

# A numerical study of hydrogen combustion and natural convection inside vertical plate-type catalyst

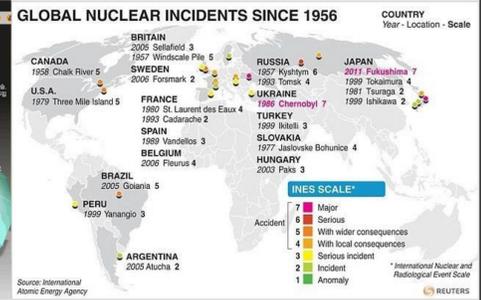
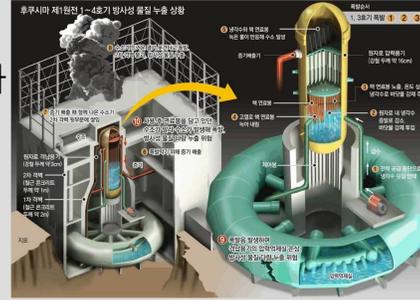
김대현<sup>1</sup>, 나영수<sup>2</sup>, 오동욱<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>조선대학교 공과대학 기계공학과  
<sup>2</sup>한국원자력연구원 지능형사고대응연구부  
\* dwoh@chosun.ac.kr

## 1. 서론

### ● 피동촉매 재결합기 (Passive autocatalytic recombiner, PAR)

- PAR는 외부 전원의 공급 없이, 촉매를 사용하여 가연한계 범위 이내에서 수소와 산소의 재결합으로 **수소 농도를 저감하여 원자력 발전소의 수소 폭발을 방지**
- 원자력 발전소에서 중대사고 발생 시, 연료봉의 피복재인 지르칼로이가 고온의 수증기와 반응하여 다량의 수소 발생 및 격납 건물 내부에 축적됨
- 수소는 매우 낮은 농도에서 적은 에너지만으로도 발화 될 수 있으므로, 수소 폭발에 의한 격납 건물 붕괴와 방사능 누출을 방지하기 위해 **수소 저감 필요**
- PAR 하부에서 수소의 부력과 질량확산에 의한 자연대류 및 수소-공기 혼합물의 유입속도 정량화와 촉매반응에 의한 유속, 온도 및 수소 농도 분포 분석

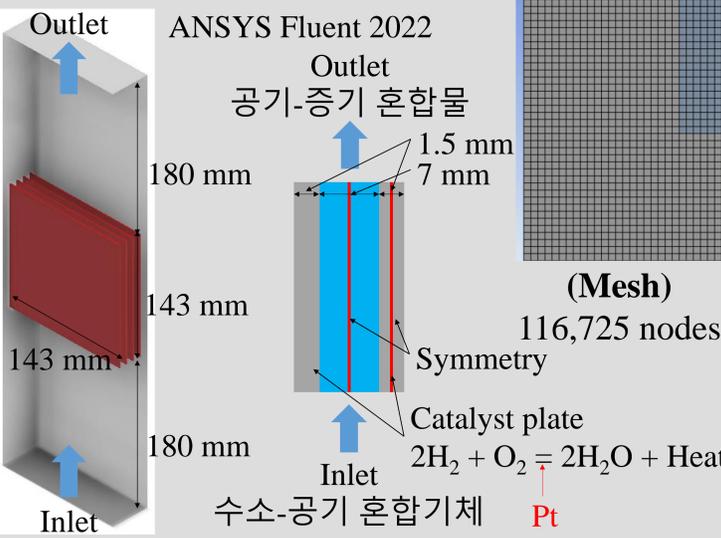


원자력 발전소 수소 폭발 과정 (출처 : 동아사이언스)

세계 원자력 발전소 사고 (출처 : International Atomic Energy Agency)

