

2001 추계학술발표회 논문집  
한국원자력학회

## GOTHIC 코드 수소연소 해석의 실험적 검증 연구

Study of Experimental Validation for Combustion Analysis of GOTHIC Code

이진용, 양승연, 박군철, 정석호

서울대학교  
서울특별시 관악구 신림동 산56-1

### 요약

서울대학교에서 제작된 수소연소 실험 장치를 이용하여 수소 예혼합 연소 실험에 대한 결과를 GOTHIC6 코드의 수소연소 해석과 비교하였다. 실험장치는 16363 cc의 체적을 갖는 직육면체 형태이고 실험은 수소와 공기의 이론당량비 조건에서 점화원의 위치를 변화시키며 수행되었다. 수행된 실험에 대해 GOTHIC6 코드의 lumped와 mechanistic 연소 모델을 이용하여 해석하였다.

GOTHIC6 코드 연소 해석에서 실험과 일치하지 않는 결과를 나타내었다. 연소 시간의 관점에서 볼 때, GOTHIC6 코드의 lumped 모델의 경우 연소 현상을 물리적으로 모사한다고 볼 수 없었으며, mechanistic 모델의 경우 연소 시간은 실험 결과를 잘 예측하였으나 연소가 일어나기 전의 지연 시간(induction time)이 실험에 비해 매우 긴 것으로 나타났다. 또한 층류 연소 모델의 경우, 사용자 정의 변수를 적절히 조절하지 않으면 연소 해석에 있어서 매우 큰 오차를 나타내는 것으로 나타났다. 또한 실험 결과에서 압력은 연소 현상의 1차원적인 변수로 파악되어 3차원 효과를 보기에는 적절한 변수가 아니라고 판단된다.

### Abstract

In this study, present lumped and subdivided GOTHIC6 code analyses of the premixed hydrogen combustion experiment at the Seoul National University and comparison with the experiment results. The experimental facility has 16367 cc free volume and rectangular shape. And the test was performed with unit equivalence ratio of the hydrogen and air, and with various location of igniter position. Using the lumped and mechanistic combustion model in GOTHIC6 code, the experiments were simulated with the same conditions.

In the comparison between experiment and calculated results, the GOTHIC6 prediction of the combustion response does not compare well with the experiment results. In the point of combustion time, the lumped combustion model of GOTHIC6 code does not simulate the physical phenomena of combustion appropriately. In the case of mechanistic combustion model, the combustion time is predicted well, but the induction time of calculation data is longer than

the experiment data remarkably. Also, the laminar combustion model of GOTHIC6 has deficiency to simulate combustion phenomena unless control the user defined value appropriately. And the pressure is not a proper variable that characterize the three dimensional effect of combustion.

## 1. 서 론

원자력 발전소의 중대사고시 수소거동과 관련하여 격납용기의 건전성을 위협하는 주요한 요인 중의 하나는 수소연소 현상이다. 중대사고시 발생되는 다량의 수소는 기폭하여 폭발반응을 일으킴으로써 격납용기에 직접적인 하중을 가할 가능성이 있으며 안전관련기기에 손상을 유발시킬 수 있는 것으로 알려져 있다. 실제로 TMI-2 사고에서 노심용융물과 수증기와의 반응으로 다량의 수소가 발생하여 격납용기로 방출되었으며 격납용기로 방출된 수소가 연소함으로써 격납용기 내부의 압력을 상당히 증가시킨 것이 관측되었다[1]. TMI-2 사고의 경우 격납용기의 파손은 일어나지 않았으나, 이 사고 이후로 노심손상을 동반하는 중대사고시 격납용기내에서 수소연소의 현상규명 및 대처방안을 수립하는 것은 원자력 발전소의 건전성을 유지하는데 있어서 필수적인 과제로 인식되고 있다.

