

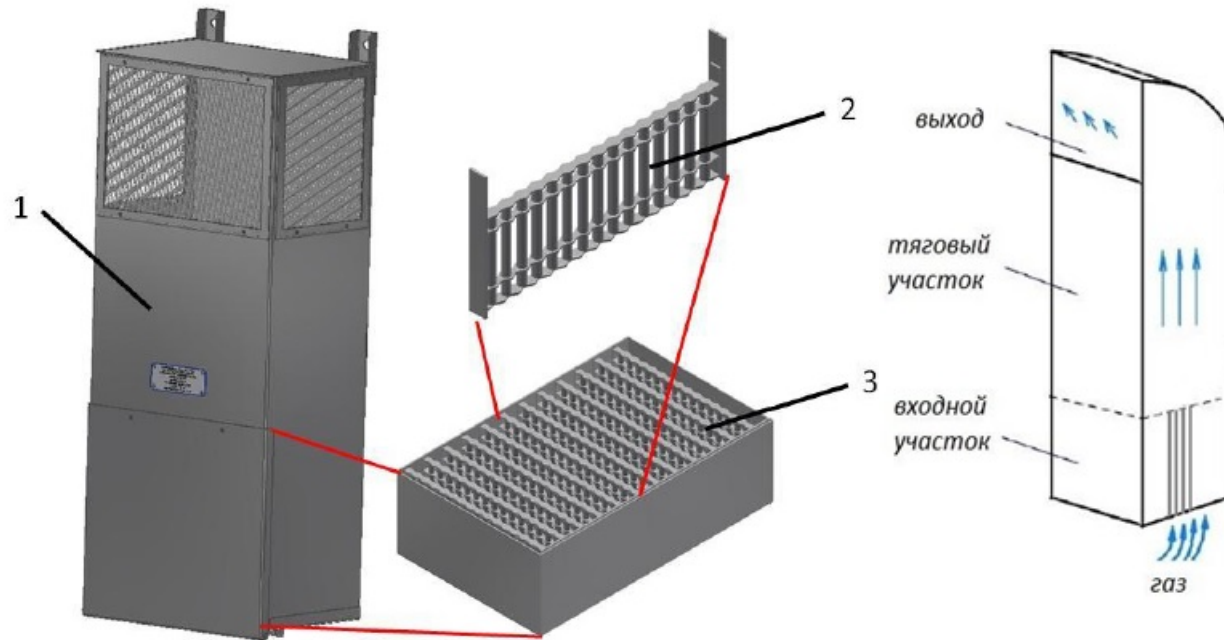


Моделирование работы пассивного каталитического рекомбинатора водорода РВК-500 в комплексных экспериментах с помощью кода САВАРЕТ-SC1

Готов В.Ю., Канаев А.А., Кондаков В.Г.

Принцип работы ПКРВ

Внешний вид ПКРВ производства ИНПК «РЭТ» (РВК-500)*

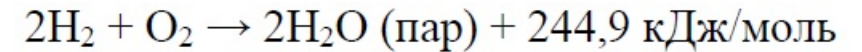


- 1 – корпус ПКРВ
- 2 – цилиндрический каталитический элемент
- 3 – каталитический блок

(*) - Сборник «2016 год: результаты научно-технической деятельности ВНИИАЭС»

Физико-химические основы рекомбинации водорода*

Экзотермической реакция окисления водорода:



Детальный механизм окисления H_2 на кат. поверхности:

Реакции гетерогенного механизма окисления водорода

Тип реакции	Формула протекания реакции
Адсорбционные реакции	1. $\text{H}_2 + 2\text{Pt}(\text{s}) \rightarrow 2\text{H}(\text{s})$ 2. $\text{O}_2 + 2\text{Pt}(\text{s}) \rightarrow 2\text{O}(\text{s})$ 3. $\text{H}_2\text{O} + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s})$ 4. $\text{OH} + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{OH}(\text{s})$
Поверхностные реакции	5. $\text{H}(\text{s}) + \text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{OH}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s})$ 6. $\text{OH}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{H}(\text{s}) + \text{O}(\text{s})$ 7. $\text{H}(\text{s}) + \text{OH}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s})$ 8. $\text{H}_2\text{O}(\text{s}) + \text{Pt}(\text{s}) \rightarrow \text{H}(\text{s}) + \text{OH}(\text{s})$ 9. $\text{OH}(\text{s}) + \text{OH}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{s}) + \text{O}(\text{s})$ 10. $\text{H}_2\text{O}(\text{s}) + \text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{OH}(\text{s}) + \text{OH}(\text{s})$
Десорбционные реакции	11. $2\text{H}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2 + 2\text{Pt}(\text{s})$ 12. $2\text{H}(\text{s}) \rightarrow \text{O}_2 + 2\text{Pt}(\text{s})$ 13. $\text{H}_2\text{O}(\text{s}) \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{Pt}(\text{s})$ 14. $\text{OH}(\text{s}) \rightarrow \text{OH} + \text{Pt}(\text{s})$

Одностадийная химическая кинетика окисления H_2 :

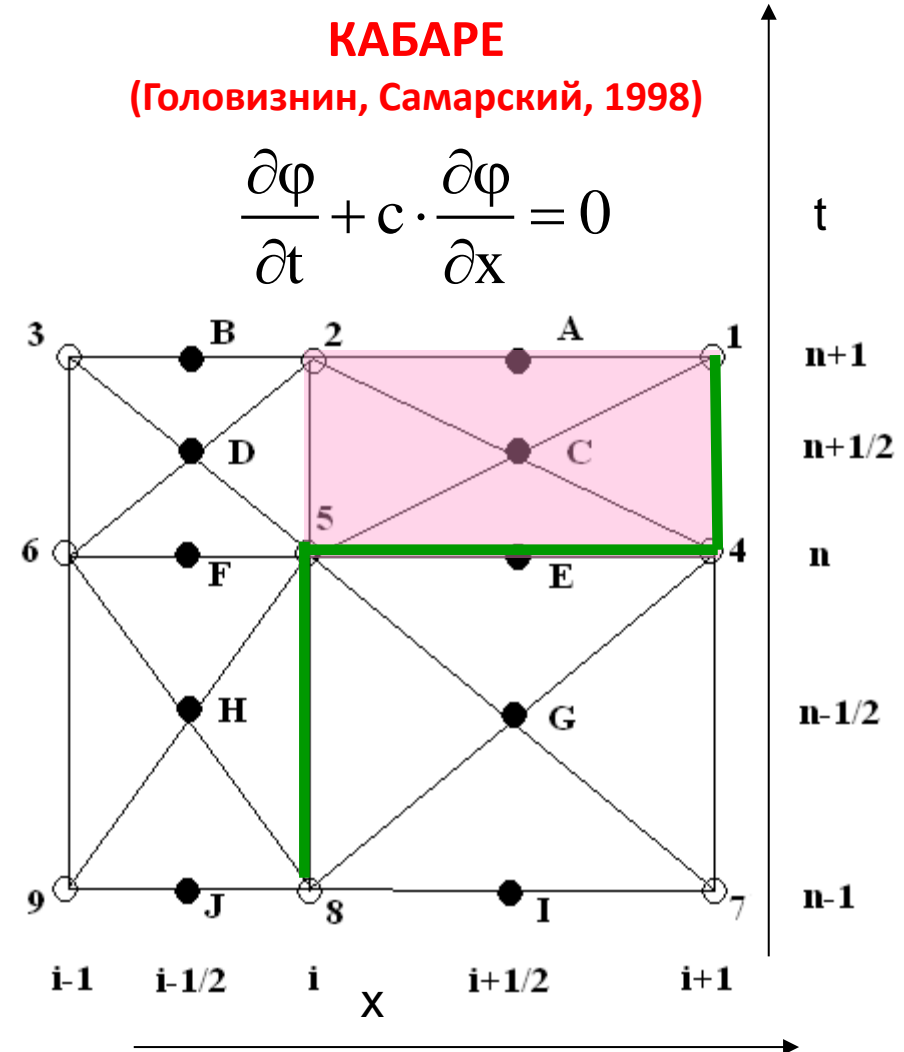
$$r_{shef} \left[\frac{\text{кмоль}}{\text{м}^2 \text{с}} \right] = 14 \cdot C_{\text{H}_2} \cdot \exp \left(\frac{-16.1 \cdot 10^6}{RT} \right) \quad - \quad \text{модель Шеффера}$$

