

변동구간분할법을 이용한 흡습성 에어로졸의 거동 해석

An Analysis of the Hygroscopic Aerosol Behavior Using the Moving Sectional Method

박 재 우
J. W. Park

제주대학교 공과대학 에너지공학과

ABSTRACT

It has been found hygroscopic aerosols can rapidly grow in size by steam condensation even under subsaturated steam conditions. Since particle growth is a principal process enhancing gravitational settling of aerosols, much efforts have been made to handle this process. But there have been computational difficulties in handling the condensational growth of hygroscopic aerosols by conventional methods. Recently, the computer code CONTAIN 2.0 was released, which employs a new technique called Moving Sectional Method(MSM) to handle the growth of hygroscopic aerosols under steam condensing conditions. In order to assess the accuracy of the MSM, the CONTAIN 2.0 code has been used to simulate a hygroscopic aerosol experiment. Discussions are made about the accuracy of the MSM and the conventional method based on the simulation results.

주요기술용어 : Hygroscopic Aerosol, Moving Sectional Method, Fixed Sectional Method, Steam Condensation

I. 서 론

흡습성 에어로졸 입자에 대한 증기의 응축과 증발은 질소산화물 및 유황산화물의 대기중 거동, 스프레이 및 흡연물질의 기관지내 거동, 연소분위기에서 연료액적의 거동 등 다방면에서 연구되는 현상이다. 이

현상은 또한 원자로 사고시의 방사성물질의 거동을 해석하는 데에도 직접적으로 관련되는 현상이다. 원자력발전소의 안전성 분석에는 원자로심이 용융되어 다량의 방사성 물질이 원자로 격납건물로 방출되는 최악의 시나리오가 포함된다. 현재 밝혀진 바로는 격납건물로 방출되는 방사성 물질의 대부분은 미세한 입자인 에어로졸 형태를 취하게 된다. 격납건물은 방사성 물질의 환경방출을 궁극적으로 차단하는 역할을 하므로 격납건물의 성능을 평가하고 방사성물질의 환경방출 잠재량을 평가하기 위해서는 에어로졸의 거동을 해석하는 과정을 거쳐야 한다. 원자로 사고시에 격납건물로 방출되는 방사성 물질 가운데는 CsOH, CsI 등 강한 흡습성을 가진 물질이 있고 이들을 포함한 에어로졸은 수증기 응축에 의한 입자 성장이 에어로졸의 침전에 영향을 미치는 중요한 변수가 된다.

원자로 사고 해석과 관련하여 다양한 형태의 에어로졸 거동 계산 모델이 개발되어 사용되고 있으나 공통적으로 겪는 어려움은 입자표면에 수증기가 응축하여 입자크기가 빠르게 성장하는 경우 정확성이 나빠진다는 점이다.⁽¹⁾ 예컨대 MELCOR 코드⁽²⁾와 CONTAIN 코드⁽³⁾에 사용된 MAEROS⁽⁴⁾ 모델의 경우 수증기 응축이 없는 건조한 에어로졸의 거동을 계산하는 데는 정확성이 입증되었으나 수증기 응축을 고려하는 경우 수치확산(numerical diffusion)으로 인하여 실제보다 에어로졸 성장이 느리게 계산되는 문제가 발생한다. 이러한 문제점은 흡습성(hygroscopic) 성분이 포함된 에어로졸을 대상으로 하면 더욱 심각해진다. 흡습성 성분은 수증기가 불포화 상태에서도 주위의 수분을 흡수하여 용해하므로 그 만큼 입자성장이 빠르게 진행되기 때문이다. 이에 따라 중대사고 해석에서 흡습성 에어로졸의 거동이 중요한 이슈로 부각되었고 에어로졸 실험을 통한 국제공동의 모델 평가작업⁽⁵⁾이 수행된 바도 있다.

수증기 응축이 동반되는 에어로졸의 거동 해석에 따른 이러한 문제점을 극복하기 위하여 기존의 에어로졸 계산 모델을 개선하는 노력이 진행되었다. 기존의 MAEROS 모델을 개선한 변동구간분할법(Moving Sectional Method 또는 Moving Grid Model)⁽⁶⁾은 이러한 노력의 한 결과로 볼 수 있다. MAEROS 모델은 에어로졸을 입자크기에 의거하여 다수의 구간으로 나누고 각 구간에 포함된 에어로졸량을 수치적으로 계산하는 방법이다. 각 구간의 경계는 계산이 진행되는 동안

처음대로 고정되므로 고정구간분할법(Fixed Sectional Method 또는 Fixed Grid Model)이라 부른다. 이 모델은 앞서 언급한 바와 같이 입자표면에 수증기 응축이 있는 경우 수치확산 오차를 유발한다. 변동구간분할모델은 이와 달리 수증기 응축에 대해서는 구간의 경계를 변동시키면서 계산을 하고 수증기 응축을 제외한 나머지 에어로졸 현상에 대해서는 기존의 고정구간분할모델을 사용하는 방식이다.

