim, sem notuð eru, er eftirfarandi listi:

18, 19, 34, 35; innan sviga tákna þessar tölur mól af H_2O, HDO, H_2S og HDS

x = mólhlutfall af D í vökvastraumnum

y = mólhlutfall af D í gasstraumnum

$H = \frac{(18)+(19)}{(34)+(35)}$ í gasstraumnum

$S = \frac{(34)+(35)}{(18)+(19)}$ í vökvastraumnum

F = vatnsstreymi inn í kalda turninn á tímaeiningu (mól/sek, kg/sek)

G = H_2S í gasstraumnum frá kalda turninum til heita turnsins á tímaeiningu (mól/sek, kg/sek)

α_1 = gufuþrýstingshlutfall P_{HDO}/P_{H_2O}

α_2 = gufuþrýstingshlutfall P_{HDS}/P_{H_2S}

K_y = jafnvægisstuðull fyrir efnalíkinguna

$$H_2O(\text{gufa}) + HDS(\text{gas}) \rightleftarrows HDO(\text{gufa}) + H_2S(\text{gas})$$

K_x = jafnvægisstuðull fyrir efnalíkinguna

$$H_2O(\text{vökvi}) + HDS(\text{uppleyst}) \rightleftarrows HDO(\text{vökvi}) + H_2S(\text{uppleyst})$$

K_{xy} = jafnvægisstuðull fyrir efnalíkinguna (sama og $K(T)$ hér að framan)

$$H_2O(\text{vökvi}) + HDS(\text{gas}) \rightleftarrows HDO(\text{vökvi}) + H_2S(\text{gas})$$

η = hlutfallið milli strauma í öðru og fyrsta þrepi

Til að tákna kaldan og heitan turn eru notaðir bókstafirnir k og h, t.d. H_h, S_k. Til að tákna vökva og gasstraum eru einnig stundum notaðir bókstafirnir L og G, t.d. $(18)_L$, $(34)_G$.

Til þess að gera sér grein fyrir því á McCabe-Thiele línuriti hvernig turnarnir starfa, er nauðsynlegt að reikna út jafnvægislínur og starfslínur fyrir turnana. Jafnvægislínurnar gefa sambandið milli x og y, ef vökva- og gasstraumarnir eru í kemisku jafnvægi, en starfslínurnar gefa þetta samband einsog það raunverulega er á hverjum stað í turnunum. Jafnvægislínurnar hafa verið reiknaðar út af J.Spevack og eru að finna í skýrslu eftir M.L.Eidinoff og C.F. Hiskey 2), en skýrsla Spevacks er ekki fáanleg enn. Fyrir jafnvægislínurnar gefa þeir eftirfarandi:

$$y = \frac{(1+S)(1+K_yH)\,\alpha_1}{(1+H)(S+K_x)} \cdot X = m \cdot X$$

Við útleiðslu á þessari líkingu er gert ráð fyrir eftirfarandi: a) D-innihald vatnsins og brennisteinsvetnisins er mjög lágt, b) $\alpha_1 = \alpha_2$, c) $K_x = K_y$

Við ákveðið hitastig má reikna út m eftir upplýsingum, sem fyrir hendi eru. Úr leysanleika brennisteinsvetnis í vatni (sbr. línurit 2) fæst S, og H fæst úr gufuþrýstingi vatns við viðkomandi hitastig. Jafnvægisstuðullinn K_x og

2) A-715. The Operation of a Dual-Temperature Single Stage Tower for Deuterium Concentration. M.L.Eidinoff, C.F.Hiskey '43.

þá um leið K_y fæst úr sambandinu

$$K_x = \alpha'_2 K_{xy}$$

Hér fæst K_{xy} úr áðurnefndri grein eftir Suess [1] og α'_2 (eða eiginlega α_1) úr I. Kirchenbaum; Physical Properties and Analysis of Heavy Water, bls. 25, töflu 1.14. Í töflu I eru S, H, α, K_{xy} og m gefin fyrir mismunandi hitastig.

TAFLA I

T°C	S	H	α	K_{xy}	m
30	0,0311	0,00221	0,938	2,33	0,437
100	0,01283	0,0536	0,975	1,94	0,541
110	0,01187	0,0796	0,978	1,90	0,564
120	0,01150	0,1111	0,981	1,86	0,585
130	0,01131	0,150	0,984	1,83	0,608
140	0,01094	0,201	0,987	1,79	0,634

Starfslínur eru fengnar með því að setja upp líkingar fyrir efnajöfnuði (material balance) í turnunum. Er þá rétt að taka heitan og kaldan turn hvern fyrir sig.

Kaldur turn:

$$F(1+S_k)\cdot x - G(1+H_k)y = A$$

þar sem A er D-streymið niður eftir kalda turninum. Þetta má einnig skrifa

$$y = \frac{F}{G}\cdot\frac{(1+S_k)}{(1+H_k)}x - \frac{A}{G(1+H_k)}$$

Starfslínan er þannig bein lína, sem hefur hallatöluna

$$\beta_k = \frac{F(1+S_k)}{G(1+H_k)}$$

Heitur turn:

Í heitum turni er H_2S-gasið frá kalda turninum mettað með gufu, sem reiknað er með að hafi sama D-innihald og vatnið F, sem leitt er inn í kalda turninn. Á sama hátt og áður fæst nú:

$$G(1+H_h)y - (F+GH_h)(1+S_h)X = B$$

þar sem B er D-streymið upp eftir heita turninum. Þetta má einnig skrifa

$$y = \left(\frac{F}{G} + H_h\right)\frac{1+S_h}{1+H_h}x + \frac{B}{G(1+H_h)}$$

Starfslínan er bein lína með hallatölunni

$$\beta_h = \left(\frac{F}{G} + H_h\right) \frac{(1+S_h)}{(1+H_h)}$$

Milli A og B gildir nú sambandið

$$A + B = P \cdot x_P = (F+GH_h)(X_F - X_W)$$

þar sem P er framleiðsla verksmiðjunnar af þungu vatni og x_P er D-innihald þess (venjulega x_P = 0,998). Þetta samband gefur efnajöfnuð fyrir þunga vatnið gegnum verksmiðjuna.

Á 3. mynd er sýnt, hvernig McCabe-Thiele starfslínuritið fyrir fyrsta þrep verksmiðjunnar lítur út. Til þess að ákveða það reikningslega, þarf að velja hagkvæmustu gildi á þrýstingi og hitastigi í turnunum og ennfremur D-innihaldsmargfölduninа í hverju þrepi verksmiðjunnar. Þetta val er að miklu leyti kostnaðaratriði og er því ekki hægt að gefa upp endanlegar tölur fyrr en í sambandi við kostnaðaráætlun fyrir verksmiðju. Að vissu marki má þó gera sér grein fyrir líklegum gildum á þessum stærðum og verður það gert hér eftir því sem tök eru á.

1. Þrýstingur

Hagkvæmt er að hafa þrýstinginn í turnunum háan til að minnka stærð þeirra. Á línuriti 3 er sýnt hvernig þverskurðarflatarmál fyrsta þrepsins er háð H_2S-þrýstingnum, þegar Spraypak fylling er notuð í turnana. Þetta línurit byggist á eftirfarandi forsendum:

Við 30° C - 100° C er F = 160 kg/s og G = 659 kg/s

Við 30° C - 130° C er F = 119 kg/s og G = 467 kg/s.

Þessi gildi á F og G eru ekki nauðsynlega þau hagkvæmustu, en útreikningarnir gefa þó til kynna hlutfallslega breytingu á þverskurðarflatarmálinu með H_2S-þrýstingnum. Til að reikna út þetta línurit eru notaðar upplýsingar um Spraypak, sem gefnar eru í Technical Data Bulletin frá Fractionating Towers, Inc.

En það er ekki aðeins rúmmál turnanna, sem minnkar með auknum þrýstingi, heldur einnig varmaþörfin til að metta brennisteinsvetnið í heita turninum með gufu. Ef n táknar mól á tímaeiningu í gufumettuðum gasstraumnum, er

$$n_{H_2O} = n_{H_2S} \cdot \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2S}}$$

Hér er p_{H_2O} einungis háð hitastigi heita turnsins og sést þá, að vatnsgufumagnið í gasstraumnum er í öfugu hlutfalli við H_2S þrýstinginn. Af þessari ástæðu er því einnig hagkvæmt að hafa þrýstinginn háan, því að orkuþörfin við að framleiða gufuna, sem mettar brennisteinsvetnið í heita turninum er einn aðalliðurinn í heildarorkuþörf verksmiðjunnar.

Af því, sem sagt hefur verið að ofan, má draga þá ályktun, að hagkvæmt sé að hafa þrýstinginn háan til að minnka rúmmál turna og varmanotkun. Það sem takmarkar þrýstinginn að ofan, er hins vegar gufuþrýstingur H_2S-vökva. Við 30° C er hann 22,5 atm (sbr. línurit 5) og verður því að halda H_2S þrýstingnum í hæfilegri fjarlægð frá þessu gildi. <u>Virðist ekki fráleitt að gera ráð fyrir 20 atm. meðalþrýstingi í heita turninum og 19 atm. í þeim kalda.</u>

2. <u>Hitastig</u>

Hitamismunur heita og kalda turnsins er það, sem þessi aðferð til vinnslu á þungu vatni byggist á. Því meiri sem hitamunurinn er, því meira af D-innihaldi vatnsins næst úr því, sem þungt vatn. Það er því hagkvæmt að hafa hitamuninn eins mikinn og aðrar ástæður leyfa. Hita kalda turnsins eru neðri mörk sett af hættu á hydratmyndun (H_2S, $6H_2O$), (sbr. línurit 6). Fyrir ofan 30°C getur þetta hydrat ekki myndast og virðist því hagkvæmt að velja <u>hitastig kalda turnsins 30°C</u>. Hvað hitastig heita turnsins snertir, eru það einkum tvö atriði, sem vegast á. Á annan bóginn er æskilegt, að hitinn sé sem hæstur, til að sem mest af D-innihaldi vatnsins náist úr sem þungt vatn. Því hærra sem hitastigið er, því minna vatns- og gasstreymi þarf í fyrsta þrepi verksmiðjunnar fyrir ákveðna framleiðslu og því minni verður stofnkostnaður verksmiðjunnar. Á hinn bóginn vex varmaþörf verksmiðjunnar ört með vaxandi hitastigi, því að gufuþrýstingur vatns og þar með gufumagn það, sem þarf til að metta brennisteinsvetnið í heita turninum, vex ört með hitastiginu. Orkukostnaður fer þannig vaxandi með vaxandi hitastigi. Hagkvæmasta hitastig heita turnsins verður þar, sem framleiðslukostnaðurinn á hverja framleiðslueiningu verður minnstur.

Til að gera sér grein fyrir hvernig rennsli í fyrsta þrepinu og orkuþörf breytist með hitastigi heita turnsins (T_2) eru eftirfarandi reikningar gerðir (sbr. tákn á 3. mynd).

Skilgreining:

$$f_k = \frac{X_F}{X_F'}$$

$$f_h = \frac{Y'}{Y''}$$

Þessar stærðir f_k og f_h eru mælikvarði á það, hve nálægt jafnvægislínunni er hægt að komast í toppi kalda turnsins og botni heita turnsins.

Gert er ráð fyrir, að $f_k = f_h = f = 0{,}985$. Þetta val á gildinu fyrir f mun verða réttlætt að nokkru síðar. Einnig er ávallt gert ráð fyrir, að $S_h \ll 1$ og $H_k \ll 1$. Þá er

$$PX_p = (F + GH_h)(X_F - X_w)$$

$$F = \frac{PX_p}{(1 + \frac{G}{F} H_h)(X_F - X_w)}$$

Hagkvæmasta gildi á hlutfallinu $\frac{F}{G}$ er nokkuð háð T_2 og verður síðar fundið, að fyrir $T_2 = 120^oC$ er það 0,470. Engin veruleg skekkja er gerð með því að nota þetta gildi einnig við önnur hitastig og verður það gert hér. Reikna má út X_w á eftirfarandi hátt. Með efnajöfnuði, þar sem gufan kemur inn í heita turninn fæst:

$$Y' \cdot G(1+H_h) = G \cdot H_h \cdot X_F + G \cdot Y_o$$

eða

$$Y' = \frac{H_h \cdot X_F + Y_o}{1+H_h}$$

Hér er $Y_o = \overset{m_k}{H_k} \cdot \frac{X_F}{f}$

$$X_w = \frac{Y'}{f \cdot H_h}$$

$$X_w = \frac{(H_h + \frac{\overset{m_k}{H_k}}{f})}{f \cdot m_h(1+H_h)} \cdot X_F$$

$$F = \frac{P x_o}{\left(1 + \frac{G}{F} H_h\right) \left(1 - \frac{H_h + Mk/f}{f . m_h \, (1+H_h)}\right\} \, x_F}$$

Úr þessari formúlu er nú F reiknað út fyrir mismunandi hitastig T_2. Úr töflu I fást $\overset{m}{H}_k$, $\overset{m}{H}_h$ og H_h og fyrir aðrar stærðir eru notuð eftirfarandi gildi.

x_F = 0,000147

x_P = 1,00

F = 100 tonn/ári = 0,571 kW/klst kmól

Á línuriti 7 er sýnt, hvernig F breytist með hitastigi heita turnsins.