Код CABARET-SC1

- ✓ В ИБРАЭ РАН для проведения численного анализа задач ВБ разрабатывается CFD-код CABARET-SC1. Аппроксимация уравнений в коде CABARET-SC1 основана на методике КАБАРЕ, позволяющей проводить расчеты турбулентных течений в **вихреразрешающем приближении** на сетках с неполным разрешением масштабов турбулентности **без использования настроечных параметров**. Уменьшение неопределенностей при моделировании турбулентности приводит к увеличению прогнозных возможностей кода в части распространения ВГС.
- ✓ Анализ подходов к моделированию ПКРВ показал, что для **прямого численного моделирования с учетом хим. кинетики** на поверхности каталитических элементов необходимо использовать ячейки с размером порядка долей миллиметра. Размер сеточной модели ПКРВ будет достигать более 100 млн. ячеек. Применение такого подхода в расчетах 3D и в комплексных крупномасштабных экспериментах практически невозможно (с учетом доступных вычислительных ресурсов).
- ✓ Для моделирования работы **ПКРВ РВК-500** в комплексных крупномасштабных экспериментах с помощью кода CABARET-SC1 разработана **упрощенная CFD-модель ПКРВ**, позволяющая проводить расчеты на грубых сетках.

КАБАРЕ
(Головизнин, Самарский, 1998)

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + c \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0$$

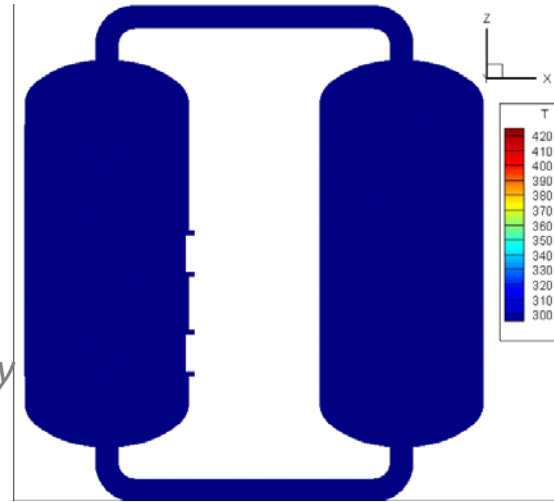
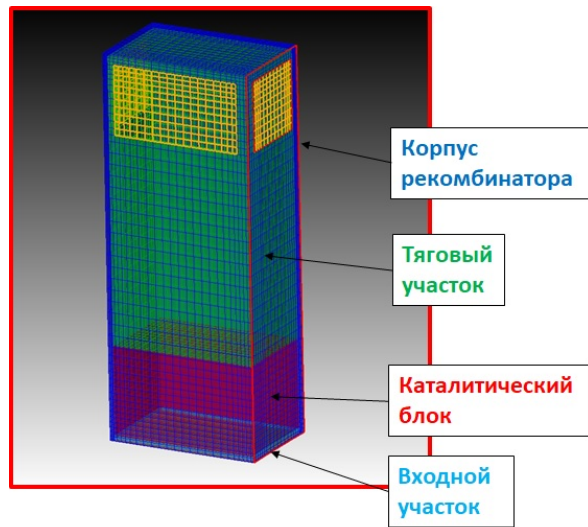


CFD-модель ПКРВ

Поток газа через ПКРВ моделируется явно с использованием модели пористой среды в области каталитического блока

*10-30 тыс. ячеек на ПКРВ
1-5 млн. ячеек на установку*

Геометрическая модель ПКРВ РВК-500



Эффективные свойства материала корпуса

$$\alpha = \kappa / \Delta = const$$

$$m \sim \rho \cdot \Delta = const$$

$$E \sim \rho \cdot C \cdot \Delta = const$$

$$\kappa_2 = \Delta_2 / \Delta_1 \cdot \kappa_1$$

$$\rho_2 = \Delta_1 / \Delta_2 \cdot \rho_1$$

$$C_2 = C_1$$

Для моделирования теплогидравлики применяется подход пористой среды

Потери импульса при протекании газа через ПКРВ учитываются путем введения в исходное уравнение Навье–Стокса стока импульса

$$\vec{S}_{\rho u} = -\mathbf{F}\vec{u}$$

Тепло, выделяющееся при рекомбинации водорода, определяется через производительность рекомбинатора

$$S_E = \dot{r}_{H_2} \Delta H / V_{cat.bl.}$$

Через производительность рекомбинатора вычисляются объемные источники/стоки массы компонент смеси в каталитическом блоке

$$S_{H_2} = -r_{H_2} / V_{cat.bl.}$$

$$S_{O_2} = 0.5 \cdot S_{H_2} \cdot M_{O_2} / M_{H_2}$$

$$S_{H_2O} = -S_{H_2} \cdot M_{H_2O} / M_{H_2}$$

$$S_{N_2} = 0$$

Моделирование теплообмена с кат. стержнями

Для учета теплообмена с кат. стержнями вводится дополнительная переменная T_r , характеризующая **среднюю температуру стержней**. Изменение средней температуры стержней каталитического блока описывается дифференциальным уравнением:

$$m_r \frac{d}{dt} \left(\int_{T_{r.ref}}^{T_r} C_r(T) dT \right) = Q_{heat} - Q_{conv} - Q_{rad}$$

$$Q_{heat} = \dot{r}_{H_2} \Delta H$$

- тепловыделение реакции

$$Q_{conv} = h_r A_{\Sigma} \cdot (T_r - T_{gas})$$

- конвективный тепловой поток

$$Q_{rad} = \varepsilon \cdot A_{cat.bl.} \cdot (T_r^4 - T_{box}^4)$$

- тепловой поток от излучения

Режимы конвекции

Свободная

$$Nu_{free} = Nu_{free} (Ra, Pr)$$

Вынужденная

$$Nu_{force} = Nu_{force} (Re, Pr)$$

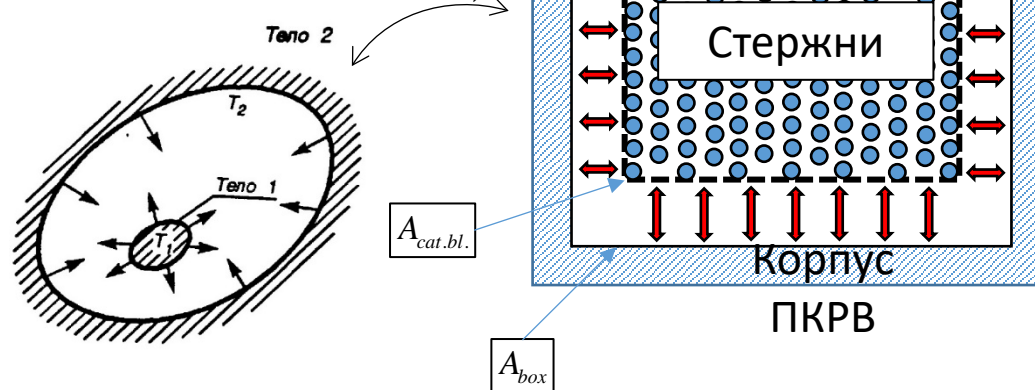
Смешанная

$$h_r = (h_{r,free}^n + h_{r,force}^n)^{1/n}$$

Приведенная степень черноты

для замкнутой системы из двух серых тел находится по формуле

$$\varepsilon = \left(1 + (1/\varepsilon_{cat} - 1) + (1/\varepsilon_{box} - 1) A_{cat.bl.}/A_{box} \right)^{-1}$$



**Объемный источник
тепла в газе**

$$S_E = Q_{conv} / V_{cat.bl.}$$

**Объемный источник
тепла в корпусе
ПКРВ**

$$S_{E,box} = Q_{rad} / V_{cat.bl.}$$

Эмпирическая модель производительности ПКРВ-РВК-500

В модели используется эмпирическая зависимость производительности рекомбинаторов РВК-500, -1000 от объемной доли водорода, давления и температуры газа на входе, построенная по экспериментам на стенде ОАО «ВТИ» [1]:

$$R_{H_2} = n \cdot 10^{-3} x \left[a_0(p, T_c) + a_1(p, T_c)(x - 2) + a_2(p, T_c)(x - 2)^2 \right]$$