격납건물의 성능해석을 위하여 개발된 CONTAIN 코드는 원래 에어로졸 거동 계산에 고정구간분할법에 기초한 MAEROS 모델을 사용하였으나 최근에 발표된 CONTAIN 2.0 코드는 흡습성 에어로졸에 대해서는 변동구간분할모델을 사용할 수 있도록 모델을 개선하였다. 본 연구는 에어로졸 계산 모델의 검증에 위하여 국제표준문제로 활용된 바 있는 VANAM M3 에어로졸 실험⁽⁷⁾을 CONTAIN 2.0 코드로 계산하였으며 계산 결과를 통하여 변동구간분할법의 정확성을 평가하였다. VANAM M3 실험은 강한 흡습성을 지닌 NaOH 에어로졸을 사용하였고 중대사고시 격납건물로 방출되는 CsOH의 거동을 규명하기 위하여 실시되었다.

II. 다성분 에어로졸 거동방정식

에어로졸은 미세한 입자들이 부유한 상태로써 중대사고시에 격납건물로 방출된 에어로졸의 경우 입자들 구성하는 성분에는 여러 가지 핵분열생성물과 수증기가 응축한 물이 포함된다. 각 핵분열생성물은 방사능학적으로 서로 다른 특성을 가지므로 이러한 에어로졸의 거동을 계산하기 위해서는 다성분(multicomponent) 에어로졸 계산 모델이 필요하다. 일반적으로 단일성분 에어로졸의 거동은 입자크기분포의 변화를 나타내는 거동방정식으로 기술된다. 공간분포가 균일하다고 가정할 경우 입자크기분포는 기체 단위부피당의 입자수를 나타내며 입자크기를 나타내는 변수(직경 또는 질량)와 시간의 함수이다. 중대사고 해석에서 관심의 대상은 각 성분별 에어로졸량이므로 입자크기를 나타내는 변수로 입자의 질량을 사용하는 것이 편리하다. 에어로졸을 구성하는 성분의 수를 s 라하고 입자의 질량을 m 으로 나타내자. $q_k(m, t)$ 는 질량이 m 인 입자에 포함된 k -성분의 질량분포를 나타내는 함수로서 $q_k(m, t)dm$ 는 m 과 $m+dm$ 사이에 있는 입자들의 k -

성분 질량농도를 정의한다고 하자. 이 경우 모든 성분의 합은 전체 질량분포를 나타내며 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$q(m, t) = \sum_{k=1}^s q_k(m, t) = mn(m, t) \quad (1)$$

여기서 $n(m, t)$ 는 입자수 분포함수로서 $n(m, t)dm$ 는 질량이 m 과 $m+dm$ 사이에 있는 단위 부피당 입자의 수를 나타낸다. (1)의 정의에 의거하여 Simons⁽⁹⁾은 다성분 에어로졸의 거동을 기술하는 방정식을 아래와 같은 적분형 미분방정식으로 나타내었다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_k(m, t)}{\partial t} = & \int_0^m \beta(m-u, u) q_k(u, t) n(m-u, t) dm \\ & - q_k(m, t) \int_0^\infty \beta(m, u) n(u, t) du \\ & + \delta_{w,k} \psi(m) n(m, t) - \frac{\partial}{\partial m} [\psi(m) q_k(m, t)] \\ & - R(m, t) q_k(m, t) + S_k(m, t) \quad (2) \end{aligned}$$