수소연소는 가연성기체의 혼합상태, 구조물의 기하학적 형태, 난류발생원 및 초기 조건 등의 영향에 따라 아음속연소인 폭연(deflagration), 연소천이(DDT : deflagration-to-detonation transient), 폭발(detonation)과 같은 연소특성을 나타낸다. 이와 관련하여 수소연소의 영향을 규명하기 위해 화염발생한계(flammability limits), 폭연, 화염가속현상, 폭발에 대한 실험들이 수행되어 왔으며 이를 이용하여 수소제어기의 위치 설정에 간접적으로 이용하였다. 관련 실험으로는 SNL FITS(화염발생한계 규명), SNL VGES(밀폐용기에서의 아음속연소 연구), SNL FLAME(화염가속화 현상 및 DDT 발생가능성 연구)[2], NTS(대규모 시설에서의 수소연소현상, 예호흡 및 연속주입시 연소현상 연구)[3], NUPEC(소규모 실험의 경우, 수소연소현상 및 화염 천이현상 연구) 등이 있다.

원전의 중대사고시 수소거동을 예측하고 기폭 및 연소현상에 대한 분석을 위해서는 해석 코드의 이용이 필수적이다. 중대사고시 코드를 이용한 연소현상의 분석은 현재까지 대부분 HECTR, CONTAIN, MAAP 등의 lumped 코드가 사용되어 왔다. 실험적으로는 폭연, 연소천이, 폭발 등의 수소연소현상에 대한 전반적인 연구가 수행되고 있음에도 불구하고 지금까지 주로 사용된 MAAP, HECTR 등의 lumped 코드의 경우는 아음속연소인 폭연 현상만을 취급하고 있다. 현재 수소제어에 대한 관심이 높아지면서 이러한 사고 해석코드보다는 국부적인 분석이 가능한 3차원 상세 해석코드의 사용이 대두되고 있으며 이와 상응하여 1차원 및 다차원 해석코드인 GOTHIC6 코드의 사용이 늘고 있다. 그러나 현재 코드 내부의 사용자 정의 변수의 검증 등 이론적 모델로서의 역할이 적절하게 검증되지 못하고 임의성을 내포하고 있으며 특히 수소연소 및 화염전파현상과 관련하여 GOTHIC6 코드의 해석능력에 대한 실험적, 이론적 검증은 현재까지 전무한 실정이다. 따라서 본 연구에서는 GOTHIC6 코드 내 수소연소 모델을 검토하고 수소연소 실험을 통해 GOTHIC6 코드의 연소 해석 능력을 검증하고 수소연소 현상에 대한 3차원 효과를 위한 변수로써 압력사용의 가용여부를 파악하여 연소 해석의 기초 자료를 생산하는 것을 목적으로 하였다.

## 2. 연소 실험

## 2.1 실험 장치의 구성

그림 1에 연소 실험 장치의 개략도 및 각 면에서의 제원을 나타내었다. 연소실은  $14.283 \times 230 \times 270 \text{ mm}^3$  리터의 체적을 갖는 직육면체 형태로 되어 있으며 각 6개 면에는 압력센서의 탈/부착과 fan의 장착, 그리고 실험 후 기연 가스의 배출이 용이하도록 뚜껑(cap)을 설치하였다. 사용된 연료는 C.P. 등급(<99 %)의 수소를 사용하였으며 혼합 기체의 점화는 방전 점화를 위하여 용량 방전 방식의 점화 장치(CDI, Capacity Discharge Ignitor)와 자동차용 점화 코일을 사용하였다.

연소실 내의 순간적인 압력 변화를 측정하기 위하여 압전 소자형 절대 압력센서(piezoelectric pressure transducer, Kistler type 6051, range 0~200 bar)와 증폭기(amplifier, Kistler type 5011)를 사용하였다.

## 2.2 실험 조건 및 방법

연소 기체의 조성은 수소와 공기를 이론당량비(총 압력 67.6 kPa)로 혼합하여 사용하였다. 혼합된 연소 기체는 연소실로 주입되며 수소와 공기가 충분히 혼합되도록 fan을 사용하고 혼합 시간을 충분히 유지하였다. 주된 실험은 점화기의 상대적인 위치를 변화시키며 연소실 내부의 압력 증가 변화를 살펴보는 것으로 압력 계측 지점은 좌측면의 중앙으로 고정하고 점화기의 위치를 각 대칭 되는 지점으로 변화시켜 실험을 수행하였다. 각 점화기의 위치 및 압력 계측 지점을 그림 2에 도시하였다.

