

К ЕДИНООБРАЗНОМУ CFD-ОПИСАНИЮ РАБОТОСПОСОБНОСТИ РЕКОМБИНАТОРОВ С УЧЕТОМ ДЕТАЛЬНОГО МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ВОДОРОДА

**А.В. Авдеенков*, О.И. Ачаковский*, В.В. Кетлеров*, С.Л. Соловьев*,
К. Х. Зьонг****

***АО «ВНИИАЭС»**

109507, Москва, ул. Ферганская, 25

****ИАТЭ НИЯУ МИФИ**

249039, Калужская обл., г. Обнинск, Студгородок, 1



Для согласованного CFD-обоснования работоспособности реактора водорода применен детальный механизм реакции рекомбинации водорода и кислорода. Расчетная методика с использованием детального механизма позволяет претендовать на универсальность в численном обосновании как производительности реактора, так и порога беспламенной рекомбинации. Используемый подход обеспечивает единообразие при численном обосновании характеристик реакторов различного типа с точки зрения как верификации свойств моделей реакторов, так и оптимизации конструкции реакторов для возможного улучшения их характеристик. Разработанные на основании этого подхода модели были применены как для плоских, так и для цилиндрических каталитических элементов, которые используются соответственно в реакторах типа FR и РВК. В рамках численных исследований проведена верификация детального механизма рекомбинации, в частности, проведено сравнение распределений температур вдоль каталитических элементов и производительностей. Было получено хорошее согласие между расчетными и экспериментальными данными. В рамках подхода учитывается механизм не только поверхностной рекомбинации водорода и кислорода на платине, но и объемной рекомбинации в газовой фазе. Это позволяет рассчитать начало интенсивного горения вне каталитических пластин, что является признаком объемного воспламенения водородо-воздушной среды. Концентрации, при которых возможно такое воспламенение, получены при разных содержаниях водяного пара в среде. Таким образом, предложенный подход и созданные модели позволяют полностью описывать работоспособность реакторов самой различной конструкции без привлечения дополнительных экспериментальных данных, что крайне необходимо при обосновании водородной взрывобезопасности АЭС.

Ключевые слова: рекомбинатор, производительность, химическая кинетика, поджиг, многошаговая реакция.

Для цитирования: Авдеенков А. В., Ачаковский О.И., Кетлеров В.В., Соловьев С.Л., Зыонг К.Х. К единообразному CFD-описанию работоспособности рекомбинаторов с учетом детального механизма реакции окисления водорода. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2023. – № 4. – С. 61-72. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2023.4.05>

ВВЕДЕНИЕ

Наиболее распространенная в мире практика аварийного удаления водорода из герметичных объемов атомных станций базируется на использовании принципа пассивной каталитической рекомбинации водорода на различных каталитических элементах, входящих в состав пассивных каталитических рекомбинаторов водорода (ПКРВ) [1–4]. Каталитические элементы собираются в каталитические блоки и большие сборки и могут иметь различную геометрическую форму, включая листы из нержавеющей стали, покрытые каталитическим материалом на основе субстава Pt/Pd [5], или цилиндрические каталитические элементы из керамики, черненые платиной [6]. При появлении во внутреннем объеме рекомбинатора водорода на каталитической поверхности начинается экзотермическая реакция рекомбинации водорода и кислорода в воду.

Рекомбинаторы линейки РВК [6] (производства ЗАО «ИНПК РЭТ», Россия) и линии FR [5] (производства AREVA/Siemens) сертифицированы и используются на российских атомных электростанциях (АЭС). Каталитический блок рекомбинатора типа РВК содержит каталитические цилиндрические стержни, а рекомбинаторы типа FR содержат пластины. Количество стержней или пластин различно для разных моделей и определяет общий размер и геометрию рекомбинатора. На основании экспериментальных данных получают аппроксимирующие зависимости для производительности рекомбинаторов, т.е. скорости потребления водорода (или скорость рекомбинации) [3, 7–9]. Полученные зависимости носят сугубо эмпирический характер и вряд ли могут быть использованы для вычисления производительности за пределами условий проведения экспериментов, так как характеристики рекомбинатора существенным образом зависят от скорости поступления водородно-воздушной среды в рекомбинатор [3, 10, 11].

Полученные эмпирические корреляции позволяют определить удельную произво-

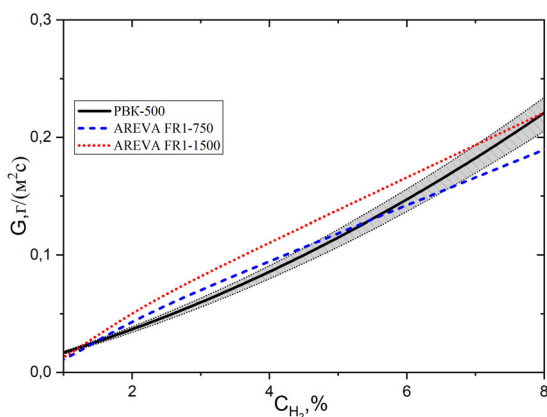


Рис. 1. Сравнение удельных производительностей ПКРВ типа РВК и FR в зависимости от объемной концентрации водорода

дительность каталитических элементов (производительность на единицу площади поверхности катализатора). На рисунке 1 показаны зависимости удельной производительности для двух типов рекомбинаторов, а именно, РВК и FR, от объемной доли водорода на входе, которые с учетом возможных ошибок при получении эмпирических корреляций (отклонения до ~20%) довольно близки. Это указывает на то, что абсолютная производительность, в основном, определяется площадью каталитической поверхности, по крайней мере, при относительно низких (<8 об.%) концентрациях водорода.