R_{H_2} – масса реагирующего в 1 с водорода, г

x – мольная доля водорода на входе в рекомбинатор, %

T_c – температура газа на входе

p – давление, 10^5 Па

$n = 7,7$ – для РВК-500

$n = 18,3$ – для РВК-1000

$$a_0(p, T_c) = 1,43 + 0,24(p - 1) + 0,005(T_c - 20),$$

$$a_1(p, T_c) = 0,12 + 0,031(p - 1) + 3,0 \cdot 10^{-4}(T_c - 20),$$

$$a_2(p, T_c) = 0,009(p - 1) + 1,08 \cdot 10^{-4}(T_c - 20) - 1,54 \cdot 10^{-5}(p - 1)(T_c - 20).$$

Формула производительности справедлива для концентраций водорода $x > 2$, при $0,1 < x < 2$

$$R(x) = R(2)(x - 0,1) / 1,9.$$

[1] РАЗРАБОТКА И ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ РЕКОМБИНАТОРОВ РВК-500, -1000 ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАЩИТНОЙ ОБОЛОЧКИ АЭС С ВВЭР МЕТОДАМИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

О. В. Тарасов, А. Е. Киселев, А. С. Филиппов, Т. А. Юдина, Д. Г. Григорук, Д. Е. Кошманов, В. Д. Келлер, Е. Б. Христенко
Атомная Энергия, Том 121, № 3 (2016)

Диффузионная модель производительности ПКРВ РВК-500

Второй подход основан на применении **диффузионной модели** рекомбинации водорода (**mass transfer approach**), используемой, например, в модели REKO-DIRECT. В данной модели предполагается, что скорость химических реакций на поверхности катализатора значительно превышает скорость диффузии компонент смеси из объема к катализатору.

$$\begin{aligned}
 J_{H_2} \left[\frac{\text{моль}}{\text{м}^2 \text{с}} \right] &= \beta \left[\frac{\text{м}}{\text{с}} \right] \cdot \Delta C_{H_2} \left[\frac{\text{моль}}{\text{м}^3} \right] & \longrightarrow & \quad \dot{r}_{H_2} \left[\frac{\text{кг}}{\text{с}} \right] = j_{H_2} \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^2 \text{с}} \right] \cdot S_{cat} \left[\text{м}^2 \right] \\
 j_{H_2} \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^2 \text{с}} \right] &= \rho \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right] \cdot \beta \left[\frac{\text{м}}{\text{с}} \right] \cdot \Delta \xi_{H_2}
 \end{aligned}$$

β – коэффициент массоотдачи, м/с

$\Delta C_{H_2} = C_{H_2, bulk} - C_{H_2, wall}$ – разность концентраций водорода в объеме потока и на поверхности катализатора

Коэффициент массоотдачи может быть рассчитан на основе аналогии между процессами теплообмена и массообмена

$$j = -\rho D \frac{\partial C}{\partial y} \leftrightarrow q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \quad \longrightarrow$$

теплоотдача: $Nu = \frac{h \cdot d}{\lambda} = f(Re, Pr); \quad Pr = \frac{\nu}{(\lambda / \rho c_v)}$

массоотдача: $Sh = \frac{\beta \cdot d}{D} = f(Re, Sc); \quad Sc = \frac{\nu}{D}$

Гидравлические потери в каталитическом блоке

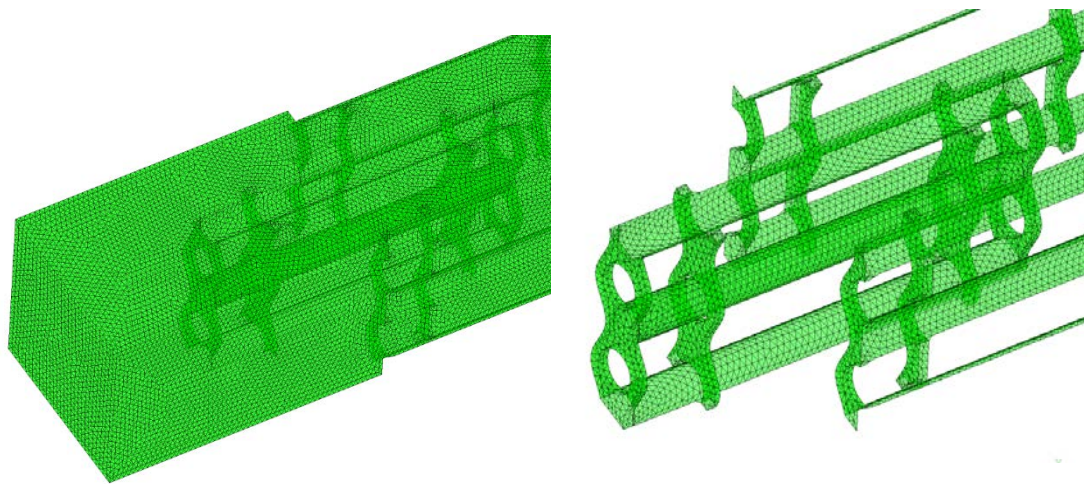
В статье [1] потери импульса при протекании газа через рекомбинатор (на длине тягового участка, входных/выходных сетках, стержнях каталитического блока) учитываются путем введения в исходное уравнение Навье–Стокса стока импульса в области расположения катализаторов

$$S_{\rho u} = K_p u^{1,73} \mathbf{u} / u,$$

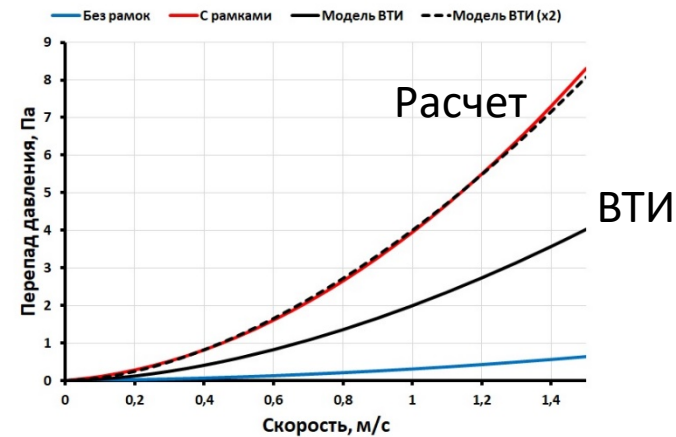
где $K_p = 2 / h,$

h – высота каталитического блока в сеточной геометрии.

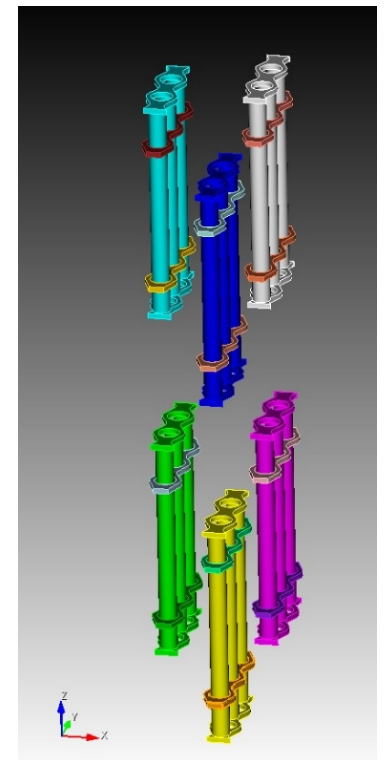
Расчет гидравлического сопротивления, образованного стержнями каталитического блока