## 3. GOTHIC6 코드 연소 해석

### 3.1 GOTHIC6 코드의 연소 해석 모델[4]

GOTHIC6 코드는 lumped 체적에 대한 연소 모델과 세분화된 3차원 체적에 대한 연소 모델을 포함하고 있다. HECTR 코드의 연소모델이 CONTAIN 코드에 사용되고 있으며 GOTHIC6의 lumped 수소연소 모델 역시 HECTR 코드의 연소모델과 동일하다. 따라서 GOTHIC6 코드의 lumped 연소모델을 이용할 경우 아음속연소만을 해석할 수 있으며 사용자에 의해 정의되는 변수들의 사용에 주의가 필요하다. 또한 실제 연소현상의 경우, 연소가 일어나면 체적이 7~8배로 팽창하는 효과가 있으나 연소모델 내에서는 이에 대한 고려는 하지 않고 있다. 구체적인 각각의 모델은 다음과 같다.

#### 3.1.1 GOTHIC6 lumped parameter 연소 모델

Lumped 연소모델은 discrete burn과 continuous burn의 분리된 두 가지 모델로 구성되어 있다. Discrete burn 모델은 특정한 기체 혼합체 조건을 만족시킬 경우 체적 내부에 존재하는 수소의 특정 분율을 연소시키는 모델이고 continuous burn 모델은 junction에서 체적 내부로의 수소의 흐름을 연속적으로 연소시키는 모델이다. 수소연소에 대한 주요 변수로는 점화 한계 및 화염전파 한

계, 화염 속도 및 연소 시간, 완전 연소 여부 등이 있으며 표 1에 점화 한계 및 화염전파 한계치를 정리하였다.

표 1. Discrete burn ignition and propagation limits

Limit Type	Mole Fraction		
	수소	산소	수증기
Ignition	$\geq 0.070$	$\geq 0.05$	$\leq 0.55$
상향 전파	$\geq 0.041$	$\geq 0.05$	$\leq 0.55$
하향 전파	$\geq 0.090$	$\geq 0.05$	$\leq 0.55$
수평 전파	$\geq 0.060$	$\geq 0.05$	$\leq 0.55$

설정된 화염속도는 수소, 산소, 수증기 체적 몰분율의 함수로 계산되며 이 때 사용자 입력 값이 곱해진 식으로 표현된다. 연소시간은 격실의 특성길이를 화염속도로 나누어 계산하며 남은 수소의 양은 수소농도에 대한 특정 식에 의해 수소농도가 약 8 % 이상이면 완전연소가 이루어진다.

### 3.1.2 Mechanistic 연소 모델

세분화된 체적에만 적용 가능하며 몰 분율 제한이 만족되어야 한다. 충류 연소율은 0으로 설정되어 있고 유효 온도가 500 °F를 넘지 않으면 계산하지 않는다. 난류 연소율은 기본적으로  $k-\epsilon$  난류 모델로 계산되어지며  $k-\epsilon$  난류 모델이 사용되지 않으면 난류 연소 역시 계산하지 않는다. 높은 수소연소율은 높은 유효 온도의 자연발생 또는 점화에 의한 국부적인 높은 온도에 의해 일어나며 연소에 의한 높은 온도는 이웃의 cell로의 연소 전파가 가능하게 한다.

충류 연소 모델은 기본적으로 Lewis와 von Elbe의 표현식을 이용하여 구하며 선택적으로 사용자에 의해 연소율 및 온도 제한 값을 정할 수 있다. 이 때 사용자 정의 변수가 연소율에 곱해지게 되어 사용자 정의 변수를 사용할 경우 주의하여야 한다. 난류 연소 모델의 경우 Magnussen과 Magnussen/Hjerthager의 eddy dissipation concept에 기초하고 있다. 이 모델에서는 반응율은  $k-\epsilon$  모델에서의 난류 변수와 직접적으로 연관되어 있으며 계산된 연소율은 cold quenching과 high turbulence flame quenching의 두 가지 실험적 제한 값에 의해 제한된다.