При более высоких концентрациях водорода ситуация не столь однозначна и может зависеть от геометрии каталитических блоков. При низкой концентрации рекомбинация водорода происходит на поверхностях катализатора, и площадь этих поверхностей, в основном, определяет производительность ПКРВ, в то время как геометрия каталитических элементов (пластин или стержней и их взаимное расположение) играет второстепенную роль. При более высокой концентрации рекомбинация происходит как на поверхности катализатора, так и в газовой фазе в объеме рекомбинатора, и таким образом геометрия каталитического блока может влиять на величину «концентрации воспламенения» смеси воздух-водород.

Как показывают численные симуляции аварийных режимов со значительным выходом водорода, условия окружающей среды в области рекомбинатора отнюдь не те, для которых были получены вышеозначенные эмпирические корреляции. В большинстве случаев необходимо учитывать переходные режимы, так как скорость подачи и концентрация водорода могут меняться достаточно быстро, а скорость поступления воздушно-водородной смеси в рекомбинатор существенным образом влияет на его производительность.

Таким образом, полномасштабное численное, а тем более экспериментальное обоснование работы рекомбинатора во всевозможных нестационарных и переходных режимах представляется трудновыполнимой задачей, а построение рабочей модели рекомбинатора любого масштаба и для любых условий среды является необходимым шагом для обоснования водородной безопасности. В рамках разрабатываемого подхода используется детальный механизм химической кинетики (многошаговая реакция рекомбинации), который позволяет претендовать на универсальность описания работы рекомбинатора, так как используются известные скорости химических реакций как на поверхности рекомбинатора, так и в газовой фазе.

ВЕРИФИКАЦИЯ ДЕТАЛЬНОГО МЕХАНИЗМА РЕКОМБИНАЦИИ В РАМКАХ CFD-КОМПЛЕКСА STAR CCM+

Проведен расчетный анализ рекомбинации водорода с использованием программного комплекса STAR CCM+ [12]. Подход сопряженного решения задач теплогидравлики и химической кинетики успешно продемонстрирован в работах [8, 11, 13, 14], где представлены его основные детали и который использовался для расчетов, обсуждаемых в статье. Поверхностная химическая кинетика для каталитического окисления водорода на платине [15] содержит 12 реакций. Химическая кинетика газовой фазы горения водорода в воздухе [16] содержит 21 реакцию. Подход численно реализован и протестирован на экспериментальных данных как для катализатора типа FR (прямоугольные пластины, эксперименты REKO-3 [3, 10]), так и для катализатора типа PBK (цилиндрические стержни, эксперименты HUSA [11]).

Пластинчатый катализатор типа FR

Четыре каталитические пластины (нержавеющая сталь, покрытая катализатором) в установке REKO-3 расположены параллельно, образуя вертикальные прямоугольные проточные каналы. Такая конструкция представляет собой секцию рекомбинатора конструкции типа FR [10]. Расчеты были выполнены в двухмерной постановке по примеру работ [10, 13], т.е. влиянием краевых эффектов из-за конечности ширины пластин пренебрегаем.

На рисунке 2а показаны экспериментальные профили температур и результаты расчетов для различных концентраций водорода на входе при скорости потока воздушно-водородной смеси $v = 0,8$ м/с. На рисунке 2б показаны экспериментальные профили концентрации водорода и результаты расчетов для различных значений

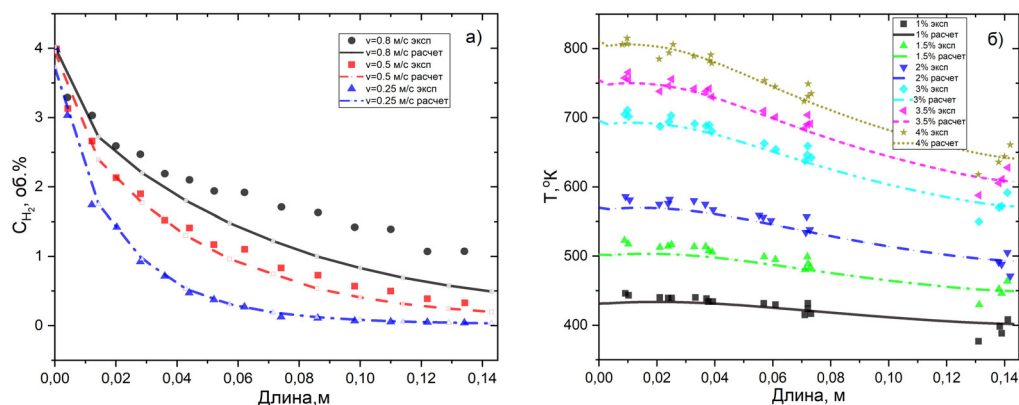


Рис. 2. Профили концентрации водорода (а) и температурные профили (б): экспериментальные данные REKO-3 [10] и результаты расчетов STAR CCM+ [8]

средней скорости воздушно-водородной смеси на входе. Для центрального канала показаны расчетные профили температуры и концентрации водорода. Получено достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными за исключением результатов для очень низкой концентрации 0,5 об.%. Следует отметить, что расчеты весьма чувствительны к деталям геометрии, например, небольшое изменение расстояния между двумя пластинами (около 1 мм) меняет расчетные профили температуры на десятки градусов. Вероятно, что такую чувствительность необходимо учитывать также при обработке экспериментальных данных.