위에서 $\beta(m, u)$ 는 질량이 각각 m, u 인 입자의 결합(coagulation)률을 나타내며 $\psi(m)$ 는 질량이 m 인 입자에 대한 수증기 응축률을 나타낸다. $R(m, t)$ 는 질량이 m 인 입자의 제거율이다. $S_k(m, t)$ 는 질량이 m 인 입자에 포함된 k -성분의 생성률을 나타낸다. $\delta_{w,k}$ 는 k -성분이 물인 경우(w)이면 1이고 그렇지 않으면 0이다. 우변의 첫째항은 질량이 m 보다 작은 2개의 입자가 결합(coagulation)하여 질량이 m 인 입자로 되면서 k -성분이 증가하는 율을 나타내며, 둘째항은 질량이 m 인 입자와 다른 입자가 결합하여 k -성분이 감소하는 율을 나타낸다. 우변의 셋째항은 수증기 응축으로 질량이 m 인 입자에 물이 첨가되는 율을 나타내고, 넷째항은 수증기 응축으로 질량이 m 인 입자가 성장하여 k -성분이 감소하는 율을 나타낸다. 우변의 다섯째항은 질량이 m 인 입자가 제거되어 k -성분이 감소하는 율을 나타낸다.

III. 고정구간분할모델(FSM)

식 (2)는 적분형 미분방정식으로 직접 해를 구하는 데는 많은 어려움이 따른다. 따라서 Gelbard와 Seinfeld⁽⁹⁾

는 입자 질량을 다수의 구간(또는 그룹)으로 분할하고 각 구간에 속한 에어로졸 성분의 질량을 계산하는 수치방정식을 식 (2)로부터 유도하였다. 입자의 질량을 임의의 수의 구간으로 분할하고 시간 t 에서 l -구간에 속한 k -성분의 단위 부피당 질량을 $Q_{l,k}(t)$ 로 나타내면 이는 아래와 같이 정의된다.

$$Q_{l,k}(t) = \int_{m_{l-1}}^{m_l} q_k(m, t) dm$$

$$= \int_{m_{l-1}}^{m_l} \bar{m}_k n(m, k) dm \quad (3)$$

위에서 m_l 과 m_{l-1} 은 각각 l -구간의 위와 아래의 경계에 해당하는 입자의 질량이고 \bar{m}_k 는 질량 m 인 입자에 포함된 k -성분의 평균질량이다. (3)에 따라 l -구간에 속한 에어로졸의 전체 농도는 다음과 같이 표시될 수 있다.

$$Q_l(t) = \sum_{k=1}^K Q_{l,k}(t) = \int_{m_{l-1}}^{m_l} m n(m, t) dm \quad (4)$$

식 (2)를 수치방정식으로 변환하기 위하여 MAEROS 모델은 다음의 근사법을 적용하였다. 첫째 임의의 구간에서 입자의 질량분포 $q(m, t)$ 는 입자의 질량과 무관한 상수이다. 즉, l -구간에 대해서

$$q(m, t) = m n(m, t) = \bar{q}_l(t) \quad (5)$$

식 (5)를 (4)에 대입하면

$$Q_l(t) = \bar{q}_l(t) (m_l - m_{l-1}) \quad (6)$$

식 (5)와 (6)으로부터 입자수 분포함수 $n(m, t)$ 는 다음과 같이 얻어진다.

$$n(m, t) = \frac{Q_l}{m(m_l - m_{l-1})} \quad (7)$$

두번째 근사는 각 구간에 속한 모든 입자들은 동일한 성분비를 갖는다는 것이다. 이에 따라 l -구간에서 질량이 m 인 입자의 평균질량은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\bar{m}_k = \frac{Q_{l,k}}{Q_l} m \quad (8)$$

식 (3)과 (4)의 정의와 (7)과 (8)의 근사관계를 적용

하여 Gelbard와 Seinfeld⁸⁾는 식 (1)을 다음과 같은 일련의 상미분방정식으로 변환하였다.

$$\frac{dQ_{l,k}(t)}{dt} =$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l-1} \sum_{j=1}^{l-i} [{}^1a_{\beta_{i,j,l}} Q_{i,k} Q_{j,k} + {}^1b_{\beta_{i,j,l}} Q_{i,k} Q_{j,k}]$$

$$- \sum_{i=1}^{l-1} [{}^2a_{\beta_{i,l}} Q_i Q_{l,k} - {}^2b_{\beta_{i,l}} Q_i Q_{l,k}]$$

$$- \frac{1}{2} {}^3\beta_{l,l} Q_l Q_{l,k} - Q_{l,k} \sum_{i=l+1}^K {}^4\beta_{i,l} Q_i$$

$$+ {}^1G_{l,k} Q_l - {}^2G_{l,k} Q_{l,k} + {}^2G_{l+1} Q_{l+1,k}$$

$$+ {}^3G_{l-1,k} Q_{l-1} - R_{l,k} Q_{l,k} + S_{l,k} \quad (9)$$

위에서 β, G, R 은 각각 입자간의 결합률, 수증기 응축률, 제거율을 나타내는 함수를 각 구간에 대해서 적분한 구간계수(sectional coefficients)이다. 이들 계수를 구하는 상세한 식은 문헌 8)에 주어져 있다. 각 β 계수와 G 계수가 나타내는 에어로졸 현상은 다음과 같다.