Сеточная модель канала с учетом рамок



Сравнение расчета с моделью ВТИ



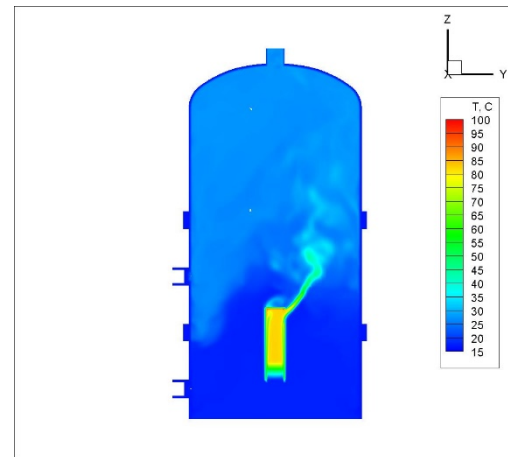
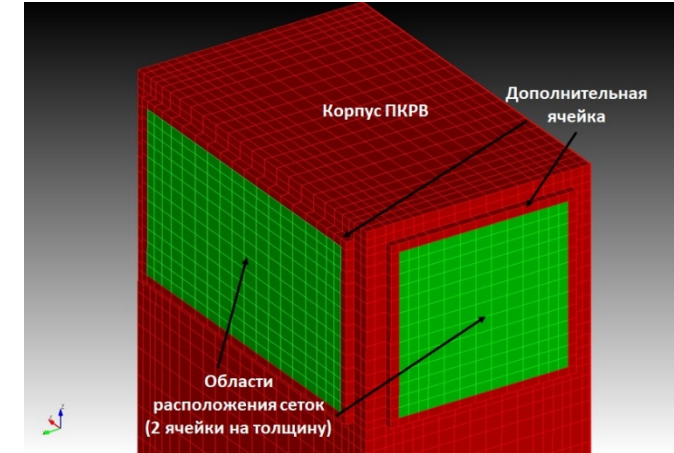
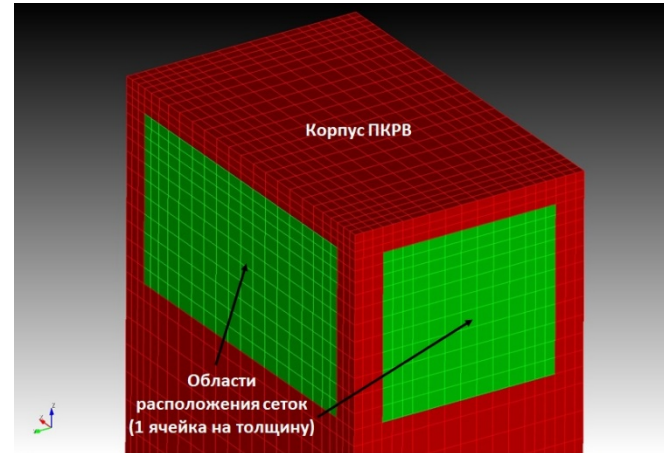
Геометрия стержней с рамками

Моделирование сеток на входе и выходных окнах ПКРВ

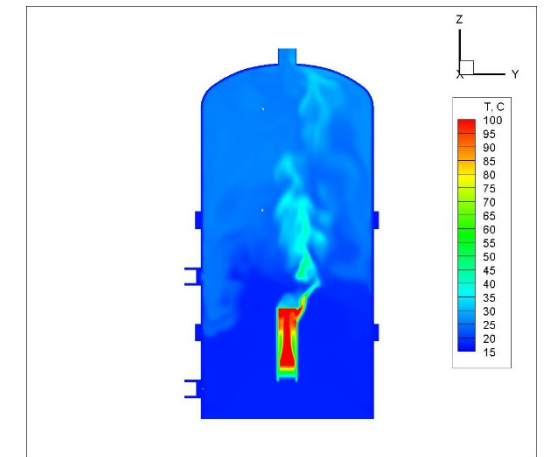
Сетки моделировались в приближении пористой среды. В области сеток вводится объемная сила трения для нормальной составляющей скорости и обнуляются касательные компоненты скорости

$$\begin{cases} f_n = \frac{\partial P}{\partial n} = -\frac{\rho}{\Delta} (P_i |u| + P_v) u_n \\ u_{\tau_1} = u_{\tau_2} = 0 \end{cases}$$

Дополнительное гидравлическое сопротивление сеток снижает среднюю скорость потока газа через ПКРВ и увеличивает его температуру. Изменяется режим течения выходного потока от струйного к шлейфовому.



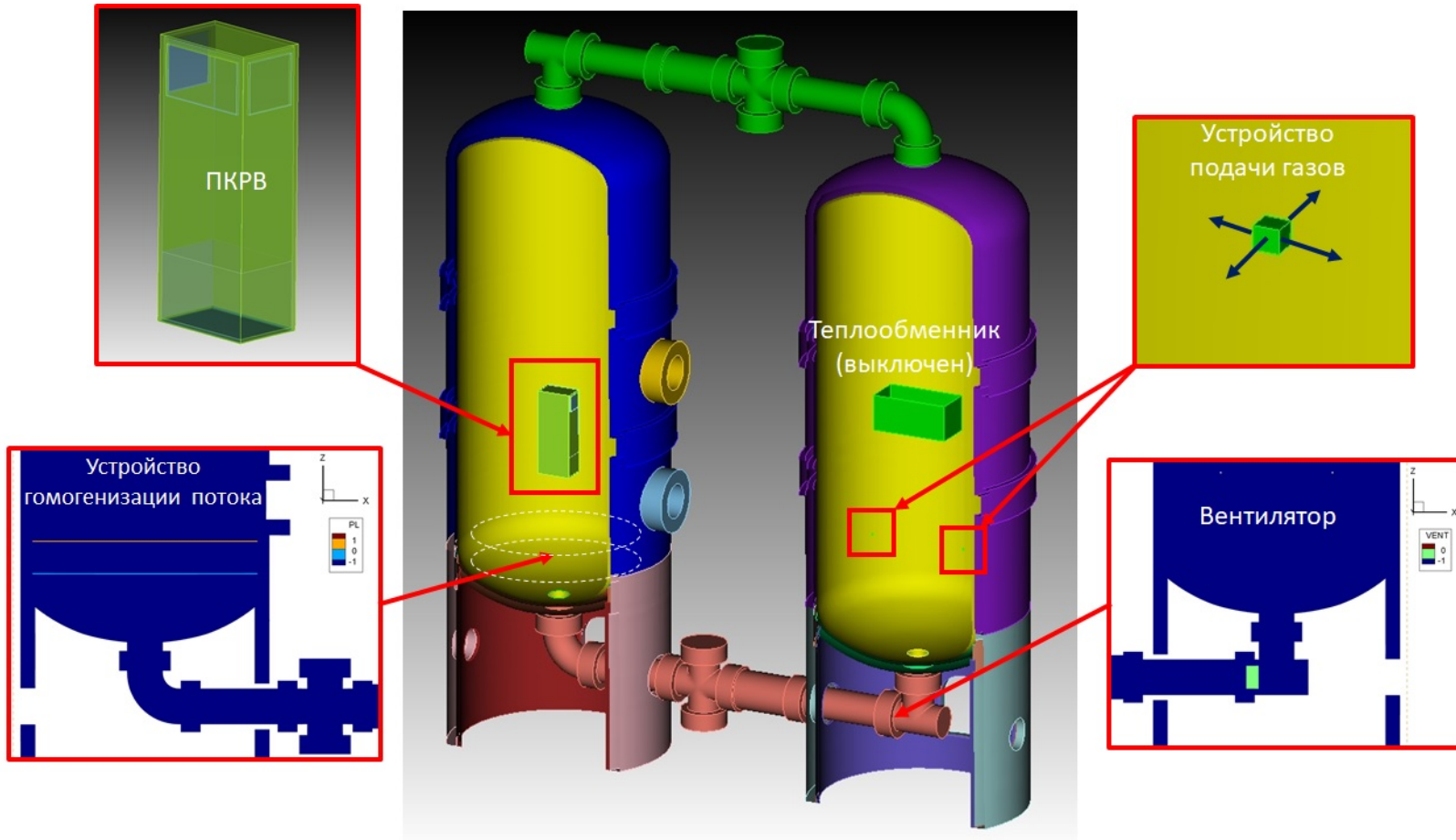
Без учета сеток. Режим – «струя»