### 3.2 해석 조건 및 방법

3차원 해석의 경우 cell의 개수 및 최대 시간 간격, 각 연소 모델 옵션의 사용 유무에 대한 해석을 수행하였으며 이를 통하여 최적 계산 조건을 적용하였다. GOTHIC6 코드의 경우 직육면체 형태로만 체적을 구성할 수 있다. 따라서 세분된 3차원 해석을 위하여 전체 해석 체적을 16364 cc의 직육면체 형태로 구성하였다. 3차원 체적의 cell 수는 100 개 미만에서 1000 이상까지 계산을 수행하여 보았으나 결과에 큰 차이를 보이지 않아 343 개 ( $7 \times 7 \times 7$ )로 구성하여 계산을 수행하였다. 실험 조건과 동일한 초기 압력 67.6 kPa에 이론당량비에 해당하는 초기 조건을 주었으며 초기 조건을 줄 때, 공기로 조건을 줄 경우 GOTHIC6 코드가 공기에 포함된 산소를 연소에 이용하지 못

하게 되어 있으므로 초기의 제어체적 내의 조성은 수소, 산소, 질소 세 가지 기체로 구성된다고 가정하였다. 계산 초기 온도는 상온(300 K)으로 하였으며 이 연구의 주된 목적이 최대 압력의 비교가 아니라 연소 시간의 비교에 있으므로 주변의 conductor 모사는 고려하지 않았다. 계산에서 최대 시간 간격을 크게 줄 경우 연소 지연 시간이 길어지는 결과를 보였으며 이를 고려하기 위하여 연소에 영향을 주지 않는 정도의 작은 시간 간격으로 최대 시간 간격을  $10^{-7}$  정도로 조정하였다. 스파크 형태의 점화기를 실험과 동일한 지점에 설정하였으며 점화는 계산 시작과 동시에 이루어지는 것으로 설정하였다. GOTHIC6 코드의 해석 능력을 검증하기 위한 연구이므로 난류 연소 해석에서 사용되는 Dahmkohler 수, 층류 연소 해석의 사용자 정의 변수 등의 설정값들은 코드에서 추천하는 값을 사용하여 계산을 수행하였다. 연소 해석은 실험에서 사용된 수소의 성층화 현상의 유무를 검증하기 위한 비교 해석부터 최종적으로 점화기의 위치에 따른 해석을 수행하였다.

#### 4. 결 과

그림 3은 점화기의 상대적인 위치를 변화에 따른 연소실 내부의 압력 증가 변화를 도시한 실험 결과를 나타내며 그림 4는 점화기 위치 8번, 7번과 6번에 해당하는 경우를 GOTHIC6 코드의 mechanistic 층류 및 난류 연소 모델을 동시에 이용하여 해석한 압력 변화를 도시한 그래프이다.

먼저 실험 결과를 살펴보면, 0초에서 점화를 시켰을 경우, 점화와 동시에 연소가 일어나지 않고 약 0.02초 정도의 연소 지연 시간을 가진 후 전체적인 연소가 일어나는 것을 알 수 있다. 또한 점화기의 위치와 압력 측정 부분과의 거리가 짧을수록 연소시간이 빠른 경향을 보인다. 즉 압력 변화의 경향은 압력 센서와 점화기의 3차원적인 상대적 위치에는 직접적으로 영향을 받지 않고, 오히려 압력센서가 위치하는 면(2-3 plane)과의 수직거리에 영향을 더 많이 받는 것으로 보여진다. 이것은 3차원 공간에서의 화염의 전파에 의한 압력의 상승은 3차원적인 변수라기 보다는 1차원적인 변수인 것을 의미하며 따라서 연소현상의 3차원 효과를 보기에는 적절한 변수가 아니라고 판단된다.