Цилиндрический катализатор типа РВК

Для численного тестирования подхода при использовании цилиндрических (стержни) катализаторов типа РВК были использованы некоторые из экспериментальных данных, приведенных в [11], где подробно обсуждаются детали и параметры эксперимента.

Проточный канал экспериментального стенда представляет собой вертикальный прямоугольный короб (площадь поперечного сечения $45,5 \times 242$ мм), в котором установлена рамка рекомбинатора РВК, содержащая 14 каталитических стержней (рис.3). В нижней части короба установлен турбулизатор – пластина с отверстиями, которая существенным образом гомогенизирует смесь, но и существенно замедляет ее скорость. Температуры поверхностей измерялись с помощью инфракрасной каме-

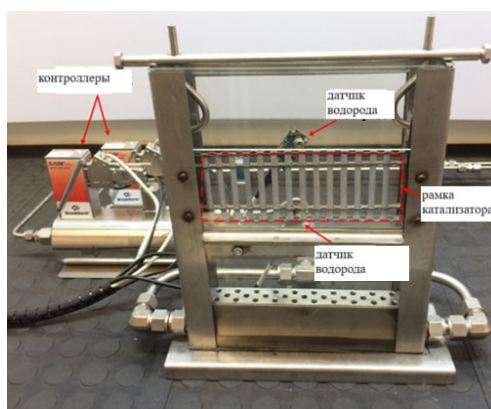


Рис. 3. Экспериментальная установка включает в себя секцию катализатора, датчики водорода и регуляторы расхода газа [11]

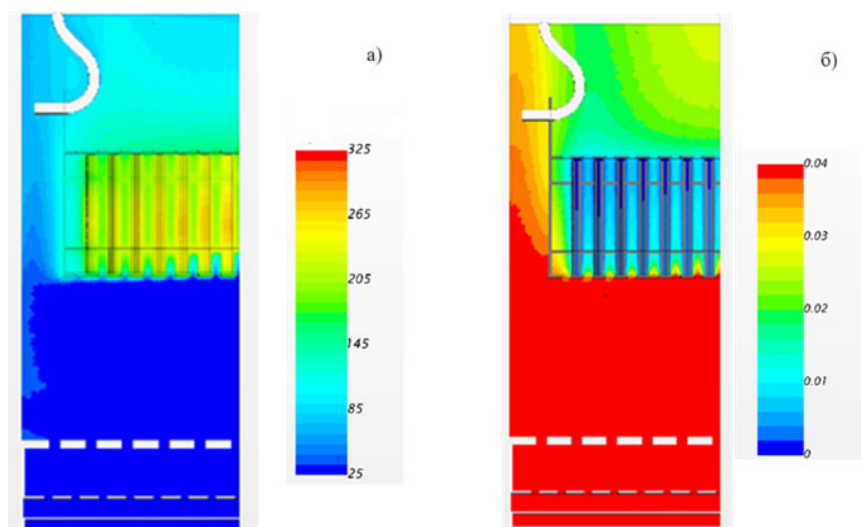


Рис. 4. Поле температур в градусах Цельсия (а) и поле распределения водорода в мольных долях (б) при 4 об.% водороде на входе

ры (подробнее см. [11]). Для измерения концентрации водорода датчики были закреплены в двух местах – под и над рамкой катализатора.

На рисунке 4 показаны характерные результаты расчетов поля температур и распределение относительной доли водорода. Результаты расчетов приведены для 4 об.% концентрации водорода. Расчеты явно демонстрируют большой прогрев центральных стержней. Существенная часть водорода уходит в обход каталитической рамки, слева и справа от нее, далее перемешиваясь с прошедшим и не успевшим рекомбинировать в каталитической рамке водородом. Полученный через турбулизатор поток смеси обеспечивает ее очень малую скорость подачи к катализатору. Основное количество пара образуется у поверхности стержней, что также является сдерживающим фактором воспламенения среды даже при высоких температурах.