Heildarvarmanotkun verksmiðjunnar samanstendur af þremur liðum, aðallega, varmaþörf til upphitunar á vatninu frá 30°C til T_2°C, varmaþörf til upphitunar á brennisteinsvetninu frá 30°C til T_2°C og varmaþörf til gufumettunar á brennisteinsvetninu við T_2°C. Þetta má skrifa

$$Q = Q_1 + Q_2 + Q_3$$

þar sem $Q_1 = F \,.\, (C_p)_{H_2O} \,.\, (T_2 - 30)$

$$Q_2 = G \,.\, (C_p)_{H_2S} \,.\, (T_2 - 30)$$

$$Q_3 = G \,.\, H_h \,.\, L$$

Hér er $(C_p)_{H_2O}$ og $(C_p)_{H_2S}$ eðlisvarmi vatns og H_2S, og L uppgufunarvarmi vatns. Fyrir eðlisvarmana eru notuð eftirfarandi gildi:

$(C_p)_{H_2O}$ = 4,18 kWs/kg °C

$(C_p)_{H_2S}$ = 1,09 kWs/kg °C

Gert er einnig ráð fyrir, að $G = \frac{1}{0,470}$ F (F og G í mólum)

Á línuriti 8 er heildarvarmanotkunin Q gefin fyrir mismunandi hitastig T_2. Til að finna hagkvæmasta gildið á T_2 þarf að finna, hvar summan af stofnkostnaði og orkukostnaði á hverja framleiðslueiningu hefur sitt minnsta gildi. Samkvæmt útreikningum Ágústs Valfells er þetta um 110 °C, en þetta gildi virðist þó nokkuð lágt, því að í útreikningunum var ekki gert ráð fyrir, að verksmiðjan væri byggð úr ryðfríu stáli. Ef það er gert, vex stofnkostnaðurinn og hagkvæmasta hitastigið færist upp á við. <u>Virðist ekki fráleitt að gera ráð fyrir, að hagkvæmasta hitastigið sé um 120 °C og verður það gert hér.</u> Samkvæmt þeim upplýsingum, sem fyrir hendi eru um verksmiðjur í Bandaríkjunum og áætlanir Svía, virðist þetta einnig líklegt gildi. Í þungavatnsverksmiðjunni í Dana, Ind., sem nú hefur verið hætt að starfrækja, voru hitastigin 30 °C og 120 °C. Þar hefur orkukostnaðurinn verið meiri en hér á landi, en stofnkostnaðurinn hefur einnig verið meiri en hér er gert ráð fyrir vegna þess, að fylling turnanna ("bubble caps") þar er dýrari en Spraypak miðað við sömu framleiðslu. Gæti því heppilegasta hitastigið þar vel verið svipað og hér. Í verksmiðjunni við Savannah River eru hitastigin 40 °C og 130 °C, en hér ákveðst lægra hitastigið af hita kælivatnsins, sem fáanlegt er á staðnum. Í áætlunum Svía, sem miðaðar eru við Spraypak fyllingu í turnunum, eru hitastigin höfð 30 °C og 100 °C. Gera má ráð fyrir, að stofnkostnaður sé svipaður þar og hér, því að Spraypak er hugsað sem fylling í báðum tilfellum, en aftur á móti er orkukostnaðurinn töluvert meiri þar en hér. Það hefur í för með sér, að hagkvæmasta hitastigið verður nokkru lægra þar en hér á landi og styður það því einnig ofannefnt val á hitastigi heita turnsins.

3. <u>D-innihaldsaukning í hverju þrepi</u>

Með skiptingu verksmiðjunnar í þrep vinnst það, að heildarrúmmál turnanna minnkar. Rennslið minnkar eftir því sem D-innihald vatnsins vex. Ef vatnsrennslið í n-ta þrepinu er F_n og í (n+1) þrepinu F_{n+1}, þá er

$$\frac{F_n}{F_{n+1}} = e$$

þar sem e er D-innihaldsmargföldunin í hverju þrepi. Hér er gert ráð fyrir, að e sé hið sama í öllum þrepunum, þó að svo þurfi ekki nauðsynlega að vera. Ef heildar þverskurðarflatarmál köldu turnanna í hverju þrepi eru A_1, A_2 A_3 ..., þá er einnig

$$\frac{A_n}{A_{n+1}} = e$$

þverskurðarflatarmál heitu turnanna þarf að vera um 10% stærra en köldu turnanna. Sé gert ráð fyrir, að hæð hverrar plötu (HETP) og plötufjöldinn (N) sé hið sama í heitum og köldum turni, verður heildarrúmmál turna á öllum þrepum

$$V = 2{,}1 \cdot A_1 \cdot (HETP)N_k \cdot \left(1 + \frac{1}{e} + \frac{1}{e^2} + ..\right) \approx 2{,}1 \cdot A_1(HETP) \cdot N_k \cdot \frac{e}{e-1}$$

Hér fæst N_k úr formúlunni

$$N_k = \frac{\log\left\{\frac{(e-1)\cdot f}{1-f}\left(\frac{y_k}{x_{mk}}-1\right)+1\right\}}{\log y_k/x_{mk}}$$

þann hluta stofnkostnaðar verksmiðjunnar, sem háður er e, má skrifa

$$K = K_1 + K_2$$

þar sem $K_1 \propto V$

og $K_2 \propto \sum F = F_1\left(1 + \frac{1}{e} + \frac{1}{e^2} + ..\right) \approx F_1 \cdot \frac{e}{e-1}$

Í K_2 er innifalinn kostnaður á pípum, dælum og að einhverju leyti hitaskiptum. þennan lið er erfitt að áætla nákvæmlega á þessu stigi málsins, en til að gera útreikninga mögulega skal hér gert ráð fyrir, að $K_1 = K_2$, þegar $e = 5$. þá má skrifa

$$K = k_v \cdot 2{,}1 \cdot A_1 \cdot (HETP)\left[N_k + N_k(5)\right] \cdot \frac{e}{e-1}$$

þar sem k_v er kostnaður á hverja rúmmálseiningu turnanna. Með því að reikna út stærðina

$$\left[N_k + N_k(5)\right]\frac{e}{e-1}$$

fyrir mismunandi gildi á e, má sjá hvernig K er háð e.

Eftirfarandi tölugildi eru notuð:

$f = 0{,}985$

$a_k = 0{,}437$

$\beta_k = 0{,}484$

Reikningarnir eru sýndir í töflu II. Það sem einkum má lesa úr henni er, að K breytist ekki verulega á bilinu e = 5 til e = 10. Það geta því orðið önnur atriði en kostnaður, sem ráða því, hvaða gildi á e er valið. Með turna takmarkast t.d. af því, sem tæknilega yrði talið framkvæmanlegt hér á landi. Með því að hafa fá þrep og því tiltölulega stórt e, yrði verksmiðjan einfaldari og reksturinn öruggari, en slíkt væri mikilvægt, þar sem verksmiðjan þyrfti að vera að miklu leyti sjálfvirk.

Tafla II

e	K_k	$\frac{e}{e-1}$	$K_k+K_k(5)$	$[K_k+K_k(5)]\ \frac{e}{e-1}$
3	26,6	1,500	59,7	89,5
4	30,4	1,333	63,5	84,7
5	33,1	1,250	66,1	82,6
6	35,2	1,200	68,3	81,9
7	36,9	1,167	70,0	81,7
8	38,5	1,142	71,6	81,7
9	39,7	1,125	72,8	81,8
10	40,8	1,111	73,9	82,2

Í útreikningum hér á eftir verður gert ráð fyrir, að e sé 6–7.

Eftirfarandi hagkvæmustu gildi hafa nú verið fundin:

Kaldur turn: þrýstingur 19 atm.
hitastig 30°C

Heitur turn: þrýstingur 20 atm.
hitastig 120°C

Innihaldsaukning í hverju þrepi: sex til sjö.

Má þá halda áfram og ákveða McCabe-Thiele línuritið fyrir fyrsta þrep verksmiðjunnar nokkru nánar. Fyrst er fundið hagkvæmasta gildið á F/G og er við þá útreikninga notuð tölugildin f = 0,985 og e = 7. Fyrir mismunandi gildi á F/G eru fyrst reiknaðar út hallatölurnar β_k og β_h samkvæmt formúlunum:

$$\beta_k = \frac{F}{G} \cdot \frac{(1+S_k)}{(1+R_k)}$$

$$\beta_h = \left(\frac{F}{G} + R_h\right) \frac{(1+S_h)}{(1+R_h)}$$

Síðan er fundinn nauðsynlegur plötufjöldi í heitum og köldum turni samkvæmt formúlunum:

$$N_k = \frac{\log\left\{\frac{(e-1)f}{1-f}\left(\frac{\beta_k}{m_k}-1\right)+1\right\}}{\log \beta_k/m_k}$$

$$N_h = \frac{\log\left\{\frac{(e-1)f}{1-f}\left(\frac{m_h}{\beta_h}-1\right)+1\right\}}{\log m_h/\beta_h}$$

Plötufjöldinn er mælikvarði á hæð turnanna og er hagkvæmasta gildið á F/G valið, þar sem $N_k = N_h$, en það er mjög nálægt minnsta gildinu á summunni $N_k + N_h$. Útreikningarnir eru gefnir í töflu III og á línuriti 9 er N_k og N_h sýnt fyrir mismunandi gildi á F/G. Hagkvæmasta gildið reynist vera

<u>F/G = 0,470</u>.

Tafla III

F/G	β_k	β_h	N_k	N_h	$N_k + N_h$
0,425	0,438	0,488	330	24,4	354
0,450	0,463	0,510	54,0	29,9	83,9
0,475	0,488	0,533	34,5	39,7	74,2
0,500	0,514	0,556	26,7	60,3	87,0
0,525	0,541	0,579	21,3	162	183

Næst þarf að ákveða hagkvæmasta gildið á f, eða sýna fram á, að það gildi, sem notað hefur verið fram að þessu, f = 0,985, sé nálægt því, sem hagkvæmast er. Gert er ráð fyrir, að e = 7. Þær stærðir í fyrsta þrepi, sem einkum eru háðar f, eru rúmmál turna á hverja framleiðslueiningu og rennslið, en með rennslinu breytist aftur varmaþörf verksmiðjunnar. Fyrst skal turnarúmmálið athugað. Skrifa má

$$V = V_h + V_k = N_h \cdot (HETP)_h \cdot A_h + N_k\,(HETP)_k \cdot A_k$$

$$Px_p = (F+GH_h)(X_F - X_w)$$

Hér verður gert ráð fyrir, að $(HETP)_h = (HETP)_k$ og $x_p \approx 1$. Ennfremur, að $A_h = 1{,}1 \cdot A_k$ og $N_k = N_h$. Áður hefur verið fundið, að

$$X_w = \frac{\left(H_h + \frac{m_k}{f}\right)}{f \cdot m_h \cdot (1+H_h)} \cdot X_F$$

Þá má skrifa:

$$\frac{V}{F} = \frac{2{,}1 \cdot (HETP)\,A_k}{(F+GH_h) \cdot X_F} \cdot \frac{m_k}{\left(1 - \frac{H_h + m_k/f}{f \cdot m_k \cdot (1+H_h)}\right)}$$

Með því að reikna út

$$\frac{m_k}{\left(1 - \frac{H_h + m_k/f}{f \cdot m_h \cdot (1+H_h)}\right)} = v(f)$$

fyrir mismunandi gildi á f má finna, hvernig rúmmálið á hverja framleiðslueiningu breytist með f. Þetta samband er gefið á línuriti 10. Ef orkukostnaðurinn væri hverfandi lítill miðað við stofnkostnað turna, væri hagkvæmast að velja f, þar sem v(f) hefði sitt minnsta gildi, þ.e. við f = 0,975. Nú er orkukostnaðurinn ekki hverfandi lítill og þarf þá að finna, hvernig hann er háður f. Áður hefur verið fundið, að

$$F = \frac{Px_p}{\left(1 + \frac{G}{F} \cdot H_h\right)\left(1 - \frac{H_h + m_k/f}{f \cdot m_h \cdot (1+H_h)}\right) \cdot X_F}$$

Þetta er nú reiknað út fyrir mismunandi gildi á f og við þau hitastig og þrýsting, sem fundin hafa verið áður, þ.e. $T_1 = 30\,^{\circ}C$, $T_2 = 120\,^{\circ}C$ og þrýstingur 20 atm. á heitum turni. Þetta samband er gefið á línuriti 11. Síðan er reiknuð út heildarvarmanotkun verksmiðjunnar eftir sömu formúlum og áður og er hún gefin á línuriti 12. Summuna af orku- og turnkostnaði má skrifa

$$K = K_g + K_v$$

Gert er ráð fyrir, að gufan kosti 0,11 \$/tonn og innihaldi 2200 MWsek/tonn af varmaorku. Einnig er gert ráð fyrir að spara megi 50% af heildarvarmanotkun verksmiðjunnar í hitaskiptum, þannig, að raunveruleg varmaþörf yrði $Q/2$. Þá er

$$K_g = \frac{Q}{2} \cdot 0{,}11 \cdot \frac{3600}{2200} \cdot 8760 \text{ \$/ári} = 788 \cdot Q \text{ \$/ári}$$

þar sem Q er reiknað í megavöttum.