GOTHIC6 코드의 lumped 체적에 대한 연소 해석 결과를 살펴보면, 연소는 시작과 동시에 전체적에 걸쳐 즉시 일어나는 것으로 모사된다. 이는 lumped 계산의 특징으로 현재 고려하고 있는 연소 시간이나 연소 지연 시간 등의 특징을 비교할 수 없다. 그림 4의 GOTHIC6 3차원 해석의 압력 변화를 살펴보면, 압력의 변화는 실험에서와 같이 연소 지연 시간 이 후에 전체적인 연소가 일어나는 형태를 가진다. 또한 점화기의 위치에 따라 전체적인 연소가 일어나는 시간에서 차이를 보이며 이는 계측 지점에서 점화기의 위치가 멀어질수록 연소가 완료되는 시간이 길어지는 경향을 나타내고 있다. 각 cell에서의 온도 변화를 살펴보면 이를 좀 더 확실히 알 수 있다. 온도는 점화가 일어난 cell을 중심으로 수평, 수직 방향의 인접한 cell로 대칭적으로 증가한다. 체적 내의 모든 cell들의 온도가 높아지는(연소가 이루어지는) 시작에서 압력은 최대 값에 도달하며 이는 점화 위치에 따라 그 시간이 길어지는 경향을 보인다.

실험에서의 압력 측정값과 GOTHIC6 해석에서의 압력 계산값은 전체적으로 초기의 일정 시간의 연소 지연 시간을 가진 후 압력이 약 0.2~0.3 초 동안에 급격히 증가하는 비슷한 경향을 보인다. 그러나 결과를 비교해보면 실험에서의 연소 지연 시간이 약 0.02 초 정도로 모든 경우에 비슷했던 것과 달리 GOTHIC6 해석 결과의 경우 연소 지연 시간이 각 경우에 대해 변화가 크고 그 시간도 0.04 초 정도에서 0.1 초 이상까지 실험에 비해 매우 크게 나타난다. 이러한 차이가 나타날 수 있는 이유를 살펴보면 다음의 몇 가지 가능성을 생각해 볼 수 있다. 우선 해석에서 cell을 나누

는 개수의 영향을 생각할 수 있다. 연소 계산을 위한 시간이 매우 짧은 것을 고려할 때, 상대적으로 큰 cell의 체적이 연소에 의한 영향을 잘 반영하지 못함으로써 계산 결과에 영향을 줄 수 있다. 하지만 약 10000 개 이상의 cell로 분할하였을 경우, 해석 결과를 얻기 위한 계산 시간의 경제성과 계산 도구의 한계성을 고려하고 cell 수에 대한 민감도 분석에서 대략 1000 개까지의 계산 결과가 변화가 없는 것을 고려할 때, cell 수는 결과에 영향이 없다고 판단된다. 다음으로 고려할 수 있는 것은 실험과 계산에서 사용된 수소의 완전 연소 차이다. 계산의 경우, 최종적으로 수소의 완전 연소가 일어나는 것으로 나타났으나 실험의 경우 초기의 충분한 혼합을 시키는 데 있어서의 오차 등을 고려하고 최종 압력에 있어서의 계산 결과와의 차이를 고려하면 완전 연소가 일어났다고는 보기 힘들다. 그러나 완전 연소 여부와 연소 지연 시간과의 상관관계가 별로 없다는 것을 고려하면 연소 지연 시간에서의 차이는 완전 연소 차이로 인해 나타났다고 판단하기 힘들다. 마지막으로 GOTHIC6 코드 자체의 해석 방법에 있어서의 문제를 생각할 수 있다. 기존의 소격실 수소혼합실험의 계산 등에서 나타난 것과 같이 GOTHIC6 코드의 경우 소규모의 실험 장치를 해석하는 데 한계를 가진 것으로 판단된다. 연소와 관련하여 GOTHIC6 코드 내의 연소 모델의 문제보다 유동장 해석에 있어서의 코드 해석 방법론에 차이가 있을 수 있다. 이와 관련하여 GOTHIC6 코드 해석의 전체적인 모델 검토 및 해석 방법의 정확한 이해가 선행되어져야 할 것이다.