На рисунке 5а показаны экспериментальные профили температуры для всех 14-ти стержней и результаты расчетов для семи стержней на одной стороне канала, поскольку численная модель симметрична относительно плоскости между седьмым

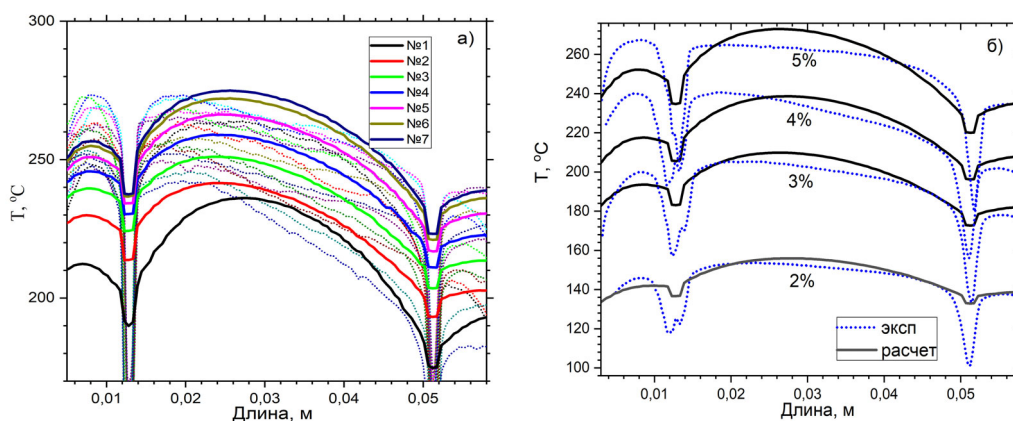


Рис. 5. Температурные профили: экспериментальные данные HYSA [11] (пунктирные линии) и результаты расчетов STAR CCM+ [8] (сплошные линии для семи стержней) при 4 об.% концентрации водорода на входе (а); расчетные и экспериментальные профили температуры при различных концентрациях водорода на входе после усреднения по всем 14-ти стержням (б)

и восьмью стержнями, хотя экспериментальные данные не выявили полной симметрии температурных профилей для симметрично расположенных стержней. Все температурные профили имеют по два минимума, соответствующих положению частей рамок из нержавеющей стали, которые удерживают стержни в вертикальном положении. Очевидно, что эти стальные элементы влияют на величины температур каталитической поверхности стержней в месте их расположения (стержни удерживаются рамой неплотно и имеют небольшой люфт); и сами извлеченные в эксперименте температуры в области элементов стальной рамки есть температуры стали, а не каталитической поверхности стержня. С точки зрения расчетов это приносит дополнительные трудности в точности моделирования и особенно в точности воспроизведения экспериментальных результатов вблизи элементов рамки. Из сравнения экспериментальных результатов и расчетов видно, что наибольшие различия проявляются именно на концах крайних в рамке стержней.

На рисунке 5б показаны экспериментальные и рассчитанные профили температур, усредненные по всем 14-ти стержням. В таблице 1 приведены экспериментальные и расчетные значения концентрации водорода в точке расположения датчика водорода над каталитической рамкой. С учетом сложности эксперимента и расчетной чувствительности к деталям геометрии стенда получено весьма хорошее согласие.

Таким образом, проведенные расчеты демонстрируют успешное применение метода с использованием детального механизма рекомбинации водорода на имеющихся экспериментальных данных как для пластинчатого рекомбинатора типа FR, так и для стержневого рекомбинатора типа РВК. В дальнейшем данный подход будет использован для построения полномасштабной CFD-модели рекомбинатора и проверки масштабируемости его производительности.

Таблица 1

Значения концентрации водорода в верхней точке над стержнями

Входная концентрация H_2 , %	Эксперимент, %	Расчет, %
2	1.01	0.90
3	1.42	1.32
4	1.82	1.73
5	2.14	2.14

РАСЧЕТНОЕ ОБОСНОВАНИЕ ПРЕДЕЛА БЕСПЛАМЕННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

Рекомбинация водорода и кислорода на каталитической поверхности (точнее – ее скорость) определяет производительность рекомбинатора в целом и является одним из основных элементов работоспособности рекомбинатора, но не единственной его важной характеристикой. Согласованный подход включает в себя не только расчетное обоснование производительности, но и другой важной характеристики рекомбинатора, а именно, определение предела беспламенной рекомбинации (или предела поджига). Для этого необходимо учитывать детальный механизм рекомбинации не только на поверхности катализатора, но и в газовой фазе внутри объема рекомбинатора.

В работе [17] для количественного определения предела беспламенной рекомбинации была предложена методология для расчета рекомбинации водорода на катализаторе и в газовой фазе между каталитическими пластинами. Предел беспламенной рекомбинации водорода (или предел поджига) определяется по резкому увели-

чению скорости энерговыделения в объеме газа с одновременным уменьшением скорости энерговыделения в поверхностном каталитическом слое. Для пластинчатого рекомбинатора типа FR было показано, что заметный вклад объемного горения начинается с концентраций несколько больше 6 об.% в сухой газовой смеси.

Далее рассмотрены результаты расчетов со следующими исходными данными для воздушно-водородной смеси: входные скорости 0,2; 0,8 и 2 м/с без водяного пара при начальной температуре смеси 300 К, с 45 об.%-паром и начальной температуре смеси 373 К. Используемые начальные данные являются вполне типичными для работы рекомбинатора и были использованы в эксперименте REKO-3 [13], но для концентраций водорода, не вызвавших поджиг смеси. Все приведенные расчеты проведены по методике, описанной в симметричной 2D-постановке, для упрощенной геометрии, содержащей две каталитические пластины типа FR, поэтому скорости рекомбинации даны в единицах кг/с/м, т.е. на единицу ширины пластины.