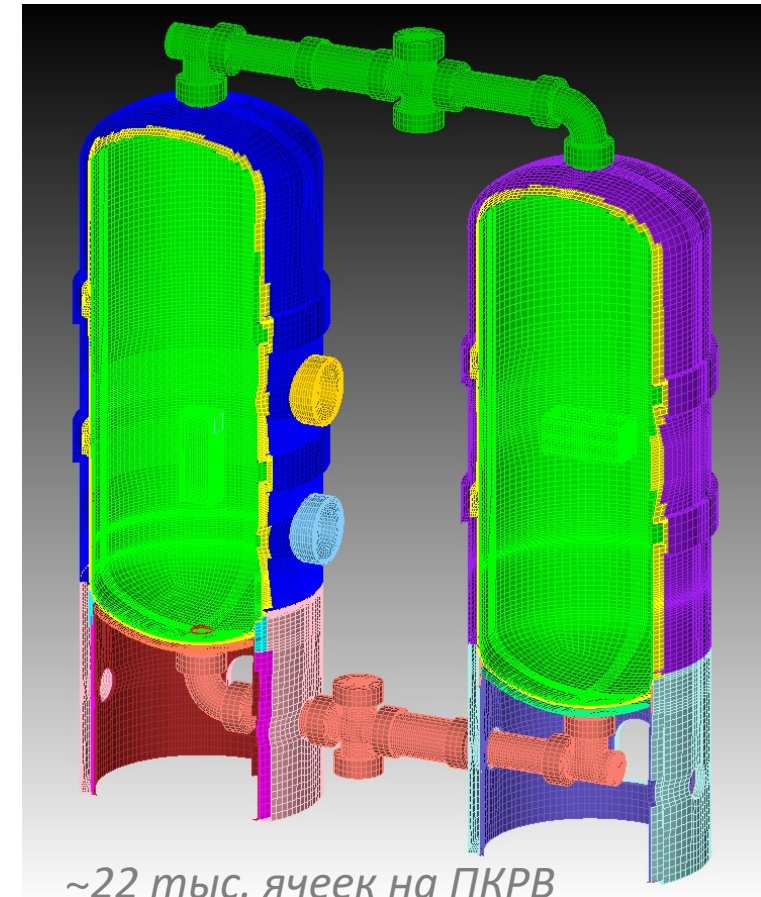
С сетками. Режим – «шлейф»

Расчетная модель установки БМ-П (РФЯЦ-ВНИИТФ)

Геометрия



Сетка

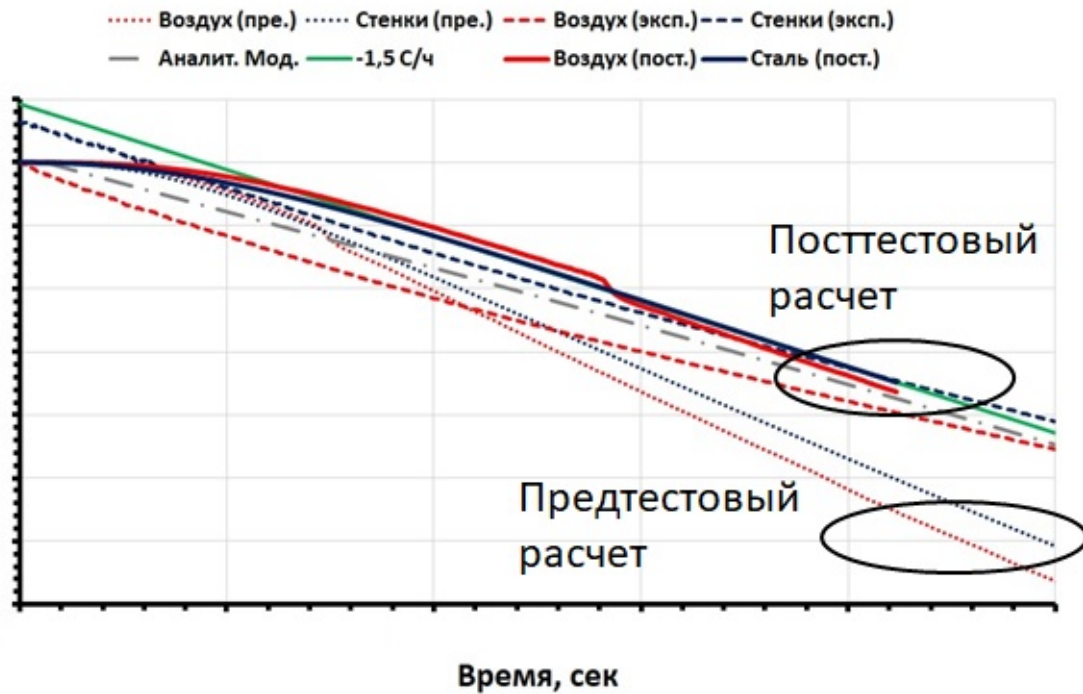


~22 тыс. ячеек на ПКРВ
~2млн. ячеек на установку

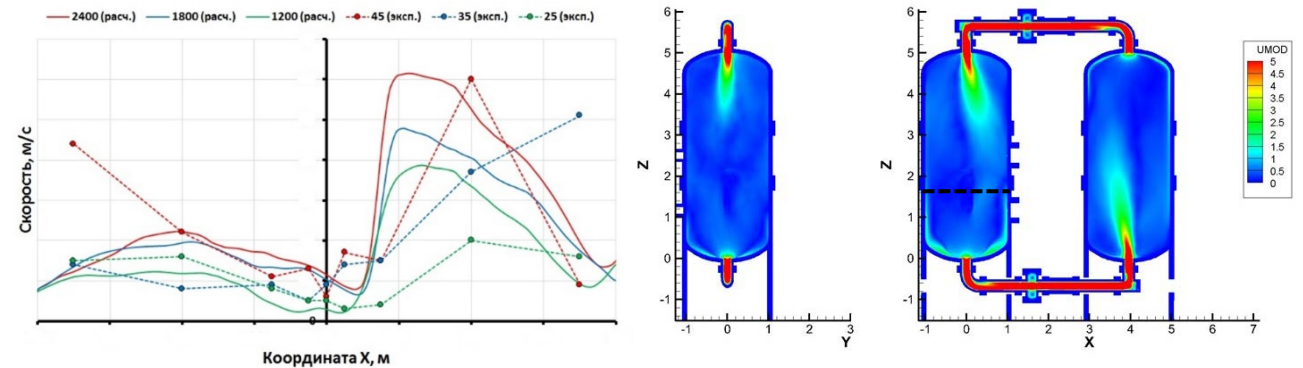
Расчетное обоснование методик испытаний ПКРВ (Этапы 1-4, 2020-2021г)

Цель: разработка модели установки БМ-П, разработка моделей устройств, расчетное сопровождение пилотных экспериментов на установке БМ-П