## 2. 수치해석 방법

### ● 경계조건



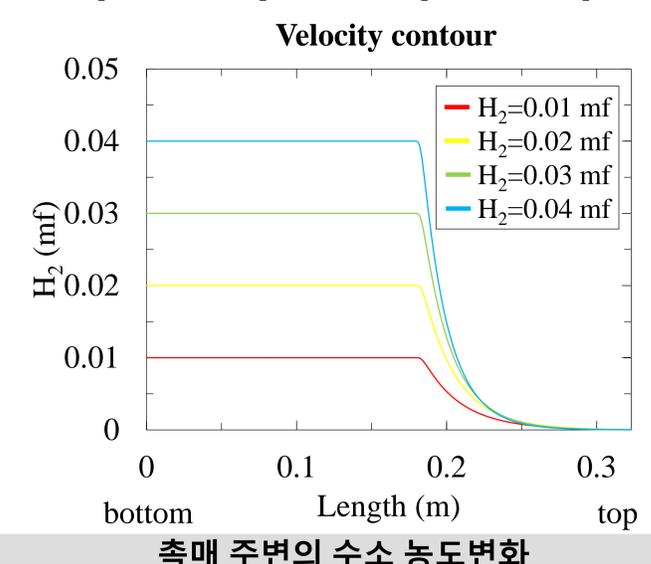
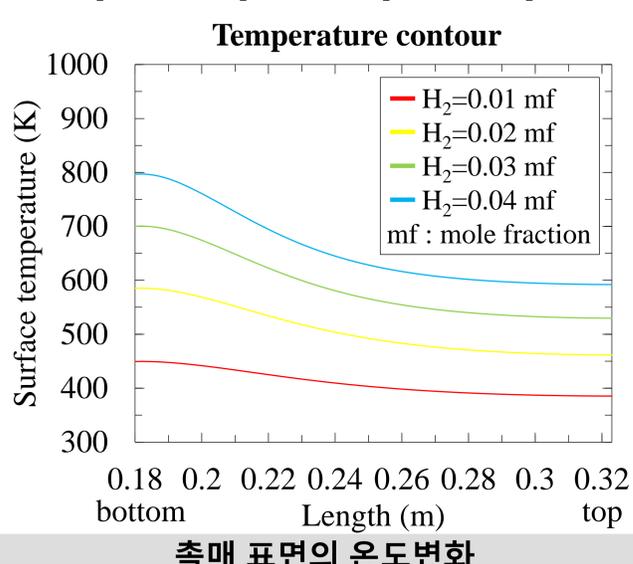
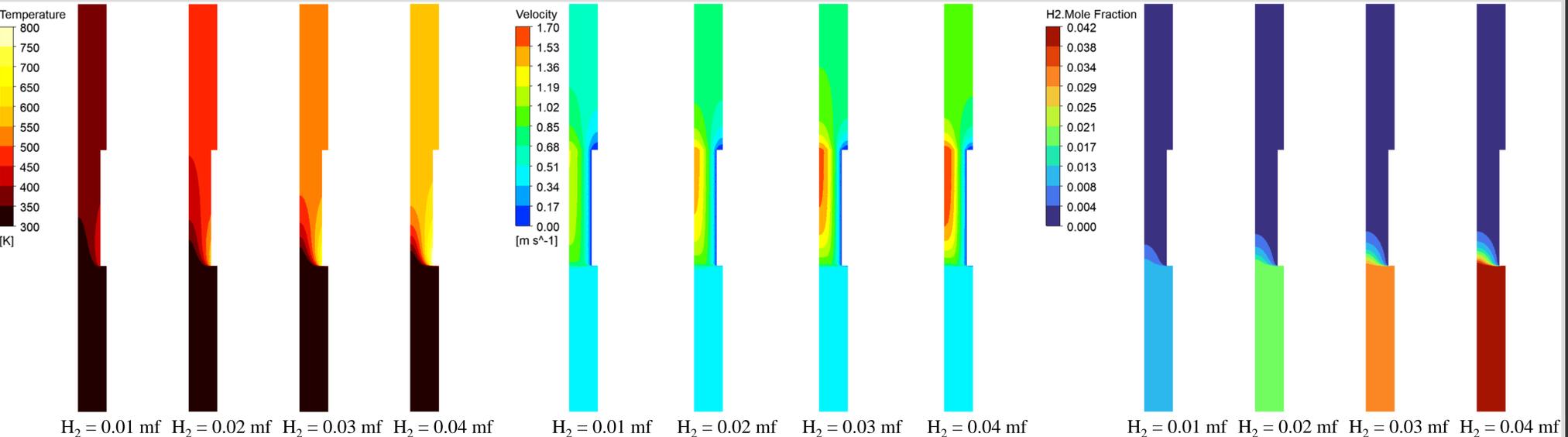
- PAR는 수소-공기 혼합기체가 하단에서 부력과 질량확산에 의해 유입됨
- 평판의 표면은 Pt로 코팅되어 수소와 산소의 재결합 반응을 촉진 및 수증기로 변화
- 저감된 수소는 격납고 내부로 방출되고, 자연대류에 의해 순환되어 격납고 내부의 전체적인 수소농도가 저감됨
- 수소와 산소의 화학반응은 상세 메커니즘으로 평판표면에서 백금에 의한 반응 및 기체반응 계산
- 유동 모델은 SST k- $\omega$
- 기체의 초기 속도는 0 m/s이며 수소기체의 부력과 질량확산에 의해 유입
- 유입 혼합기체의 농도 (mf : mole fraction)  
H<sub>2</sub> mf : 0.01~ 0.04  
O<sub>2</sub> mf : 0.2095(1- H<sub>2</sub> mf)  
N<sub>2</sub> mf : 0.7905(1- H<sub>2</sub> mf), H<sub>2</sub>O mf : 0
- 평판의 온도는 500 K 이상 가열되므로 Discrete Ordinates model로 평판의 복사열전달 계산