GOTHIC6 해석에서 층류와 난류 연소 모델을 동시에 사용한 것에 주목할 필요가 있다. 코드에서 추천하는 설정값들을 이용하여 층류 연소 모델만으로 해석한 경우, 실제 실험과는 전혀 다른 결과를 보였다. 실제 실험의 경우, 연소에 의한 난류 효과를 고려한다하더라도 초기 유동이 층류임을 생각하면 이는 적용에 있어서의 문제점을 나타낸다. 사용자 정의 변수를 사용하지 않을 경우, 또 코드 내부의 설정값들을 적절히 변화시키지 않을 경우 GOTHIC6 코드는 각 모사 실험에 대해 오차가 큰 계산 결과를 낼 수 있다.

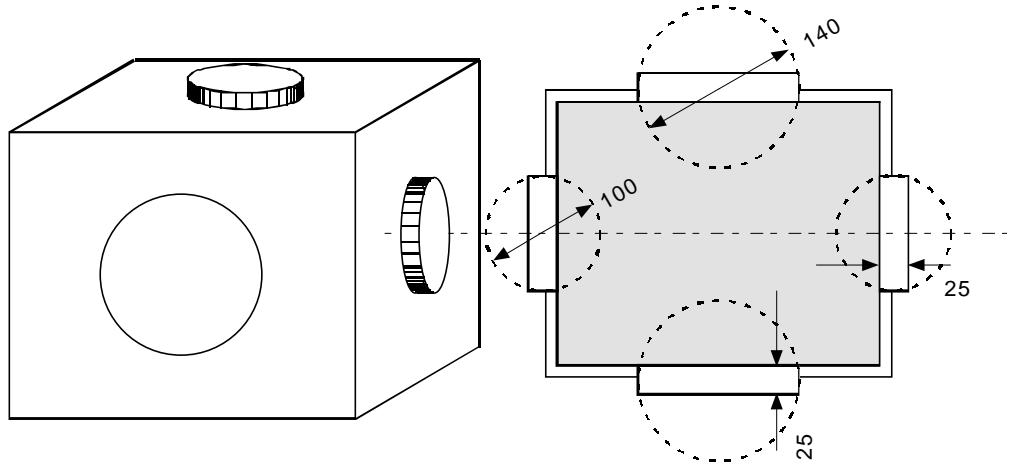
## 5. 결 론

GOTHIC6 코드의 연소해석능력 검증 및 수소연소 현상의 이해를 위한 기본 연구로 점화기 위치에 따른 연소 분석을 압력 변수를 이용하여 수행하였다. 실험 결과에서 압력은 3차원 효과를 보기 위한 변수로는 적절하지 않은 것으로 나타났으며, 따라서 3차원적인 화염전파 자료를 위해서는 온도 및 레이저 등을 이용한 연구가 추가적으로 수행되어야 할 것으로 판단된다. 해석 결과와 실험 결과와의 비교에서 연소 지연 시간이 해석에서 더 길고 변화가 큰 것으로 나타났으며 이를 위해서는 GOTHIC6 코드의 연소 관련 모델뿐만 아니라 유동장 해석을 위한 모델까지 포괄적인 검토가 수행되어야 할 것이다. 아울러, 코드 내의 연소 모델에 포함되어 있는 사용자 정의 변수나 설정 값들에 대한 정확한 이해와 민감도 분석이 요구된다.