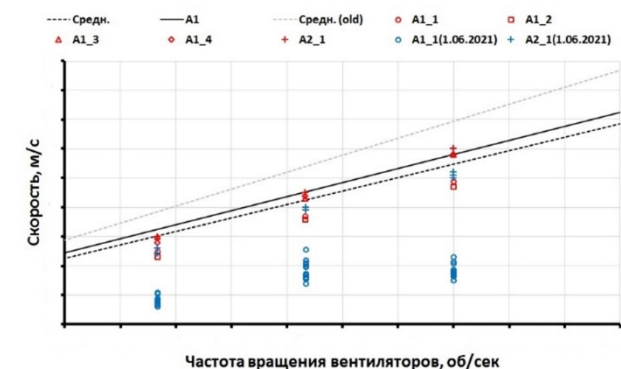
1. Тепловые потери установки БМП



2. Верификация модели вентиляторов



Профиль скорости в первой камере

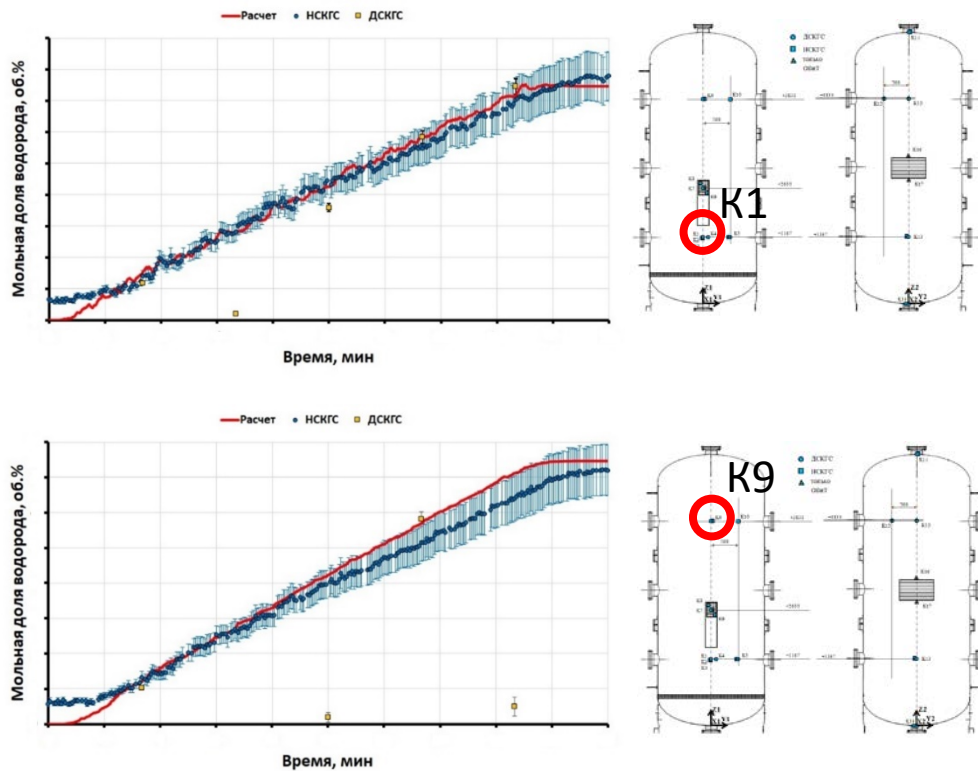


Скорость газа в трубопроводах

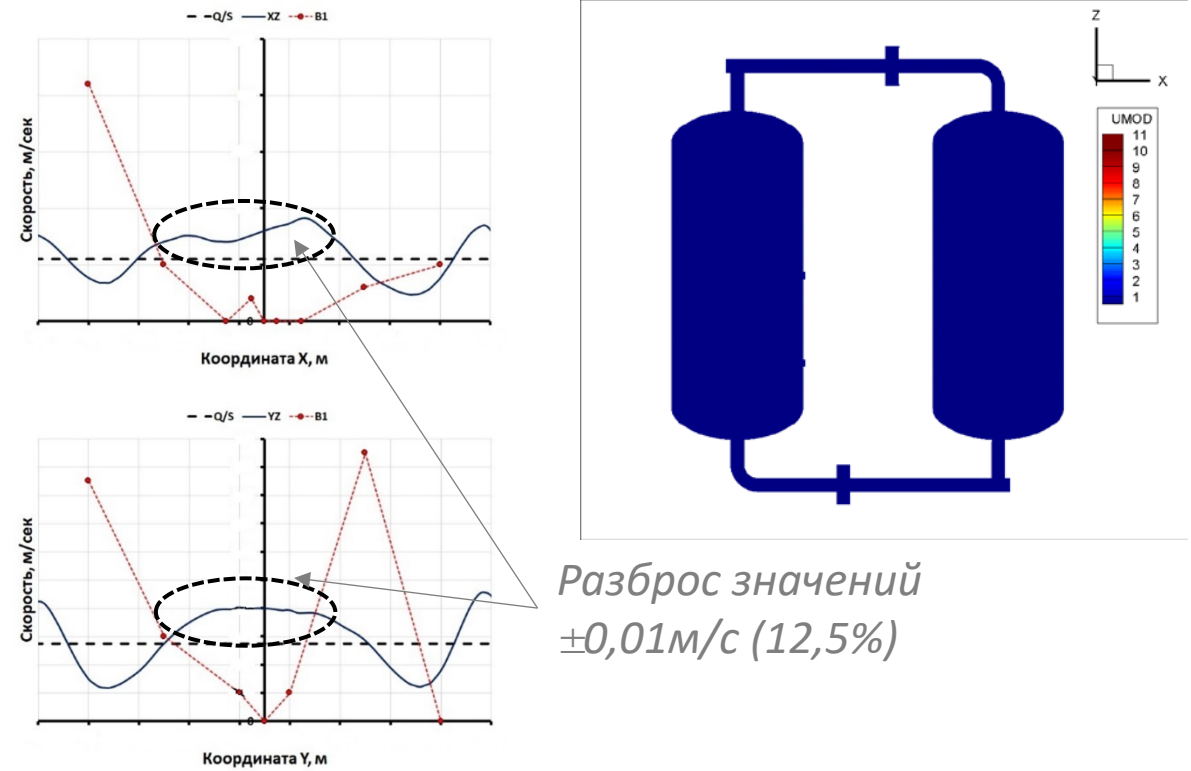
Расчетное обоснование методик испытаний ПКРВ (Этапы 1-4, 2020-2021г)

Цель: разработка модели установки БМ-П, разработка моделей устройств, расчетное сопровождение пилотных экспериментов на установке БМ-П

3. Устройство подачи газов



4. Устройство распределения потоков



Расчетный анализ экспериментов на установке БМ-П в интересах испытаний пассивных каталитических рекомбинаторов водорода (Этапы 5-6, 2022)

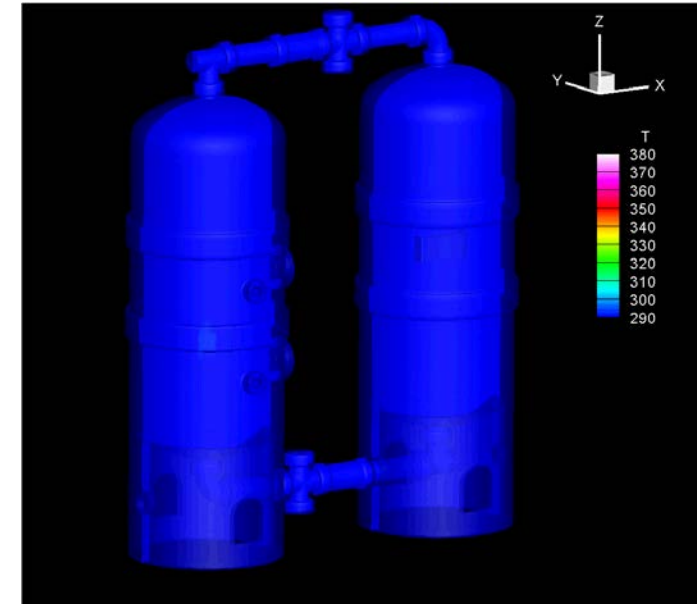
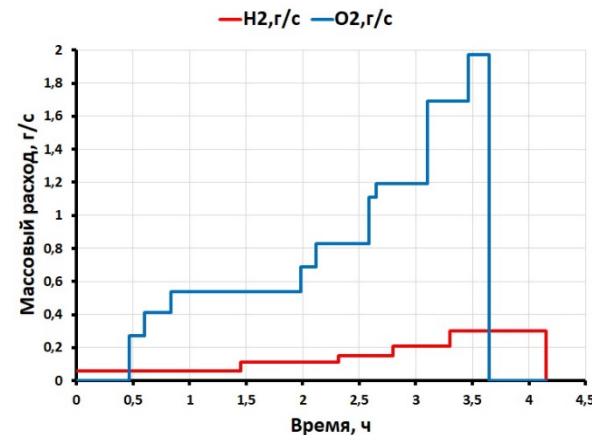
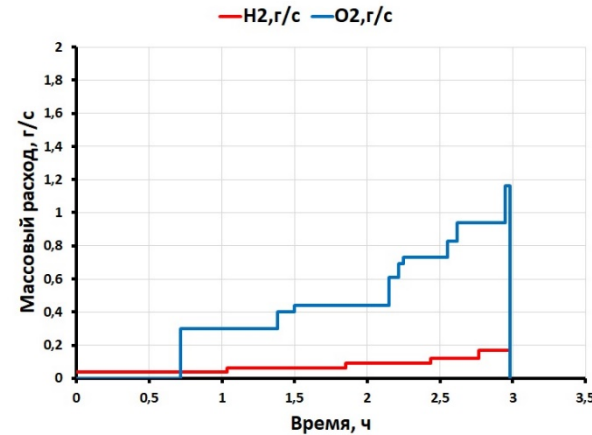
Цель: разработка и верификация модели ПКРВ РВК-500, расчетное сопровождение экспериментов с ПКРВ на установке БМ-П