Síðari liðinn K_v má skrifa

$$K_v = k_v \cdot V \cdot 0{,}15$$

þar sem k_v er turnkostnaðurinn á hverja rúmmálseiningu og gert er ráð fyrir 15% afskriftum á ári. Samkvæmt upplýsingum frá fyrirtækinu Head Wrightson Processes Ltd. í Englandi, sem framleiðir Spraypak, er verð á því um 370 \$/m^3. Samkvæmt upplýsingum frá Svíþjóð er verð á turnskelinni sjálfri þar um 420 \$/m^3 og þannig turnunum í heild um 800 \$/m^3, þ.e. k_v = 800 \$/m^3. Rúmmálið má skrifa

$$V = 2{,}1 \cdot A_k \cdot (HETP) \cdot N_k .$$

Gert verður ráð fyrir, að (HETP) = 2' = 0,61 m, þó að engar áreiðanlegar upplýsingar séu fyrir hendi um það. Þetta gildi er nálægt því, sem fundið hefur verið í Englandi fyrir Spraypak, þegar um vatn og vatnsgufu er að ræða (sbr. ritið "Spraypak", A New Industrial Distillation and Absorption Tower Packing, eftir J.A. McWilliams o. fl.). Þverskurðarflatarmálið A_k er háð f eins og sjá má af eftirfarandi:

$$A_k = F \cdot \left(\frac{G}{F}\right) \cdot \left(\frac{A_k}{G}\right).$$

Hlutfallið F/G hefur verið ákveðið áður og stærðin G/A_k, þ.e. gasstreymið á hverja flatareiningu, ákveðst af Spraypakinu og er reiknuð út eftir sömu upplýsingum og línurit 3 er reiknað út. Hér er F háð f eins og sýnt var á línuriti 11. Með innsettum tölugildum fæst:

$$A_k = 0{,}239 \cdot F \text{ m}^2$$

þar sem F er í kg/sek.

Að lokum er sett inn í formúluna fyrir K_v og fæst þá:

$$K_v = 800 \cdot 0{,}15 \cdot 2{,}1 \cdot 0{,}239 \cdot 0{,}61 \cdot F \cdot N_k \text{ \$/ári}$$
$$= 36{,}8 \cdot F \cdot N_k \text{ \$/ári},$$

þar sem eins og áður F er í kg/sek.

Á línuriti 13 er K nú teiknað fyrir mismunandi gildi á f. Sést, að K hefur sitt minnsta gildi nálægt f = 0,990. Þetta gildi á f er þó ekki hægt að segja örugglega, að sé hið hagkvæmasta vegna óvissu um mörg þau atriði, sem gera varð ráð fyrir til að reikningar væru yfirleitt framkvæmanlegir. Sé turnkostnaðurinn áætlaður of lágur með tilliti til gufukostnaðarins, flyzt minnsta gildið til hægri, þ.e. hagkvæmasta gildi ð á f verður lægra en 0,990, og öfugt, ef gufukostnaðurinn er áætlaður of lágur. Má segja, að réttlætanlegt hafi verið að nota f =0,985 við útreikningana hér að framan á þessu stigi málsins, þó að fyllri upplýsingar síðar meir kunni að breyta þessu gildi á f eitthvað.

Með útreikningunum hér að framan hefur nú McCabe-Thiele línuritið fyrir 1. þrep verksmiðjunnar verið ákveðið og er það dregið á 4. mynd. Gera má ráð fyrir, að þau starfsskilyrði, sem fundin hafa verið, séu ekki langt frá þeim, sem yrðu hagkvæmust fyrir verksmiðju á Íslandi. Fyrir verksmiðju, sem t.d. væri byggð í Svíþjóð, þar sem gufukostnaðurinn er meiri en hér, mundi vera hagkvæmara að velja f nokkru stærra en hér er gert eða um 0,995. Þá myndi þurfa um 50 plötur í hverjum turni fyrir e = 7, en það er einmitt sá plötufjöldi, sem Svíar gera ráð fyrir í sínum áætlunum. Með því að velja f = 0,985 eins og hér hefur verið gert, verður plötufjöldinn aðeins um 36 og turnarnir lægri sem svarar mismuninum á plötufjölda.

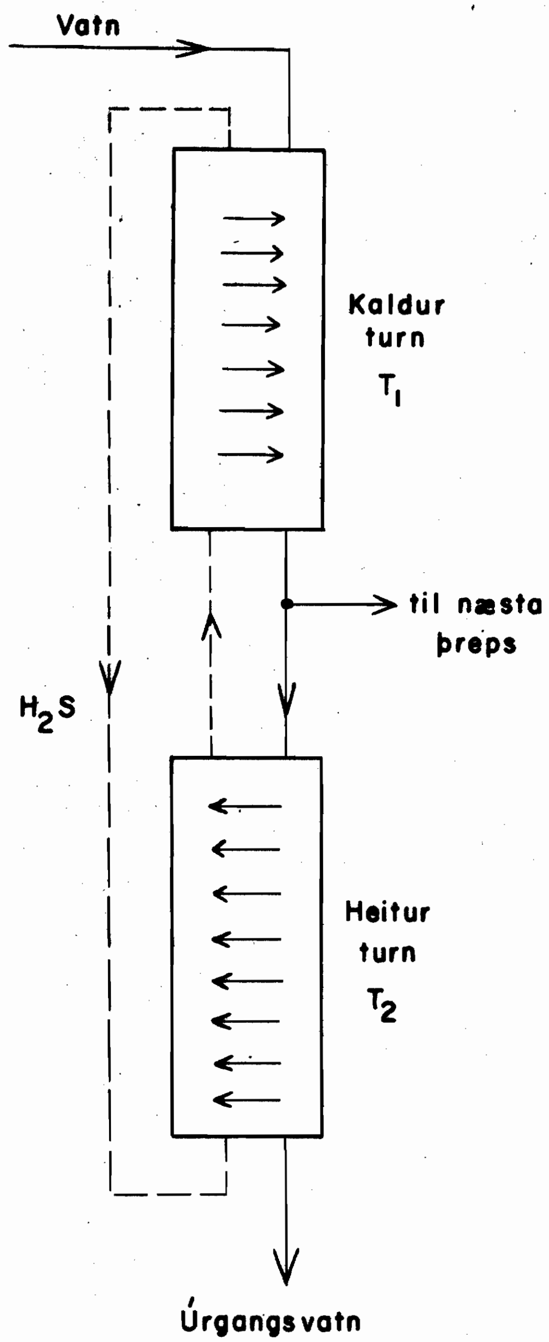
Til að hægt sé að teikna upp efnarás fyrir verksmiðjuna þarf, auk McCabe-Thiele línuritsins, að ákveða hagkvæmasta fyrirkomulag hitaskipta. Þetta atriði hefur verið athugað nokkuð af Ágústi Valfells og fara helztu niðurstöður hans hér á eftir:

1) Það borgar sig hvorki að hafa H_2S-H_2S hitaskipta né H_2S-H_2O hitaskipta, því að gufusparnaðurinn við það svarar ekki kostnaði hitaskiptanna (miðað við 15% afskriftir).
2) Þar sem þarf að hita eða kæla brennisteinsvetni, er bezt að nota beina snertingu milli H_2S og vatns. Í slíka hitara og kæla mætti nota Spraypak-fyllingu og gætu þeir því orðið hluti af turnunum.

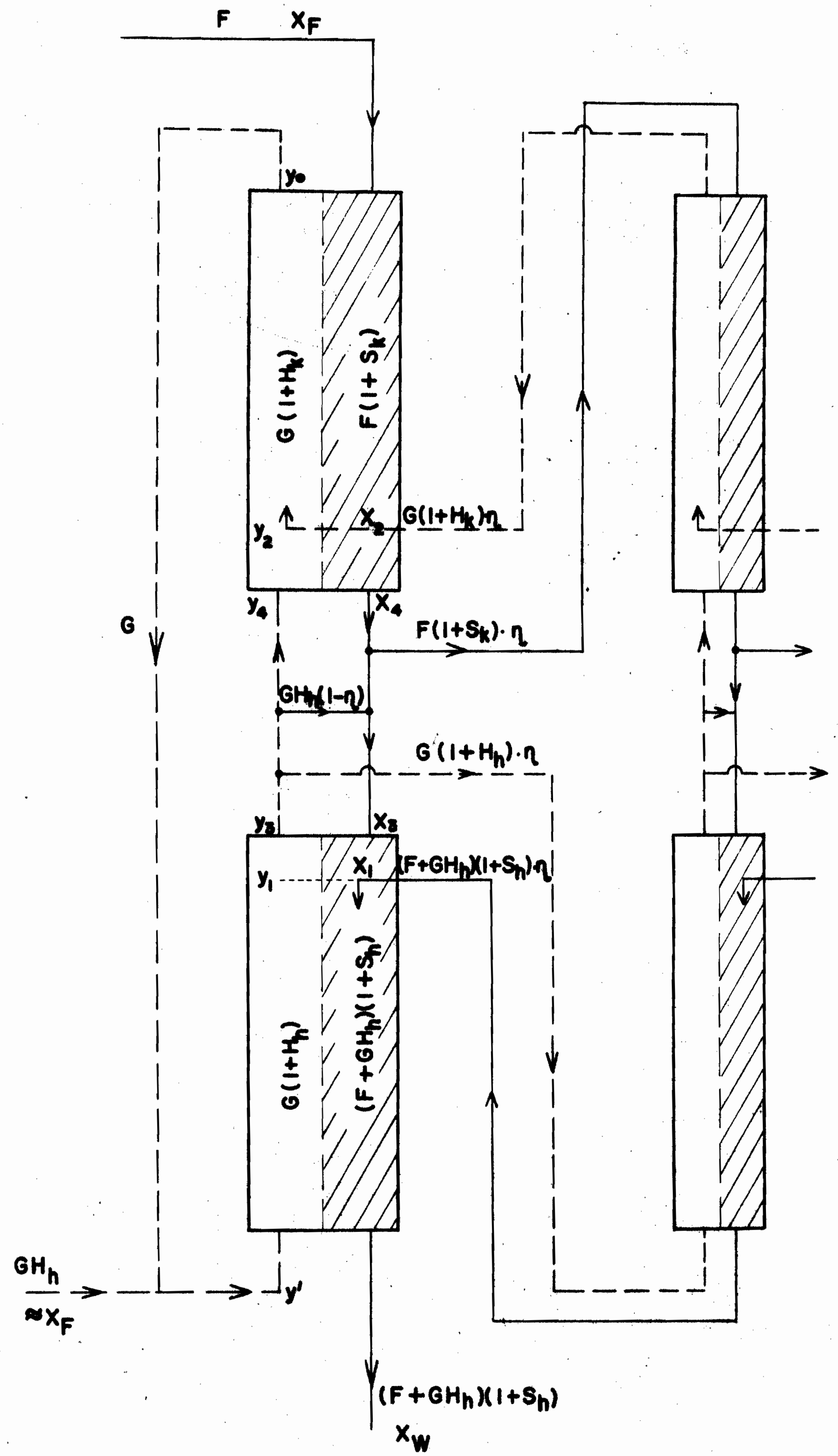
3) Þar sem hægt er að spara gufu með H_2O-H_2O hitaskiptum borgar það sig.

Í útreikningum Ágústs er ekki gert ráð fyrir ryðfríu stáli í hitaskiptum, en það myndi þó ekki breyta niðurstöðunum 1) - 2) hér að ofan, þó að það væri gert.