На рисунках 6–8 представлены расчеты для скорости рекомбинации при разных входных скоростях газовой смеси. Поскольку энерговыделение происходит за счет рекомбинации, то удобнее сравнивать именно скорость рекомбинации на поверхности и в пространстве (объеме) между каталитическими пластинами. Результаты расчетов при входной скорости 0,8 м/с явно продемонстрировали, что наблюдается резкий рост объемной рекомбинации приблизительно с 6 об.% концентрации водорода

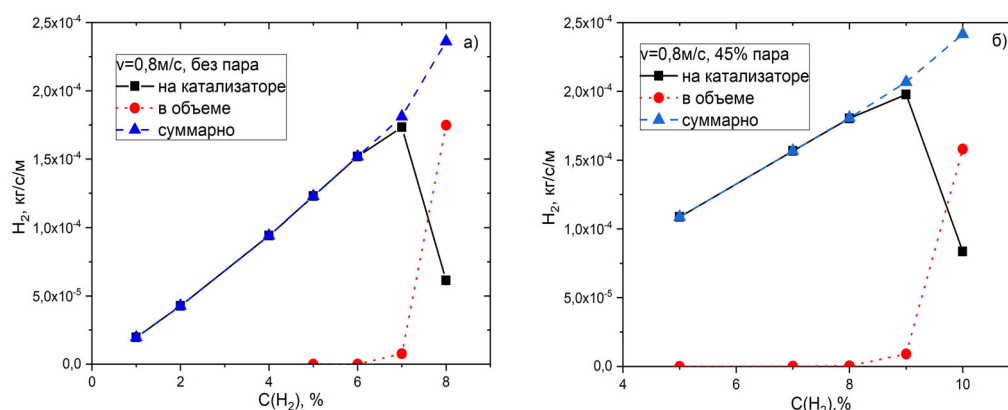


Рис. 6. Скорость рекомбинации водорода в зависимости от его концентрации: без пара (а) и при концентрации пара 45 об.% (б) в начальный момент времени (скорость потока на входе 0,8 м/с)

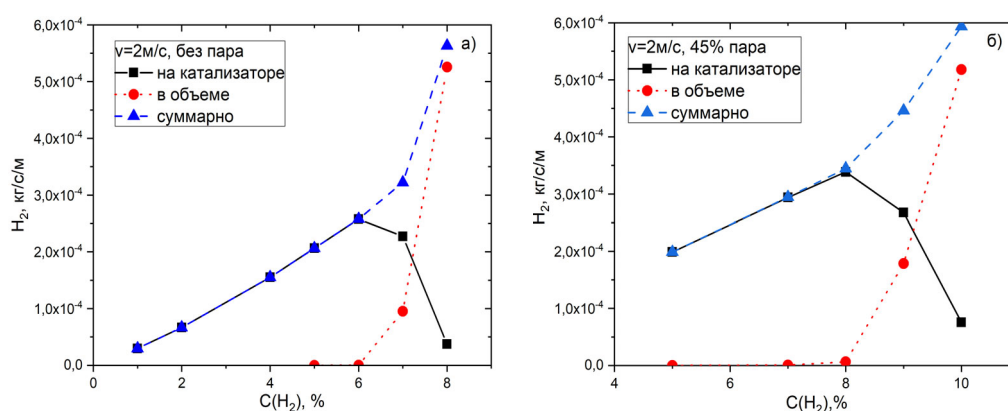


Рис. 7. Скорость рекомбинации водорода в зависимости от его концентрации: без пара (а) и при концентрации пара 45 об.% (б) в начальный момент времени (скорость потока на входе 2 м/с)

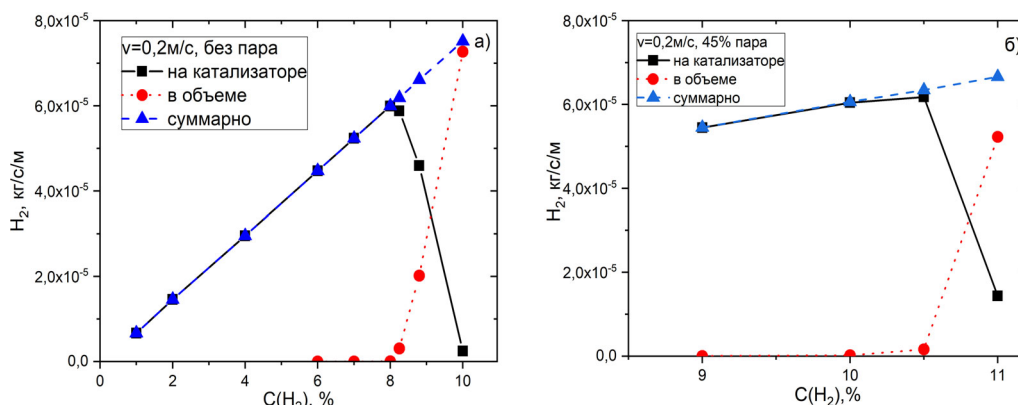


Рис. 8. Скорость рекомбинации водорода в зависимости от его концентрации: без пара (а) и при концентрации пара 45 об. % (б) в начальный момент времени (скорость потока на входе 0,2 м/с)

да. При 45 об.% концентрации пара объемная рекомбинация начинается не ранее, чем с 8 об.% концентрации водорода.