Таблица 4-1 – Начальные условия проведения испытания 3.1

Параметр, единица измерения	Значение
Давление в окружающей среде, кПа	96,6±0,2
Окружающая температура, °С	17,0±0,8
Давление в установке, кПа	100,0±0,6
Температура в установке, °С	от 16 до 18
Объемная доля водяного пара в установке, %	2

Таблица 4-3 – Начальные условия проведения испытания 3.2

Параметр, единицы измерения	Значение
Давление в окружающей среде, кПа	96,4±0,2
Окружающая температура, °С	11,0±0,8
Давление в установке, кПа	228,4±0,6
Температура в установке, °С	от 99 до 107
Объемная доля водяного пара в установке, %	44



Скорость рекомбинации водорода в ПКРВ (эксперимент 3.1)

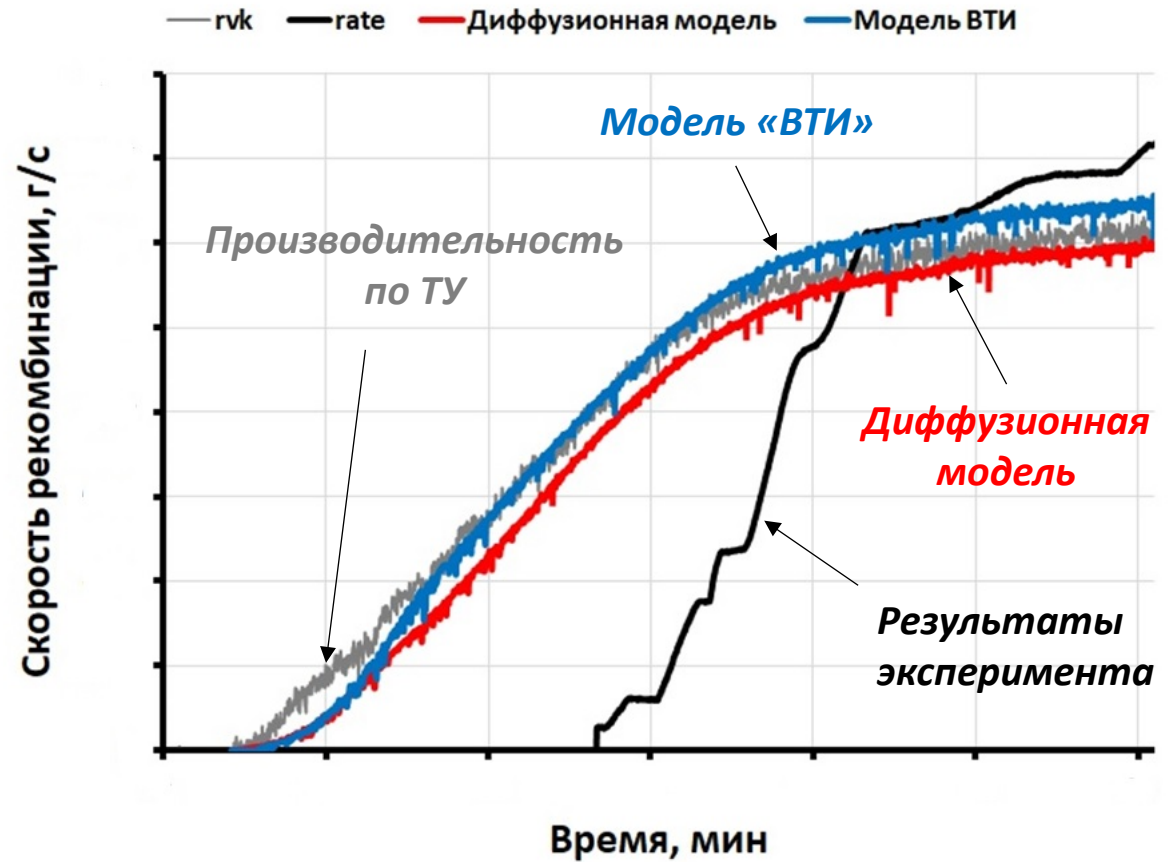
1. Обе модели дают близкие результаты → **Диффузионный подход позволяет адекватно описывать работу ПКРВ.** В дальнейшем, можно уточнять корреляции для коэффициентов массоотдачи при смешанной конвекции газа $Sh=Sh(Re, Sc)$
2. Обе модели дают **хорошее соответствие** с экспериментом **по скорости рекомбинации** после установления.
3. Обе модели **не воспроизводят старт ПКРВ.** В модели «ВТИ» пороговое значение по концентрации водорода составляет 0,1%. Тогда как в эксперименте - 1,25%. → Эмпирическая корреляция описывает только **установившиеся** режимы работы ПКРВ.
4. В диффузионной модели отсутствует пороговое значение. Диффузия определяет скорость рекомбинации только после нагрева катализатора

$$J_{H_2} = \beta \cdot (C_{H_2,bulk} - C_{H_2,wall}), \quad C_{H_2,wall} = 0$$

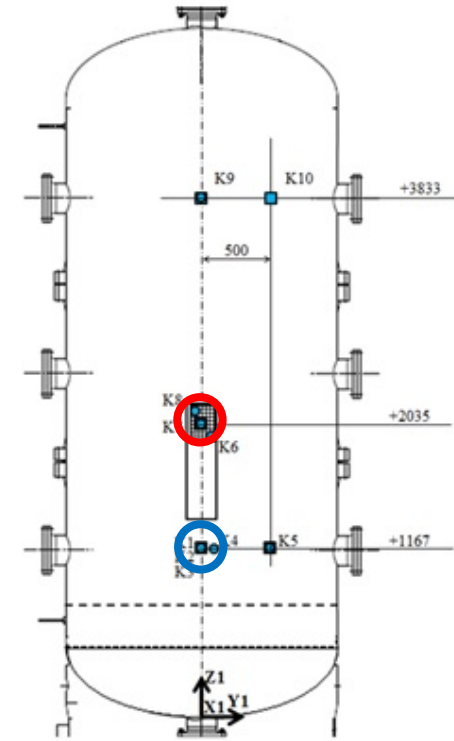
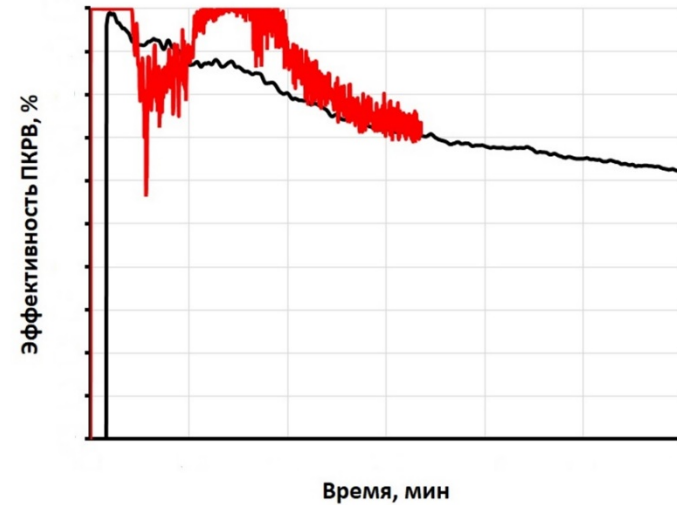
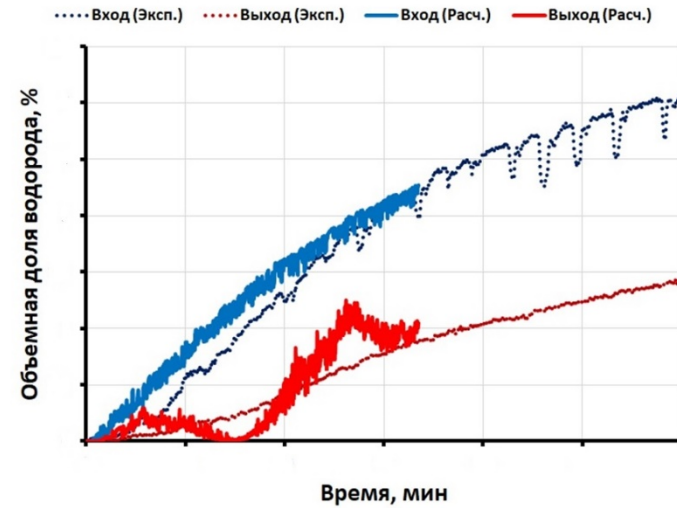
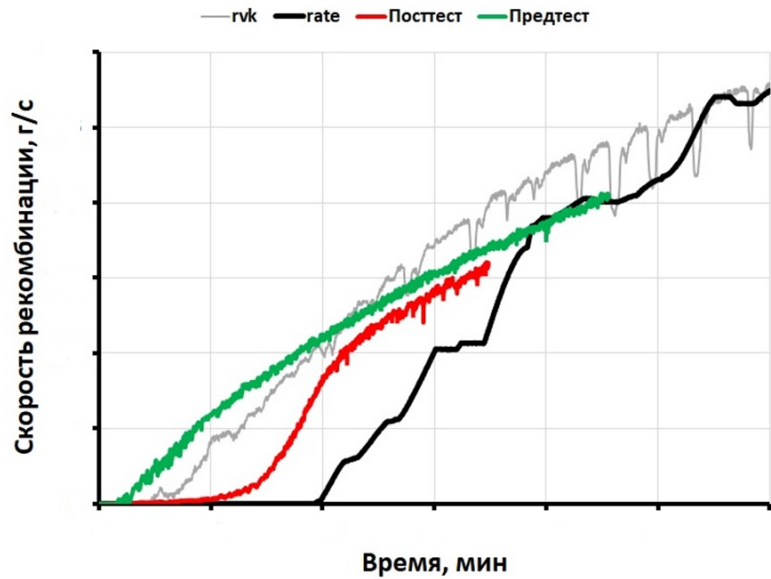
$$\beta \cdot (C_{H_2,bulk} - C_{H_2,wall}) = A \cdot C_{H_2,wall} \cdot \exp(-T_a/T)$$