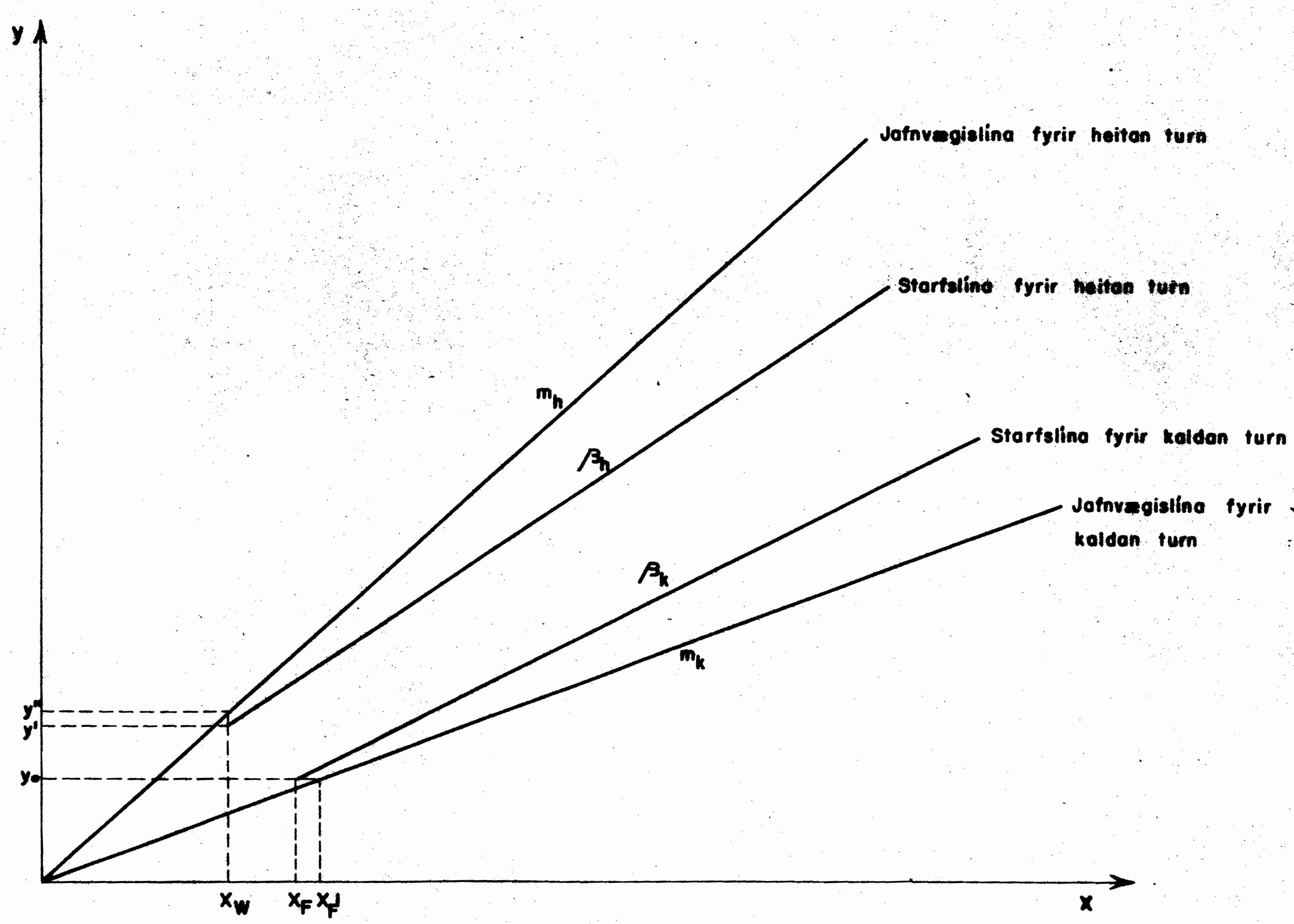
Með hliðsjón af útreikningum þeim, sem gerðir hafa verið hér að framan, er efnarás þungavatnsverksmiðju teiknuð og sýnd á meðfylgjandi mynd. Fyrir þá framleiðslu, sem hér er gert ráð fyrir, þ.e. 100 tonn D_2O/ári, yrði að skipta turnum fyrsta og sennilega einnig annars þreps niður í smærri einingar, en það er ekki sýnt á myndinni. Gera má ráð fyrir, að mesta þvermál eins turns verði 3-4 metrar. Að öðru leyti má gera ráð fyrir, að myndin sýni í aðalatriðum, hvernig verksmiðjan starfar og hverjir helztu hlutar hennar eru. Eftir er að ákveða t.d. stærð hitaskipta og fleira slíkt, en það þyrfti að gera í sambandi við kostnaðaráætlun fyrir verksmiðjuna.


Vatn
Kaldur
turn
T_1
til næsta
þreps
H_2S
Heitur
turn
T_2
Úrgangsvatn

MYND I.


F
X_F
y_o
$G(1+H_k)$
$F(1+S_k)$
y_2
X_2
$G(1+H_k)\eta$
y_4
X_4
G
$F(1+S_k)\cdot\eta$
$GH_h(1-\eta)$
$G(1+H_h)\cdot\eta$
y_3
X_3
y_1
X_1
$(F+GH_h)(1+S_h)\eta$
$G(1+H_h)$
$(F+GH_h)(1+S_h)$
GH_h
$\approx X_F$
y'
$(F+GH_h)(1+S_h)$
X_W

2. MYND.


y
Jafnvægislína fyrir heitan turn
Starfslína fyrir heitan turn
Starfslína fyrir kaldan turn
Jafnvægislína fyrir kaldan turn
m_h
β_h
β_k
m_k
y''
y'
y_o
x_W
x_F
x_F'
x

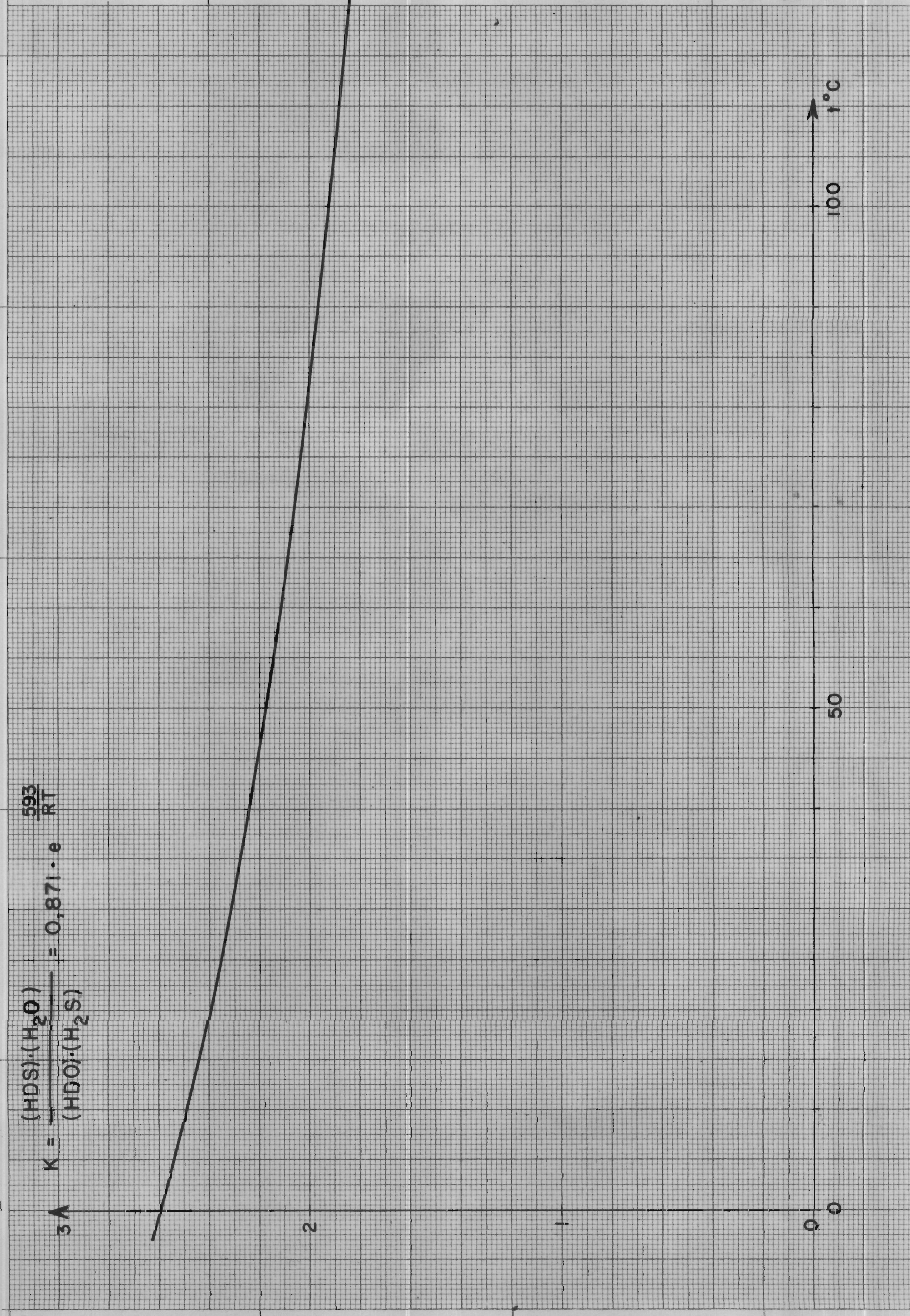
<u>3. MYND</u>

RAFORKUMÁLASTJÓRI

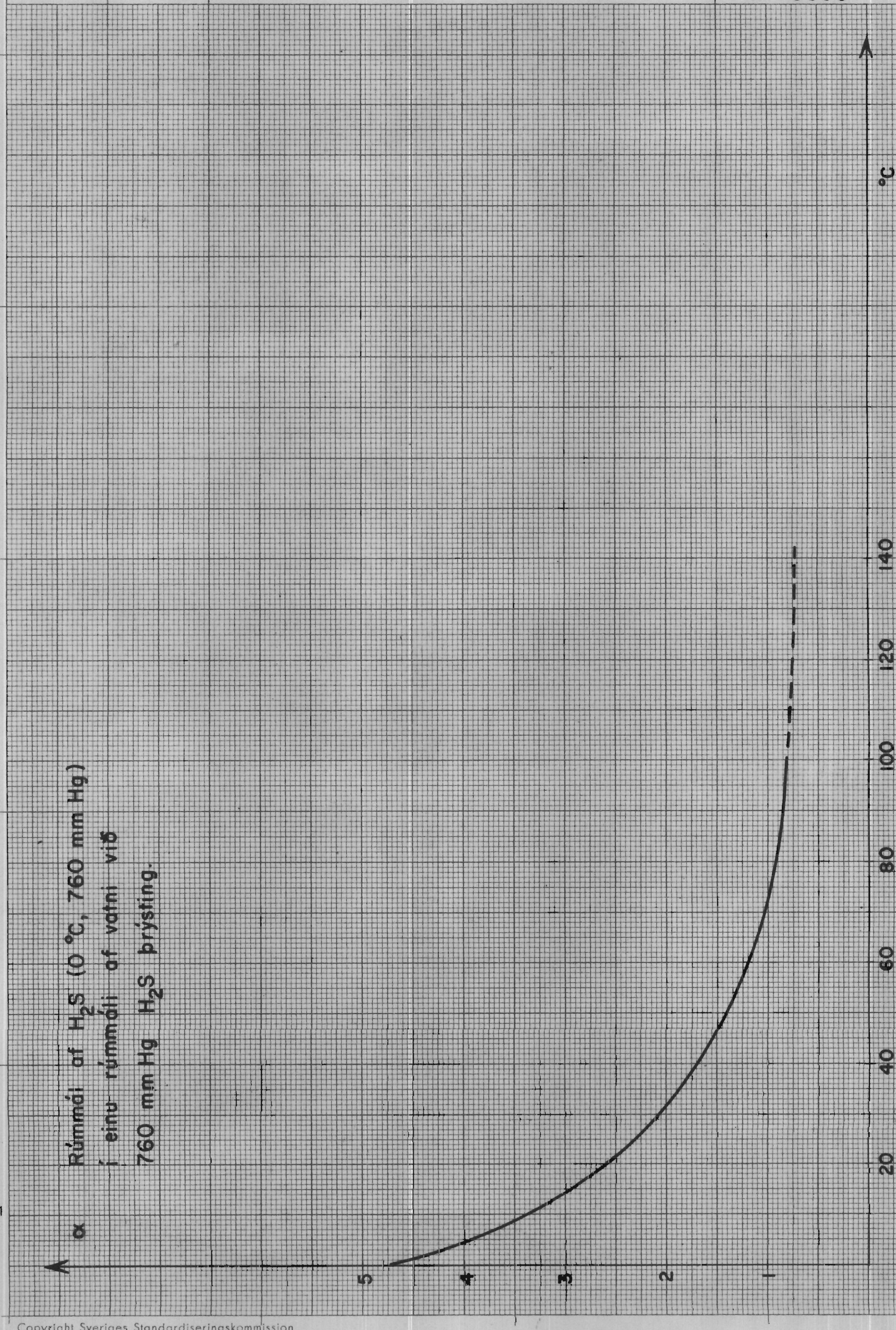
LÍNURIT I.