На рисунке 7 представлены расчеты для скорости рекомбинации при входной скорости газовой смеси 2 м/с. В целом расчеты дали похожие результаты, как и при входной скорости смеси 0,8 м/с, по концентрации водорода, начиная с которой происходит объемное воспламенение смеси (поджиг), хотя при несколько меньших значениях концентрации водорода. Увеличение скорости газовой смеси, очевидно, приводит к увеличению скорости рекомбинации, что в свою очередь приводит к понижению порога поджига. На рисунке 8 представлены результаты расчетов при входной скорости газовой смеси 0,2 м/с. В этом случае начальная скорость ниже, чем могла бы быть при развитой естественной циркуляции для данной геометрии (около 0,5 м/с), по сути, данный режим является режимом сдерживания развития естественной циркуляции. В этом случае объемное воспламенение смеси происходит при больших концентрациях водорода (примерно при 8 об.% концентрации водорода без пара и при 10,5 об.% с паром); скорость рекомбинации также значительно падает.

Результаты расчетов продемонстрировали, что чем больше входная скорость потока газовой смеси, тем выше скорость рекомбинации на катализаторе, а значит, производительность рекомбинатора в целом также увеличится. Так, например, скорость рекомбинации при скорости потока 2 м/с больше, чем при скорости 0,2 м/с приблизительно в пять раз (см. рис. 7, 8).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В среде программного комплекса STAR CCM+ реализован единообразный подход для численного анализа рекомбинации водорода на каталитической поверхности и в газовой фазе. Получен ряд практически важных результатов для моделирования режимов работы ПКРВ. Существенной частью подхода является использование детального механизма реакции рекомбинации водорода и кислорода, что позволяет избежать часто используемой подгоночной процедуры при определении параметров одношаговой реакции для описания производительности рекомбинатора. Данный подход является универсальным для определения производительности в условиях как естественной циркуляции, так принудительной циркуляции в области расположения рекомбинаторов, что однозначно является необходимым при численном обосновании тяжелых аварий с выходом водорода. Приведены результаты численного моделирования экспериментов (REKO-3, HUSA), подтвердившие количественное и качественное соответствие расчетов имеющимся экспериментальным данным.

На основании разработанного CFD-подхода рассчитаны и проанализированы пороговые значения концентраций водорода для беспламенной рекомбинации в зависимости от внешних условий.

Заложены основы разрабатываемой модели взаимодействия рекомбинатора и паро-водородо-воздушной среды, которые дают возможность численными методами достичь высокой точности и предсказуемости расчетного обоснования работы рекомбинаторов водорода при любых внешних условиях, включая различные переходные режимы с принудительной циркуляцией паро-водородо-воздушной смеси, что особенно важно для численной симуляции протекания тяжелых аварий с выходом водорода.

Литература

1. IAEA-TECDOC-1661. Mitigation of Hydrogen Hazards in Severe Accidents in Nuclear Power Plants. IAEA, Vienna, 2011.
2. Reinecke E.A., Bentaib A., Kelm S., Jahn W., Meynet N., Caroli C. Open Issues in the Applicability of Recombiner Experiments and Modelling to Reactor Simulations. // Prog. Nucl. Energy. – 2010. – 52(1). – PP. 136-147. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2009.09.010>
3. Avdeenkov A.V., Sergeev V.V., Stepanov A.V., Malakhov A.A., Koshmanov D.Y., Soloviev S.L., Bessarabov D.G. Math Hydrogen Catalytic Recombiner: Engineering Model for Dynamic Full-Scale Calculations. // Int. J. Hydrogen Energy. – 2018. – 43(52). – PP. 23523-23537. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.212>
4. IAEA International Nuclear Information System (INIS). Электронный ресурс: https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/33/020/33020098.pdf (дата доступа 20.05.2023).
5. Framatome GmbH. Электронный ресурс: <https://www.framatome.com/solutions-portfolio/portfolio/product?product=A0640> (дата доступа 20.05.2023).
6. ООО ИНПК «Русские Энергетические Технологии». Электронный ресурс: <https://rettech.ru/pkrv> (дата доступа 20.05.2023).
7. Tarasov O.V., Kiselev A.E., Filippov A.S., Yudina T.A., Grigoruk D.G., Koshmanov D.E., Keller V.D., Khristenko E.B. Development and Verification of a Model of RVK-500, -1000 Recombiners for Modeling the Containment Shells of NPP with VVER by Computational Hydrodynamics. // Atomic Energy. – 2017. – 121(3). – PP. 131-136.
8. Avdeenkov A.V., Kalyakin S.G., Soloviev S.L., Duong Quang H. On the scalability of the operating capacity of hydrogen recombiners. // Nuclear Energy and Technology. – 2022. – 8(2). – PP. 143-152.
9. Bachelier E., Arnould F., Auglaire M., de Boeck B., Braillard O., Eckardt B., Ferroni F., Moffett R. Generic approach for designing and implementing a passive autocatalytic recombiner PAR-system in nuclear power plant containments. // Nucl. Eng. Des. – 2003. – 221. – PP. 151-165. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0029-5493\(02\)00330-8](https://doi.org/10.1016/S0029-5493(02)00330-8)
10. Reinecke E.A., Boehm J., Drinovac P., Struth S., Tragsdorf I.M. Modelling of catalytic recombiners: Comparison of REKO-DIREKT calculations with REKO-3 experiments, Proceedings of the International Conference «Nuclear Energy for New Europe 2005». Bled, Slovenia, September 5-8, 2005, 092.1-092.10.
11. Malakhov A.A., du Toit M.H., du Preez S.P., Avdeenkov A.V., Bessarabov D.G. Temperature Profile Mapping Over a Catalytic Unit of a Hydrogen Passive Autocatalytic Recombiner: Experimental and CFD study. // Energy Fuels. – 2020. – 34(9). – PP. 11637-11649. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c01582>
12. Siemens STAR CCM+ CFD software. Электронный ресурс: <https://plm.sw.siemens.com/en-US/simcenter/fluids-thermal-simulation/star-ccm/> (дата доступа 20.05.2023).
13. Reinecke E.A., Kelm S., Jahn W., Jäkel C., Allelein H.J. Simulation of the Efficiency of Hydrogen Recombiners as Safety Devices. // Int. J. Hydrogen Energy. – 2013. – 38(19). – PP. 8117-8124. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.09.093>
14. Baggemann J., Jahn W., Kelm S., Reinecke E.A., Allelein H.J. Numerical Study on the Influence of Different Boundary Conditions on the Efficiency of Hydrogen Recombiners inside a Car Garage. // Int. J. Hydrogen Energy. – 2017. – 42(11). – PP. 7608-7616.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.04.084>