## 참 고 문 헌

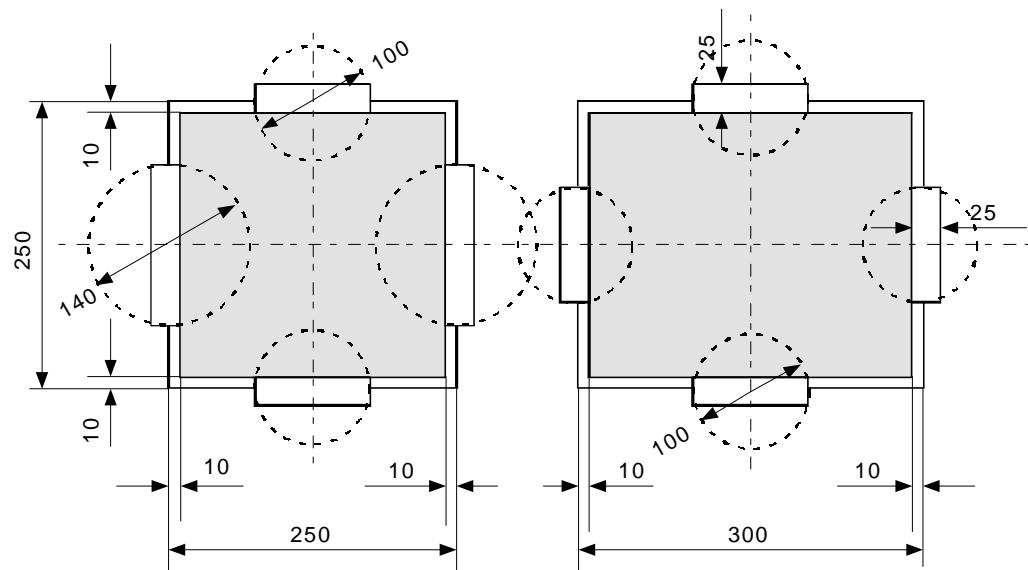
- [1] J.O.Henrie and A.K.Postma, "Lessons Learned from Hydrogen Generation and Burning During the TMI-2 Event", GEND-061, U.S. Department of Energy, Mar., 1987.
- [2] M.P.Sherman, S.R.Tieszen, W.B.Benedick, "FLAME Facility-The Effect of Obstacles and Transverse Venting on Flame Acceleration and Transition to Detonation for Hydrogen/Air Mixtures at Large Scale", NUREG/CR-5275, Sandia National Laboratories, Apr., 1989.

- [3] A.C.Ratzel, " Data Analyses for Nevada Test Site (NTS) Premixed Combustion Tests', NUREG-4138, Sandia National Laboratories, May, 1985.
- [4] "GOTHIC-CONTAINMENT ANALYSIS PACKAGE : TECHNICAL MANUAL", NAI, Dec., 1997.