2/12 '57	GP/IG
Tnr. 4	
J - Þungt vatn	
Fnr. 3879	

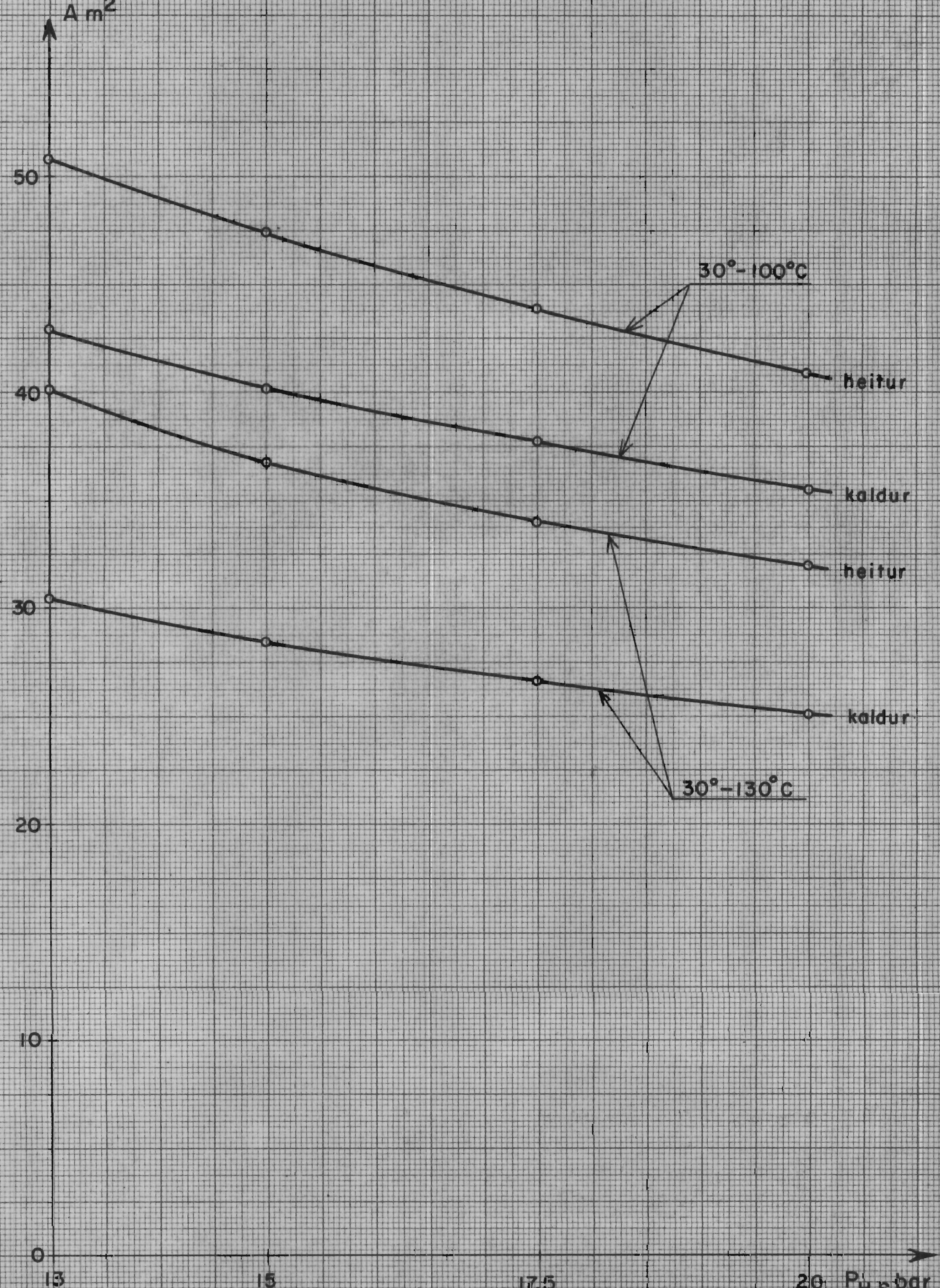
130°C



LÍNURIT 2.	RAFORKUMÁLASTJÓRI Leysanleiki H_2S í vatni.	2/12'57 GP/IG. Tnr. 5 J - þungt vatn Fnr. 3880



LÍNURIT 3.	RAFORKUMÁLASTJÓRI Samanlagt þverskurðarflatarmál turna í fyrsta þrepi. H_2S-aðferðin. 100 tonn D_2O/ári. Spraypak-fylling.	2/12'57 GP/IG. Tnr. 6 J- Þungt vatn Fnr. 3882



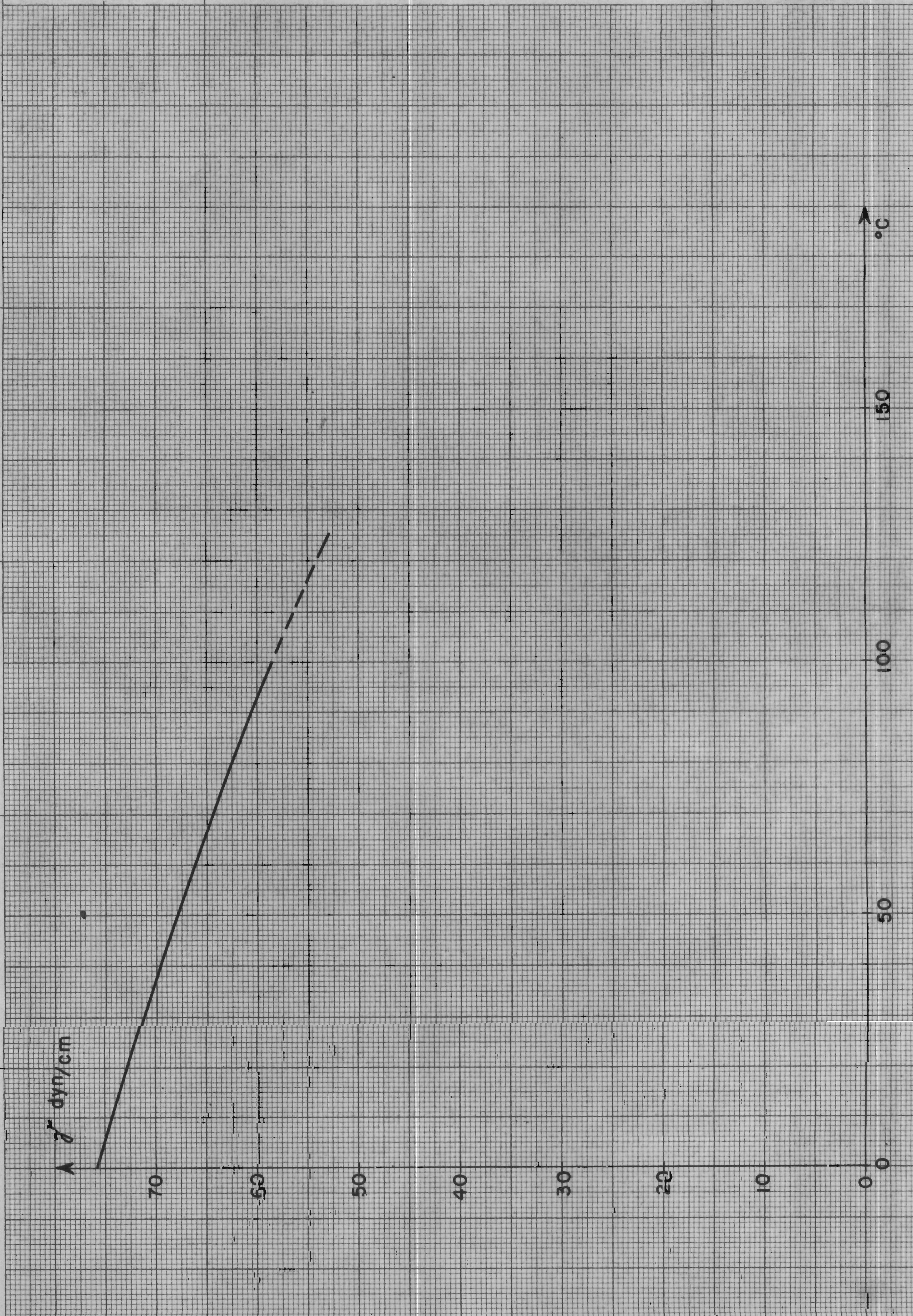
523 A4
SIS 73 25 01
1 × 1 mm
ESSELTE
4446

LÍNURIT 4.

RAFORKUMÁLASTJÓRI

Yfirborðsspenna vatns.
(Perry: Chemical Engineer's Handbook).

2/12'57 GP/IG.
Tnr. 7
J – Þungt vatn
Fnr. 3882

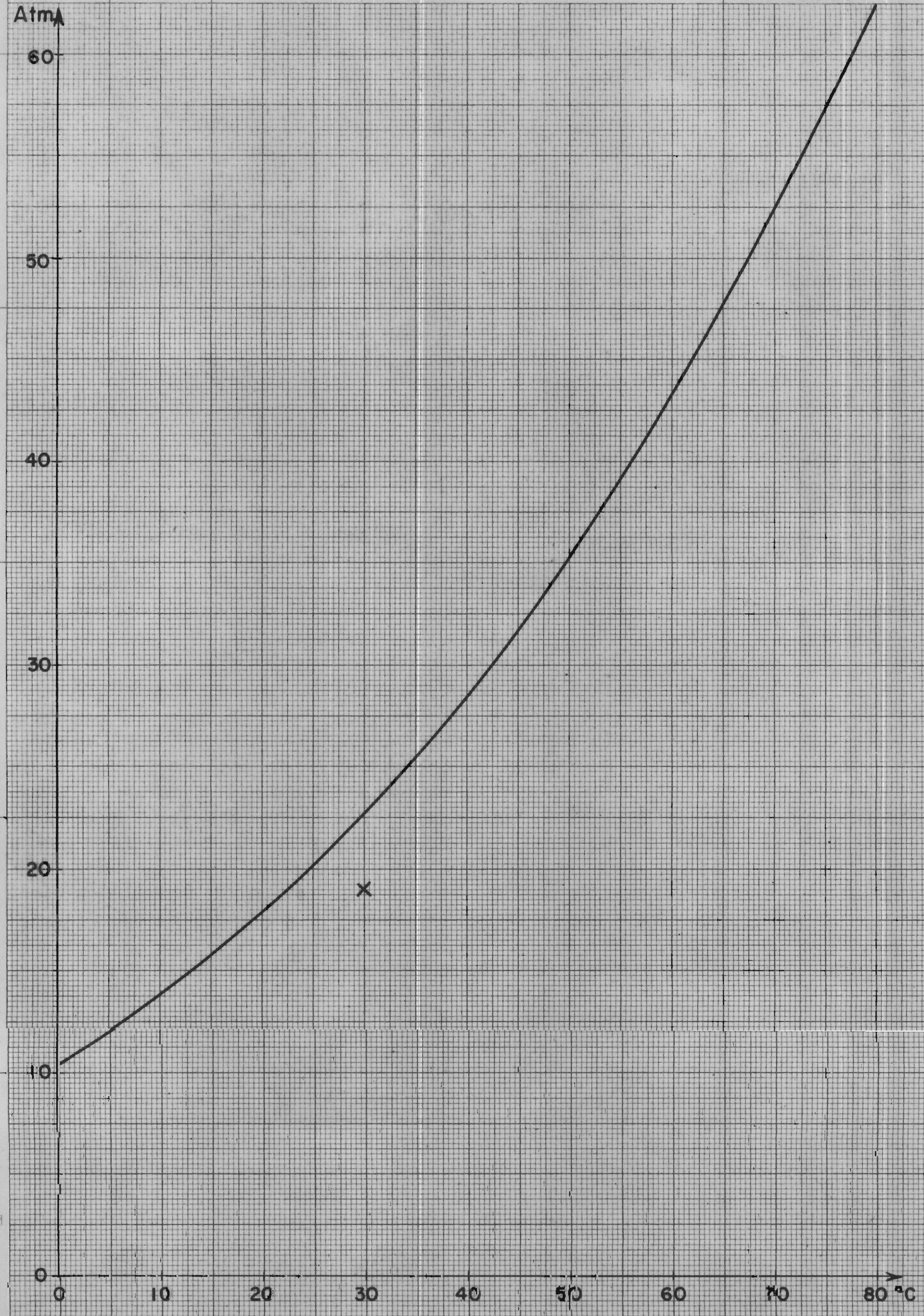


LÍNURIT 5.