15. Appel C., Mantzaras J., Schaeren R., Bombach R., Inauen A., Kaeppli B., Hemmerling B., Stapanoni A. An Experimental and Numerical Investigation of Homogeneous Ignition in Catalytically Stabilized Combustion of Hydrogen/Air Mixtures over Platinum, *Combust. // Flame.* – 2002. – 28(4). – PP. 340-368. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(01\)00363-7](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(01)00363-7)

16. Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, San Diego Mechanism, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego. Электронный ресурс: <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html> (дата доступа 20.05.2023).

17. Meynet N., Bentaib A. Numerical Study of Hydrogen Ignition by Passive Autocatalytic Recombiners. // *Nuclear Technology.* – 2012. – 178(1). – PP. 17-28.

DOI: <https://doi.org/10.13182/NT12-A13544>

Поступила в редакцию 30.05.2023

Авторы

Авдеенков Александр Владимирович, начальник отдела, к.ф.-м.н.,

E-mail: avavdeenkov@vniiaes.ru

Ачаковский Олег Игоревич, Главный эксперт, к.ф.-м.н.,

E-mail: oiachakovskii@vniiaes.ru

Кетлеров Владимир Владимирович, главный эксперт,

E-mail: vvketlerov@vniiaes.ru

Соловьев Сергей Леонидович, научный руководитель, д.т.н.,

E-mail: slsoloviev@vniiaes.ru

Зьонг Кьонг Хуонг, аспирант,

E-mail: duonghuongnd1991@gmail.com

UDC 621.039.58

Towards a Uniform Description of Recombiners Performance by a Consistent CFD approach with the use of a Detailed Mechanism of Hydrogen Oxidation

*Avdeenkov A.V.**, *Achakovsky O.I.**, *Ketlerov V.V.**, *Soloviev S.L.**, *Duong Quang Huong***

*All-Russian Research Institute for Nuclear Power Plants Operation JSC

25 Ferganskaya Str., 109507 Moscow, Russia

**IATE MEPHI

1 Studgorodok, 249039 Obninsk, Kaluga region, Russia

ABSTRACT

For a consistent CFD substantiation of the recombiner performance, a detailed mechanism of hydrogen and oxygen recombination is used. The detailed mechanism of chemical kinetics (multi-step recombination reaction) makes it possible to claim universality, both in the numerical justification of the recombiner performance and in the justification of the flameless recombination threshold and makes it possible to justify the method for optimizing the recombiner to improve its characteristics. The models developed based on this approach were applied to both flat and cylindrical catalytic elements, which are used in FR and RVK recombiners, respectively. As part of the numerical studies, the detailed recombination mechanism was verified, namely the temperature distribution along the catalytic elements was compared and the performance of catalytic

elements was compared as well. Good agreement was obtained between the calculated and experimental data. The approach considers not only the mechanism of surface recombination of hydrogen and oxygen on platinum, but also the mechanism of recombination in the gas phase. This makes it possible to calculate the onset of intense combustion outside the catalytic plates, which is a sign of volumetric ignition of the hydrogen-air environment. The concentrations at which such ignition is possible were obtained at different contents of water vapor in the medium. Thus, the proposed approach and the created models make it possible to fully describe the performance of recombiners of various designs without the use of additional experimental data, which is extremely necessary when justifying the hydrogen explosion safety of nuclear power plants.

Key words: recombinator, productivity, chemical kinetics, ignition, multi-step reaction.

For citation: Avdeenkov A.V., Achakovskiy O.I., Ketlerov V.V., Soloviev S.L., Duong Quang Huong. Towards a Uniform Description of Recombiners Performance by a Consistent CFD approach with the use of a Detailed Mechanism of Hydrogen Oxidation. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2023, no. 4, pp. 61-72; DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2023.4.05> (in Russian).