$$C_{H_2,wall} = \frac{1}{1 + A/\beta \cdot \exp(-T_a/T)} \cdot C_{H_2,bulk}$$

$$C_{H_2,wall} \rightarrow \begin{cases} 0, & T \gg T_a \\ C_{H_2,bulk}, & T \ll T_a \end{cases}$$

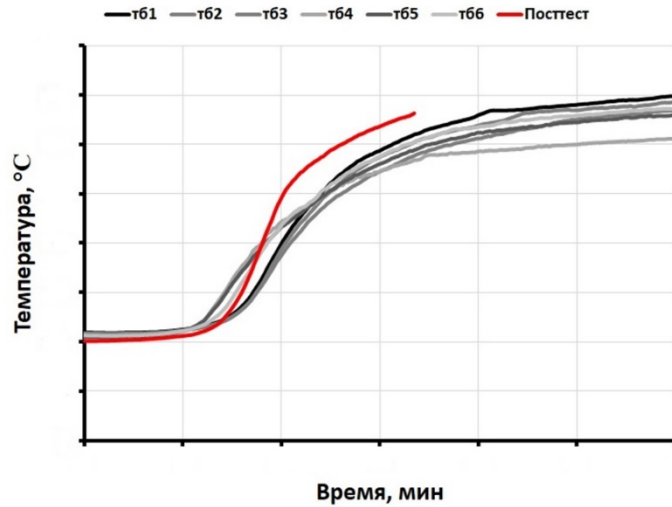


Основные результаты работы ПКРВ (эксперимент 3.2)



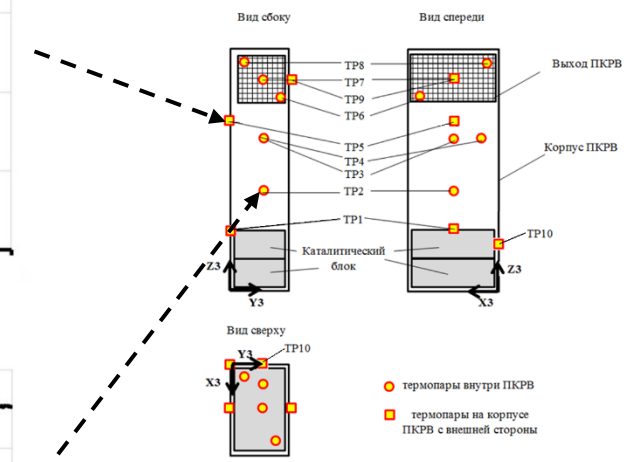
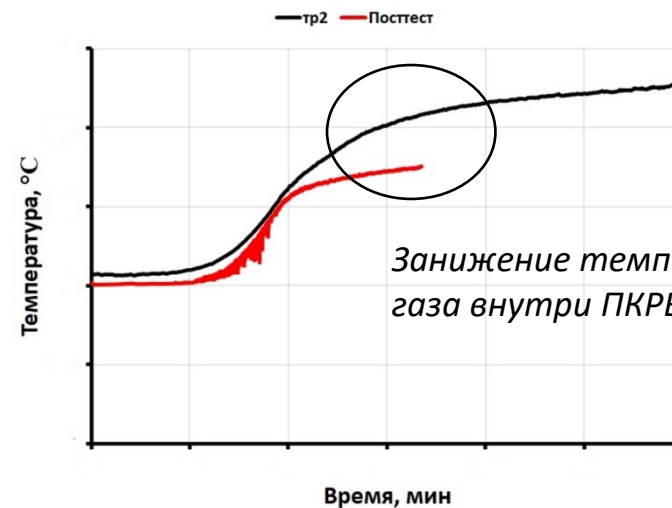
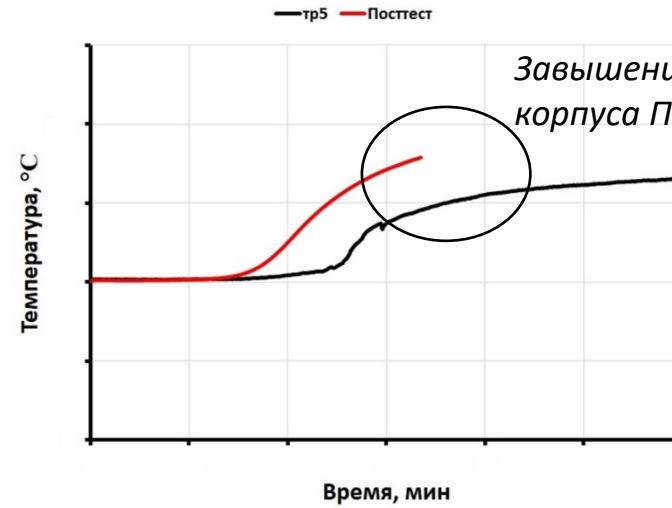
Моделирование сеток на окнах ПКРВ, позволило приблизится к эксперименту по эффективности улавливания водорода. Требуется уточнение коэффициентов гидравлических потерь на сетках.

Основные результаты работы ПКРВ (эксперимент 3.2)



Средняя температура каталитических стержней

1. В расчетах наблюдается хорошее совпадение с экспериментом по температуре каталитических стержней.
2. Вместе с этим наблюдается систематическое завышение температуры корпуса ПКРВ и занижение температуры газа внутри ПКРВ.
3. Требуется усовершенствование модели переноса тепла излучением.





Выводы:

Модель ПКРВ РВК-500, разработанная для проведения расчетов в вихреразрешающем приближении с помощью методики КАБАРЕ, позволяет адекватно моделировать работу ПКРВ при использовании грубых сеточных моделей, причем ряд важных характеристик работы ПКРВ (производительность ПКРВ, температура каталитических стержней) воспроизводятся достаточно точно. Вместе с этим, требуется дальнейшее усовершенствование модели ПКРВ РВК-500 по направлениям:

- ✓ доработка модели для описания старта ПКРВ;
- ✓ доработка и верификации модели решеток на входе и выходных окнах ПКРВ на данных специально поставленных экспериментов;
- ✓ усовершенствование модели теплообмена излучением внутри ПКРВ;
- ✓ обобщение модели на случаи кислородного голодания и присутствия СО.

В экспериментах, специальных и комплексных, входящих в верификационную базу данных, требуется детальное измерение полей скорости, температуры и концентрации на входе и выходных окнах ПКРВ, также важна повторяемость результатов по концентрационным пределам запуска ПКРВ.

Спасибо за внимание!