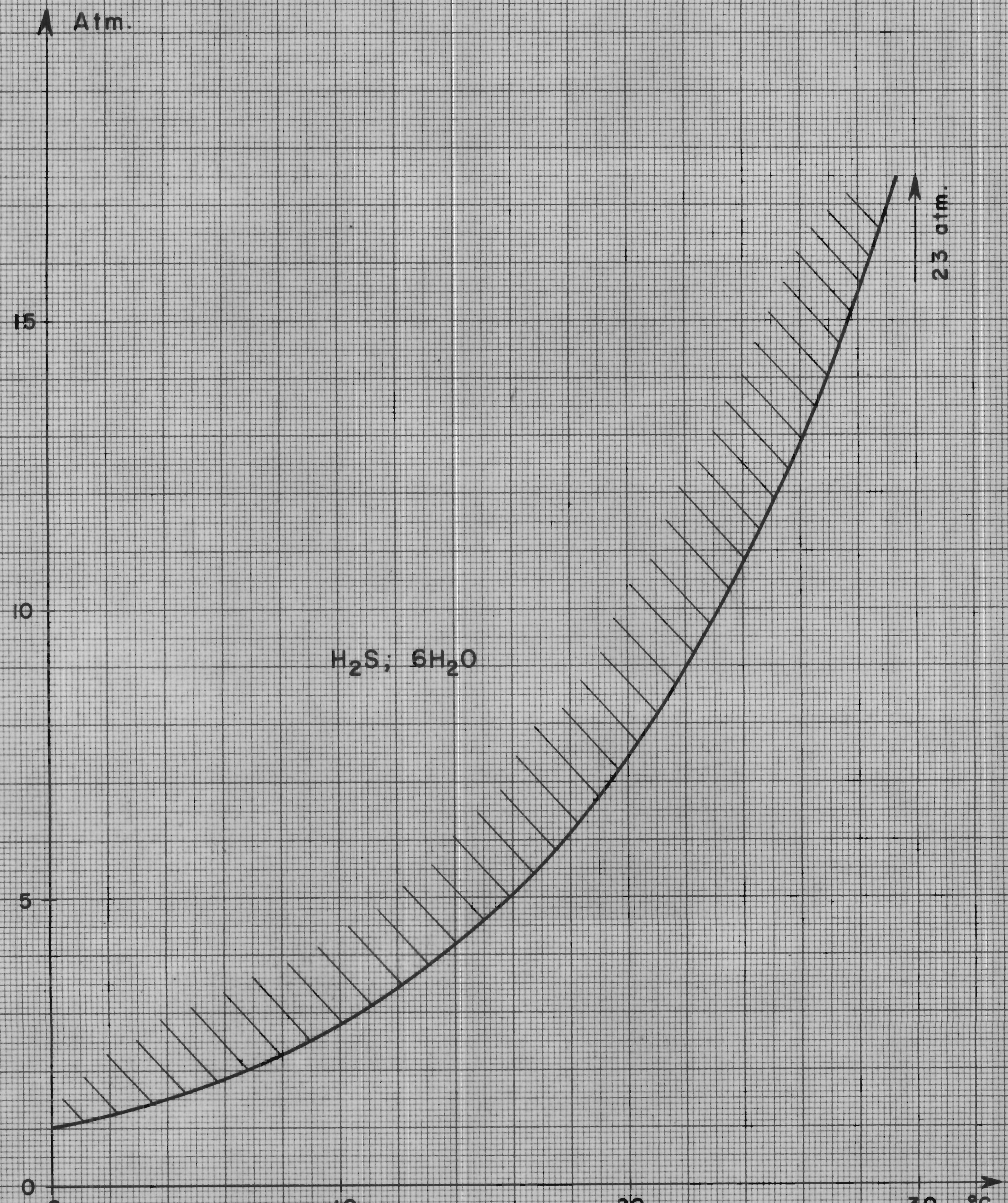
RAFORKUMÁLASTJÓRI

Gufuþrýstingur H_2S-vökva.
(Int. Crit. Tables)

2/12'57 GP/IG.
Tnr. 8
J - Þungt vatn
Fnr. 3883

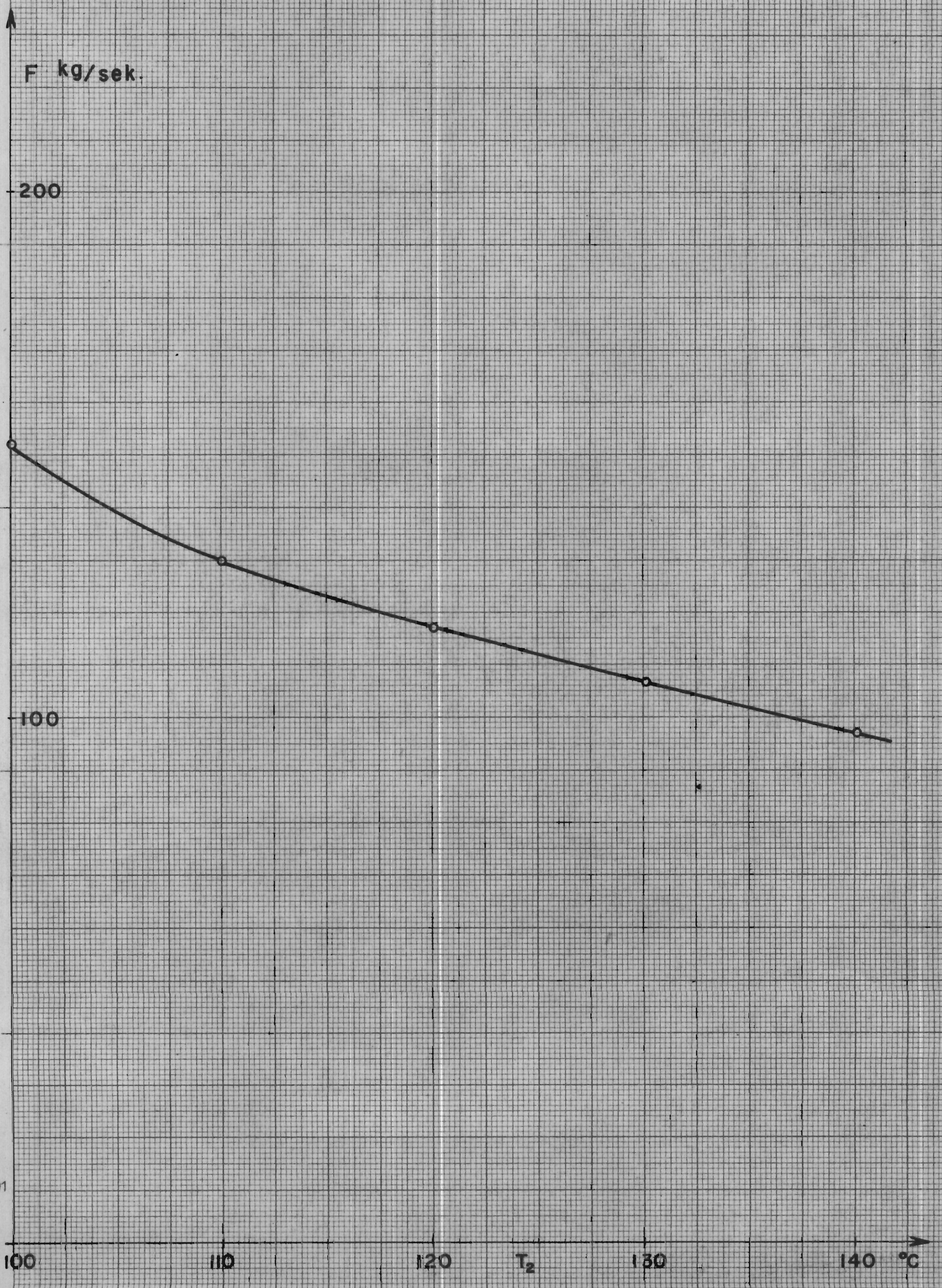


LÍNURIT 6.	RAFORKUMÁLASTJÓRI Hydratmyndun H_2S ; $6H_2O$.	2/12'57. GP/IG Tnr. 9 J- Þungt vatn Fnr. 3884



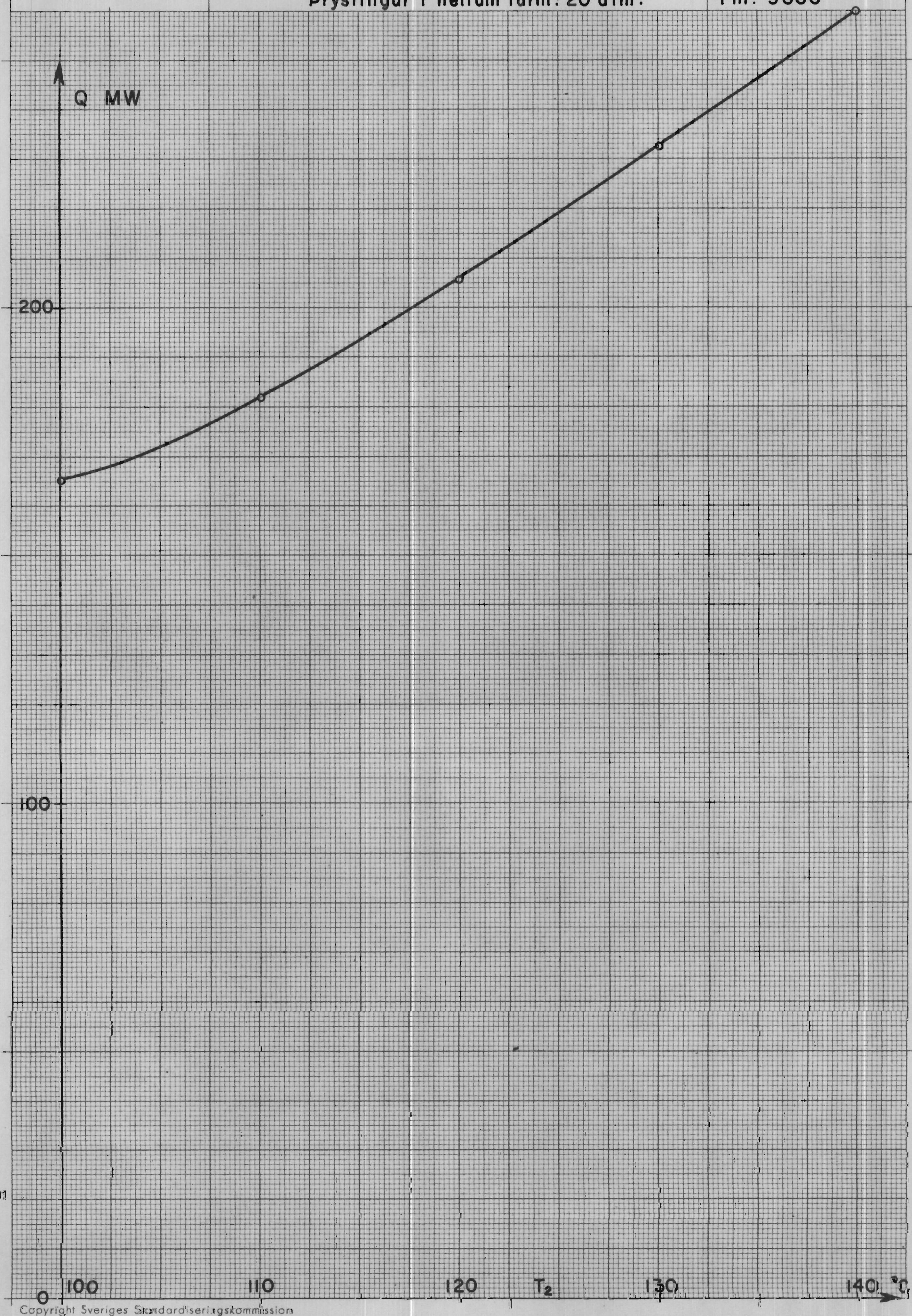
523 A4
SIS 73 25 01
1×1 mm
ESSELTE
4446

LÍNURIT 7.	RAFORKUMÁLASTJÓRI Vatnsrennsli í fyrsta þrepi við mismunandi T_2.	2/12'57 GP/IG Tnr. 10 J-þungt vatn Fnr. 3885



523 A4
SIS 73 25 01
1 × 1 mm
ESSELTE
4446

LÍNURIT 8.	RAFORKUMÁLASTJÓRI	2/12 '57 GP/IG
	Heildarvarmanotkun. P = 100 tonn/ári	Tnr. II
	T_1 = 30°C; ~~T_2 = 120°C~~	J - Þungt vatn
	Þrýstingur í heitum turni: 20 atm.	Fnr. 3886