REFERENCES

1. IAEA-TECDOC-1661. Mitigation of Hydrogen Hazards in Severe Accidents in Nuclear Power Plants. IAEA, Vienna, 2011.
2. Reinecke E.A., Bentaib A., Kelm S., Jahn W., Meynet N., Caroli C. Open Issues in the Applicability of Recombiner Experiments and Modelling to Reactor Simulations. *Prog. Nucl. Energ.*, 2010, 52(1), pp. 136-147. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2009.09.010>
3. Avdeenkov A.V., Sergeev V.V., Stepanov A.V., Malakhov A.A., Koshmanov D.Y., Soloviev S.L., Bessarabov D.G. Math Hydrogen Catalytic Recombiner: Engineering Model for Dynamic Full-Scale Calculations. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2018, 43(52), pp. 23523-23537. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.212>
4. IAEA International Nuclear Information System (INIS). Available at: https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/33/020/33020098.pdf (accessed May 20, 2023)
5. Framatome GmbH. Available at: <https://www.framatome.com/solutions-portfolio/portfolio/product?product=A0640> (accessed May 20, 2023).
6. LLC ISPC «Russian Energy Technology». Available at: <https://retech.ru/pkrv> (accessed May 20, 2023).
7. Tarasov O.V., Kiselev A.E., Filippov A.S., Yudina T.A., Grigoruk D.G., Koshmanov D.E., Keller V.D., Khristenko E.B. Development and Verification of a Model of RVK-500, -1000 Recombiners for Modeling the Containment Shells of NPP with VVER by Computational Hydrodynamics. *Atomic Energy*, 2017, 121(3), pp. 131-136.
8. Avdeenkov A.V., Kalyakin S.G., Soloviev S.L., Duong Quang H. On the scalability of the operating capacity of hydrogen recombiners. *Nuclear Energy and Technology*, 2022, 8(2), pp. 143-152.
9. Bachelier E., Arnould F., Auglaire M., de Boeck B., Braillard O., Eckardt B., Ferroni F., Moffett R. Generic approach for designing and implementing a passive autocatalytic recombiner PAR-system in nuclear power plant containments. *Nucl. Eng. Des.*, 2003, 221, pp. 151-165. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0029-5493\(02\)00330-8](https://doi.org/10.1016/S0029-5493(02)00330-8)
10. Reinecke E.A., Boehm J., Drinovac P., Struth S., Tragsdorf I.M. Modelling of catalytic recombiners: Comparison of REKO-DIREKT calculations with REKO-3 experiments, Proceedings of the International Conference «Nuclear Energy for New Europe 2005». Bled, Slovenia, September 5-8, 2005, 092.1-092.10.
11. Malakhov A.A., du Toit M.H., du Preez S.P., Avdeenkov A.V., Bessarabov D.G. Temperature Profile Mapping Over a Catalytic Unit of a Hydrogen Passive Autocatalytic Recombiner: Experimental and CFD study. *Energy Fuels*, 2020, 34(9), pp. 11637-11649. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c01582>

12. Siemens STAR CCM+ CFD software. Available at: <https://plm.sw.siemens.com/en-US/simcenter/fluids-thermal-simulation/star-ccm/> (accessed May 20, 2023).
13. Reinecke E.A., Kelm S., Jahn W., Jukel C., Allelein H.J. Simulation of the Efficiency of Hydrogen Recombiners as Safety Devices. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2013, 38(19), pp. 8117-8124. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.09.093>
14. Baggemann J., Jahn W., Kelm S., Reinecke E.A., Allelein H.J. Numerical Study on the Influence of Different Boundary Conditions on the Efficiency of Hydrogen Recombiners inside a Car Garage. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2017, 42(11), pp. 7608-7616. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.04.084>
15. Appel C., Mantzaras J., Schaeren R., Bombach R., Inauen A., Kaeppli B., Hemmerling B., Stampanoni A. An Experimental and Numerical Investigation of Homogeneous Ignition in Catalytically Stabilized Combustion of Hydrogen/Air Mixtures over Platinum, *Combust. Flame*, 2002, 28(4), pp. 340-368. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(01\)00363-7](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(01)00363-7)
16. Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, San Diego Mechanism, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego. Available at: <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html> (accessed May 20, 2023).
17. Meynet N., Bentaib A. Numerical Study of Hydrogen Ignition by Passive Autocatalytic Recombiners. *Nuclear Technology*, 2012, 178(1), pp. 17-28. DOI: <https://doi.org/10.13182/NT12-A13544>

Authors

Alexander V. Avdeenkov, Department Head, Cand. Sci. (Phys.-Math.),
 E-mail: avavdeenkov@vniiaes.ru
 Oleg I. Achakovskii, Leading Expert, Cand. Sci. (Phys.-Math.),
 E-mail: oiachakovskii@vniiaes.ru
 Vladimir V. Ketlerov, Leading Expert,
 E-mail: vvketlerov@vniiaes.ru
 Sergei L. Soloviev, Professor, Scientific Adviser, Dr. Sci. (Engineering),
 E-mail: slsoloviev@vniiaes.ru
 Quang Huong Duong, Postgraduate student,
 E-mail: duonghuongnd1991@gmail.com