OVERVIEW

TOP VIEW



SIDE VIEW

FRONT VIEW

그림 1. Schematic of combustion chamber

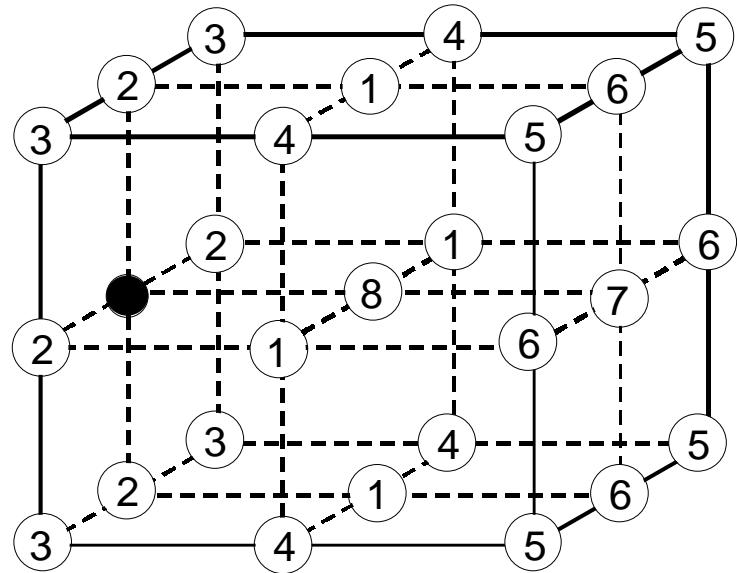


그림 2. Schematic of igniter positions

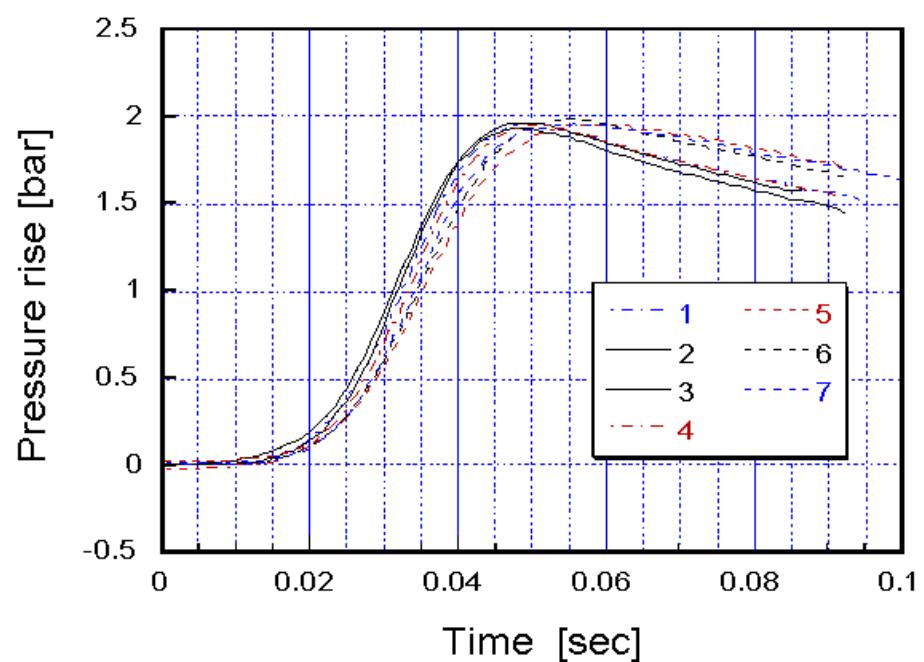


그림 3. Pressure rise histories in combustion chamber(Experiment)

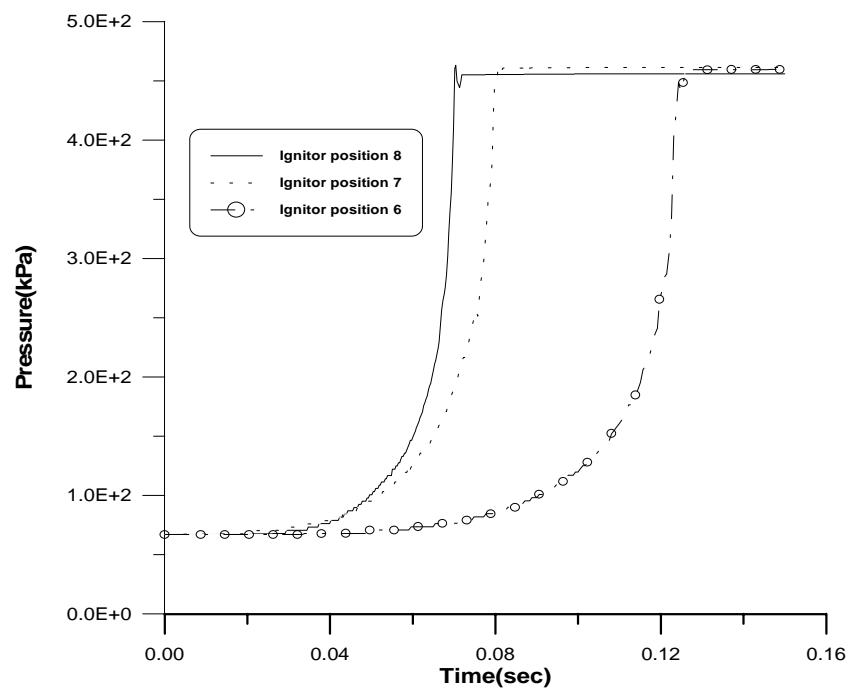


그림 4. Pressure rise histories in combustion chamber(GOTHIC6)