523 A4
SIS 73 25 01
1 x 1 mm
ESSELTE
4446

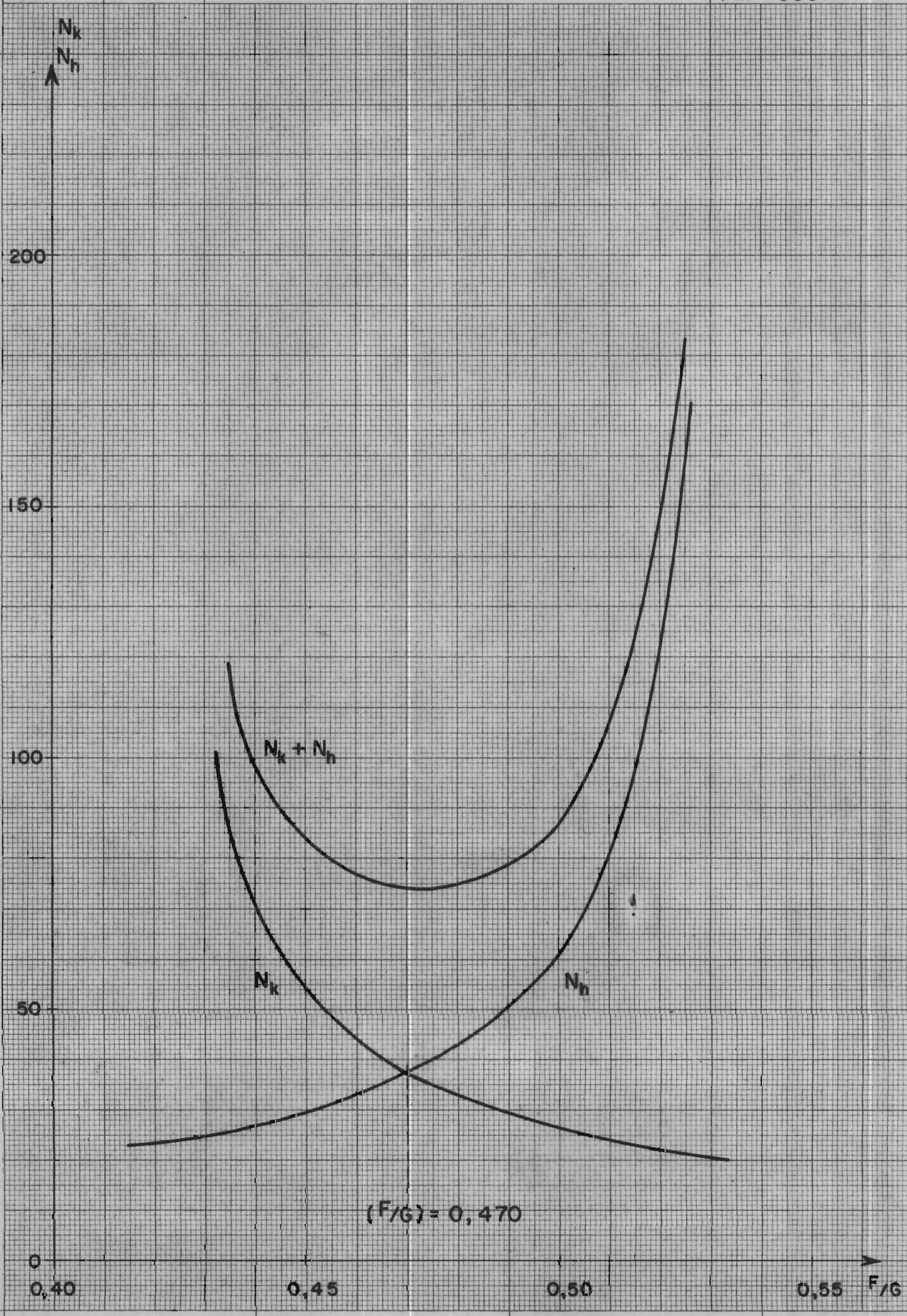
LÍNURIT 9.

RAFORKUMÁLASTJÓRI

Ákvörðun á hagkvæmasta gildinu á F/G

$f = 0{,}985$; $e = 7$; $T_1 = 30°C$; $T_2 = 120°C$

2/12 '57	GP/IG
Tnr. 12	
J - Þungt vatn	
Fnr. 3887	



RAFORKUMÁLASTJÓRI

LÍNURIT 10.

$P = 100$ tonn/ári

$T_1 = 30°C$; $T_2 = 120°C$

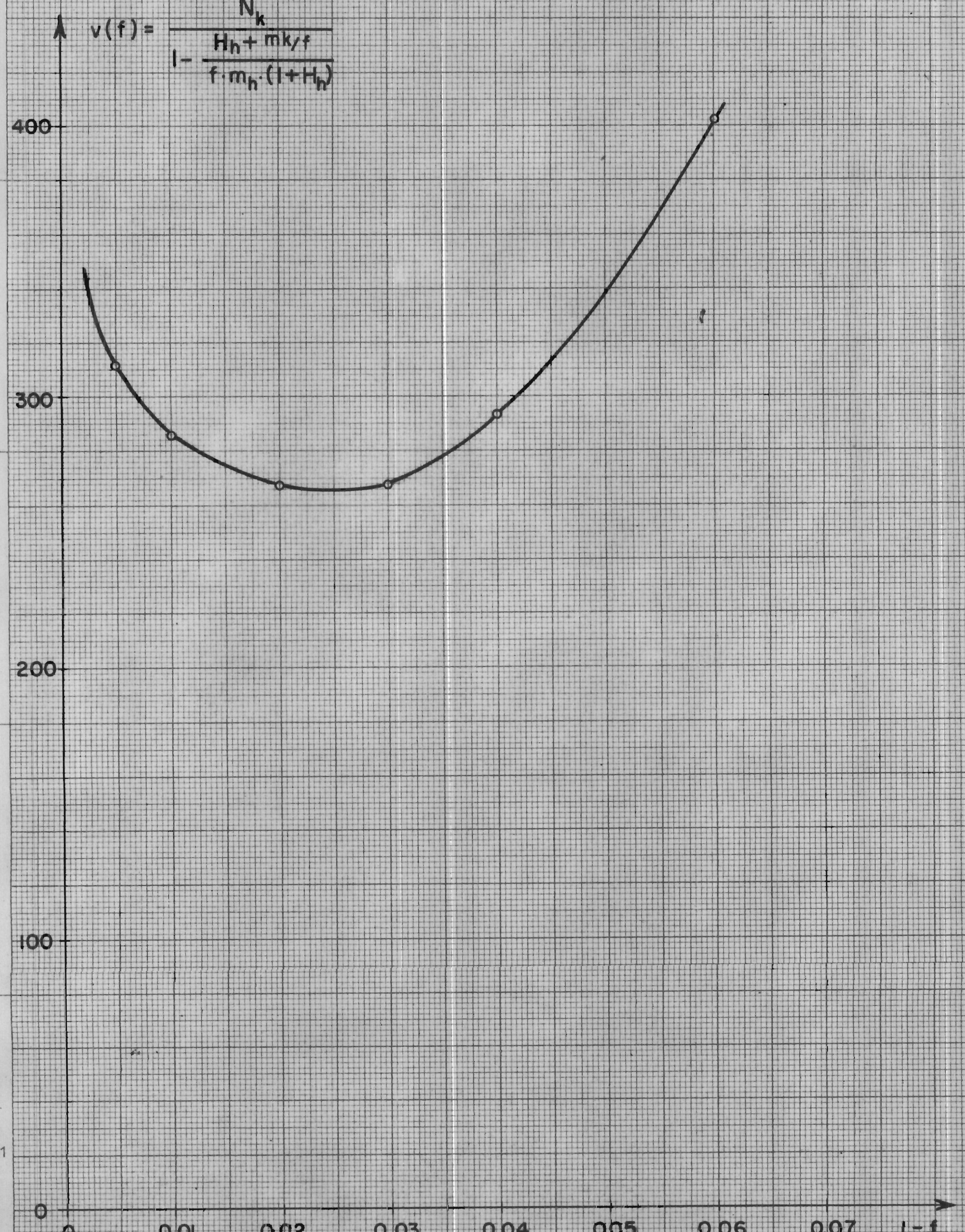
Þrýstingur í heitum turni: 20 atm.