Surface chemical mechanism		Gas-phase chemical mechanism			
Adoption reactions	S (Sticking coefficient)	Reactions	A (mole cm K s)	B	E (kJ/mol)
1. H <sub>2</sub> +2Pt <sup>(s)</sup> =2H <sup>(s)</sup>	0.046	1. H+O=O+OH	3.55x10 <sup>15</sup>	-0.41	69.45
2. H+Pt <sup>(s)</sup> =H <sup>(s)</sup>	1.0	2. O+H=H+OH	5.08x10 <sup>14</sup>	2.67	26.32
3. O <sub>2</sub> +2Pt <sup>(s)</sup> =2O <sup>(s)</sup>	0.07	3. H <sub>2</sub> +O=H+OH	2.16x10 <sup>16</sup>	1.51	14.35
4. O <sub>2</sub> +Pt <sup>(s)</sup> =O <sup>(s)</sup>	0.023	4. O+H <sub>2</sub> =OH+H	2.97x10 <sup>16</sup>	-2.02	56.07
5. O+Pt <sup>(s)</sup> =O <sup>(s)</sup>	1.0	5. H <sub>2</sub> +M=H+M	4.58x10 <sup>19</sup>	-1.40	436.73
6. H <sub>2</sub> O+Pt <sup>(s)</sup> =H <sub>2</sub> O <sup>(s)</sup>	0.75	6. O+O=O <sub>2</sub> +M	6.16x10 <sup>15</sup>	-0.50	0.00
7. OH+Pt <sup>(s)</sup> =OH <sup>(s)</sup>	1.0	7. O+H=OH+M	4.71x10 <sup>18</sup>	-1.00	0.00
8. H <sup>(s)</sup> O <sup>(s)</sup> =OH <sup>(s)</sup> Pt <sup>(s)</sup>	3.7x10 <sup>21</sup>	8. H+OH=H <sub>2</sub> O+M	3.80x10 <sup>12</sup>	-2.00	0.00
9. H <sup>(s)</sup> OH <sup>(s)</sup> =H <sub>2</sub> O <sup>(s)</sup> Pt <sup>(s)</sup>	3.7x10 <sup>21</sup>	9. H+O <sub>2</sub> (+M)=HO <sub>2</sub> (+M)	1.48x10 <sup>12</sup>	0.60	0.00
10. OH <sup>(s)</sup> O <sup>(s)</sup> =H <sub>2</sub> O <sup>(s)</sup> O <sup>(s)</sup>	3.7x10 <sup>21</sup>	10. HO <sub>2</sub> +H=H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.66x10 <sup>13</sup>	0.00	3.43
11. 2H <sup>(s)</sup> =H <sub>2</sub> +2Pt <sup>(s)</sup>	3.7x10 <sup>21</sup>	11. HO <sub>2</sub> +H=OH+OH	7.08x10 <sup>13</sup>	0.00	1.26
12. 2O <sup>(s)</sup> =O <sub>2</sub> +2Pt <sup>(s)</sup>	3.7x10 <sup>21</sup>	12. H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O=O <sub>2</sub> +H	3.25x10 <sup>13</sup>	0.00	0.00
13. H <sub>2</sub> O <sup>(s)</sup> =H <sub>2</sub> O+Pt <sup>(s)</sup>	1.0x10 <sup>13</sup>	13. HO <sub>2</sub> +OH=H <sub>2</sub> O+O <sub>2</sub>	2.89x10 <sup>14</sup>	0.00	-2.09
14. OH <sup>(s)</sup> =OH+Pt <sup>(s)</sup>	1.0x10 <sup>13</sup>	14. HO <sub>2</sub> +HO <sub>2</sub> =H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	4.22x10 <sup>14</sup>	0.00	50.12
		15. H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H=H <sub>2</sub> O+OH	2.95x10 <sup>14</sup>	0.00	202.63
		16. H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H=HO <sub>2</sub> +H	2.41x10 <sup>13</sup>	0.00	16.61
		17. H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O=OH+HO <sub>2</sub>	4.82x10 <sup>13</sup>	0.00	33.26
		18. H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +OH=HO <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	9.55x10 <sup>16</sup>	2.00	16.61
		19. H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +OH=HO <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	1.00x10 <sup>17</sup>	0.00	0.00
		20. H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +OH=HO <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	5.80x10 <sup>14</sup>	0.00	40.0

화학반응 메커니즘 (출처 : Deutschmann et al., 1996)

## 3. 결과 및 결론

### ● 입구의 수소 농도에 따른 촉매 주변 기체의 온도, 유속, 수소 농도 변화



- 수소 공기 혼합기체는 부력과 질량확산에 의해 약 0.7 m/s 유속으로 유입됨
- 촉매 표면 온도는 유입되는 수소의 농도가 높을 수록 발열량이 증가하여 **최대 795 K까지 가열됨**
- 혼합기체는 표면온도가 증가함에 따라 **밀도가 감소되어 자연대류 및 유속 증가**
- 수소 농도는 촉매의 하단에서 급격히 감소하며 약 0.2 m 에서 0에 수렴
- PAR의 자연대류와 촉매에 의한 수소와 산소 재결합 반응의 열유동 모델링 수립, 수치해석으로 기체의 농도, 온도분포 등 정량적 분석 가능