2/12 '57 GP/IG

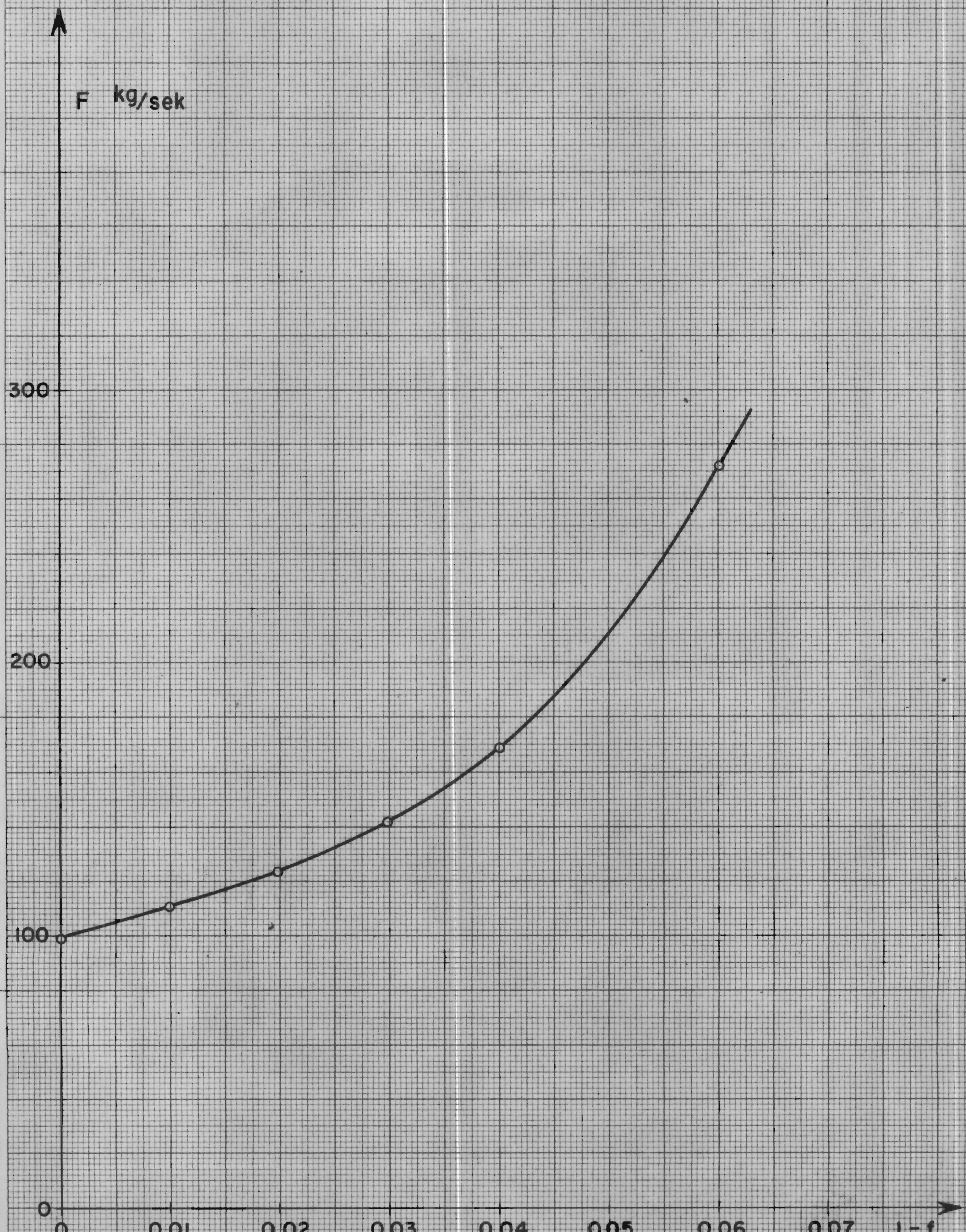
Tnr. 13

J – Þungt vatn

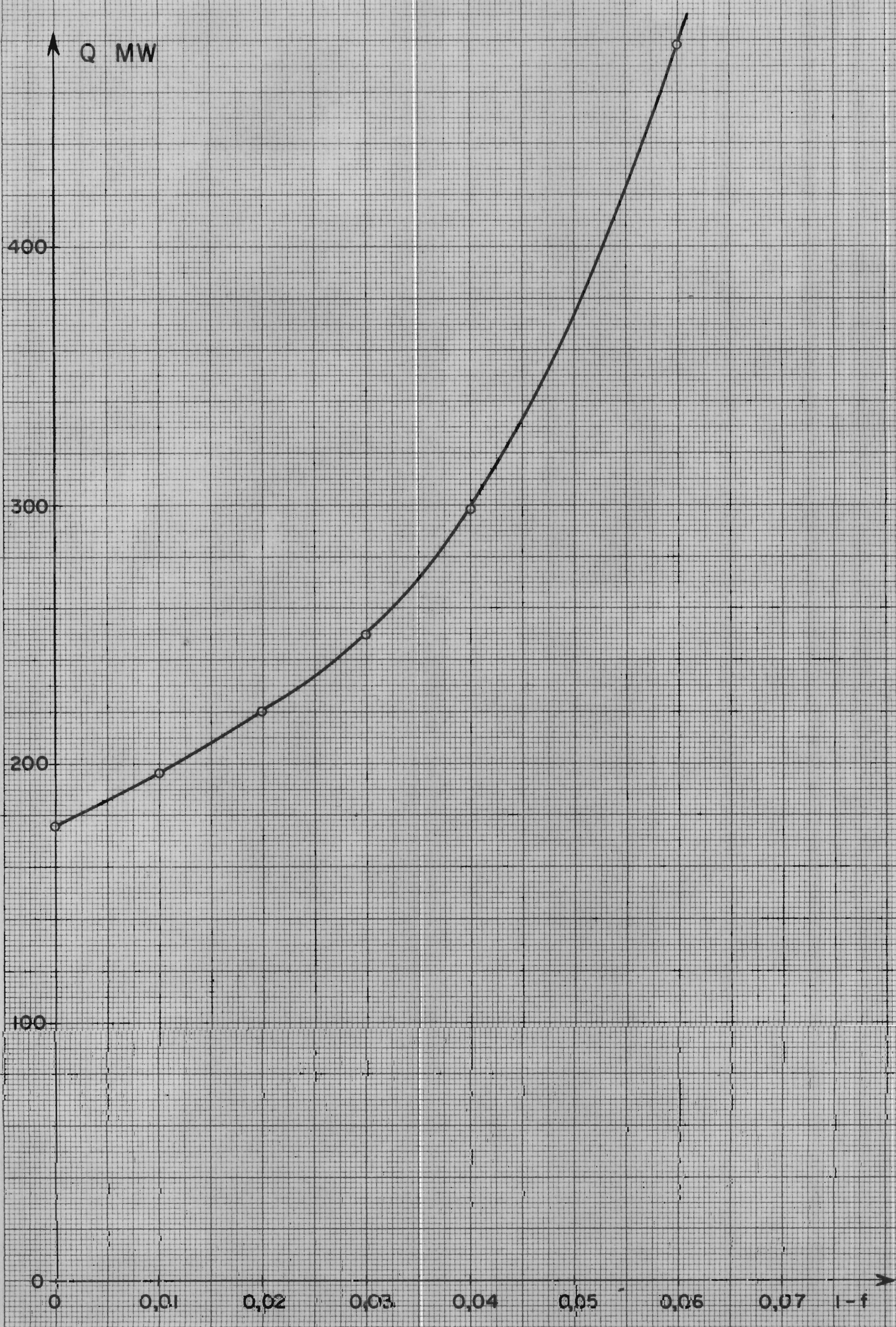
Fnr. 3888



LÍNURIT II.	RAFORKUMÁLASTJÓRI P=100 tonn/ári $T_1 = 30°C$; $T_2 = 120°C$ Þrýstingur í heitum turni: 20 atm.	2/12'57 GP/IG Tnr. 14 J - Þungt vatn Fnr. 3889



LÍNURIT 12.	RAFORKUMÁLASTJÓRI P=100 tonn/ári T_1 = 30°C; T_2 = 120°C Þrýstingur í heitum turni: 20 atm.	2/12 '57 GP/IG. Tnr. 15 J - Þungt vatn Fnr. 3890



RAFORKUMALASTJÓRI

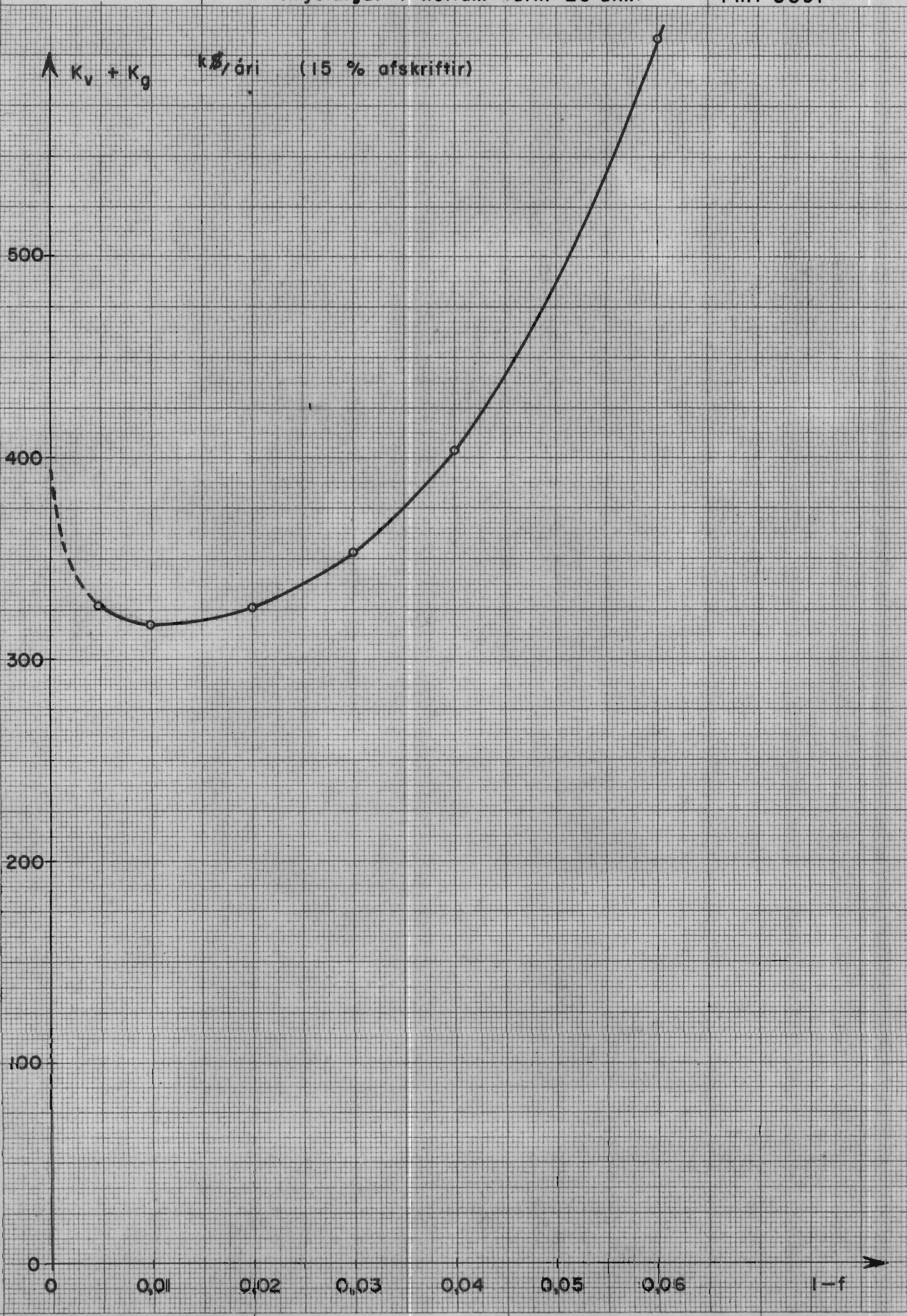
LÍNURIT 13.

P=100 tonn/ári

$T_1 = 30°C$; $T_2 = 120°C$

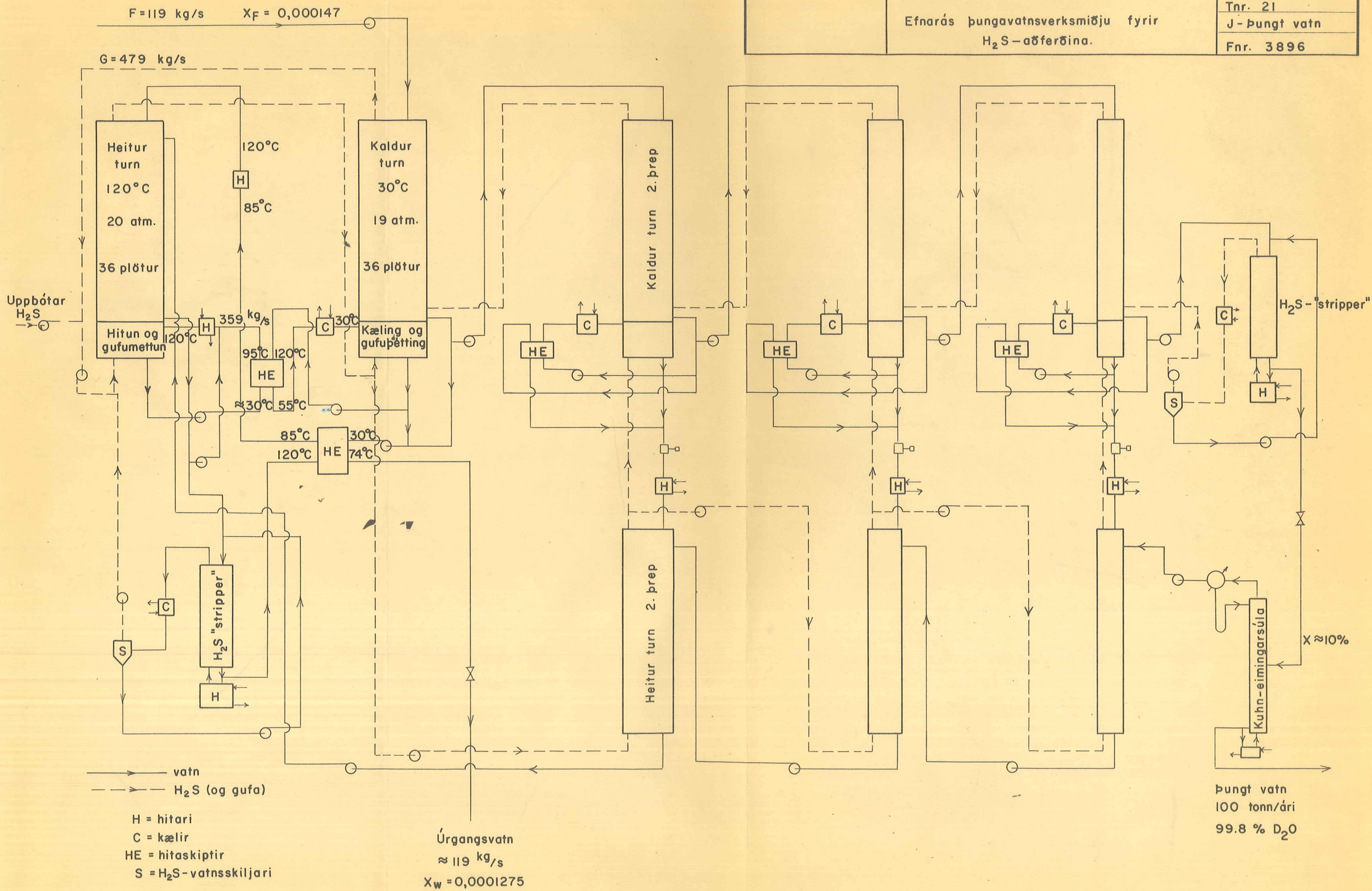
Þrýstingur í heitum turni: 20 atm.

2/12 '57	GP/IG.
Tnr. 16	
J-Þungt vatn	
Fnr. 3891	



523 A4
SIS 73 25 01
1 × 1 mm
ESSELTE
4446

	RAFORKUMÁLASTJÓRI Efnarás þungavatnsverksmiðju fyrir H_2S–aðferðina.	2/12'57 AV-GP/IG Tnr. 21 J - Þungt vatn Fnr. 3896



RAFORKUMÁLASTJÓRI	2/12 '57 GP/IG.
McCabe-Thiele línurit yfir fyrsta og annað	Tnr. 22
þrep D_2O-vinnslu með H_2S aðferðinni.	J- Þungt vatn
	Fnr. 3897

MYND 4.

Framleiðsla: 100 tonn D_2O/ári

H_2O: F = 119 kg/s = 6610 mol/s X_F = 0.000147

H_2S: G = 479 kg/s = 14050 mol/s

Kaldur turn: Hitastig 30°C
þrýstingur 19 atm.

Heitur turn: Hitastig 120°C
þrýstingur 20 atm.

e = 6

f = 0,985 (I. þrep)

m_h = 0,585 } Jafnvægislínur
m_k = 0,437

β_k = 0,484 } Starfslínur
β_h = 0,529

$\frac{F}{G}$ = 0,470