${}^1a_{\beta_{i,j,l}}$ = i -구간의 입자와 j -구간의 입자가 결합하여 l -구간의 입자로 성장하면서 j -구간의 k -성분이 l -구간으로 유입되는 과정

${}^1b_{\beta_{i,j,l}}$ = i -구간의 입자와 j -구간의 입자가 결합하여 l -구간의 입자로 성장하면서 i -구간의 k -성분이 l -구간으로 유입되는 과정

${}^2a_{\beta_{i,l}}$ = i -구간의 입자와 l -구간의 입자가 결합하여 성장하면서 l -구간의 k -성분이 유출되는 과정

${}^2b_{\beta_{i,l}}$ = i -구간의 입자와 l -구간의 입자가 결합하여 성장하면서 i -구간의 k -성분이 l -구간으로 유입되는 과정

${}^3\beta_{l,l}$ = l -구간의 입자와 l -구간의 입자가 결합하여 성장하면서 l -구간의 k -성분이 유출되는 과정

${}^4\beta_{i,l}$ = l -구간의 입자와 상위 구간의 입자가 결합하여 성장하면서 l -구간의 k -성분이 유출되는 과정

${}^1G_{l,k}$ = l -구간의 입자에 수증기가 응축하여 l -구간에 물이 첨가되는 과정. k -성분이 물인 경우에만 값을 가지며 다른 성분이면 0임

2G_l = l -구간의 입자에 수증기가 응축하여 l -구간에서 k -성분이 유출되는 과정

${}^2G_{l+1}$ = l-1-구간의 입자에 수증기가 응축하여 l-구간의 입자로 성장하면서 l-1-구간의 k-성분이 l-구간으로 유입되는 과정. +부호는 증발로 인하여 수축하는 경우 l+1-구간의 입자에 적용됨.

${}^3G_{l-1,k}$ = l-1-구간의 입자에 수증기가 응축하여 l-구간으로 성장하면서 물이 l-구간으로 첨가되는 과정. k-성분이 물인 경우에만 값을 가짐.

각 구간의 경계는 $m_i/m_{i-1} > 2$ 인 조건을 만족하게 설정함으로써 계산이 필요한 β 계수의 수가 훨씬 감소한다. β 와 R계수는 온도와 압력의 함수이지만 이들이 변할 때마다 매번 계산하지 않고 온도와 압력의 최고 및 최저점에서 계산한 값을 내삽하여 사용한다.

식 (9)으로 주어진 MAEROS 모델은 미리 계산된 구간계수를 이용하여 우변에 있는 모든 항을 동시에 적분한다. 계산초기에 설정된 각 구간의 경계는 전 계산과정에서 변동되지 않고 고정된다. MAEROS 모델은 수증기 응축이 없는 건조한 에어로졸에 대해서는 정확한 계산을 할 수 있다. 반면 수증기 응축이 있는 에어로졸인 경우, 즉 식 (9) 우변의 G 계수항들을 포함할 경우 방정식이 과도하게 경직(stiff)되는 문제가 있다. 이것은 수증기 응축률이 입자크기에 따라 급격하게 변함으로 인하여 G 계수 역시 구간에 따라 매우 크게 변하기 때문이다. 수증기 응축이 있는 경우 발생하는 또 다른 문제는 각 구간의 경계를 고정함으로써 야기되는 수치확산(numerical diffusion) 오차이다. 수증기 응축으로 입자의 크기가 성장하면 작은 입자 구간은 비게 되고 입자크기분포는 점점 폭이 좁아진다. MAEROS 모델식 (9)은 이러한 입자크기분포의 변화를 계산할 수 없는 형태이다.

IV. 변동구간분할모델(MSM)

MAEROS 모델의 단점으로 밝혀진 방정식의 경직성과 수치확산 문제를 극복하기 위하여 Gelbard⁵⁾는 수증기 응축을 분리하여 계산하는 방법을 개발하였다. 즉 수증기 응축/증발에 대해서는 구간의 경계를 이동시키면서 구간별 에어로졸량을 계산하고 다른 현상에 대해서는 기존의 MAEROS 방정식을 통하여 계산하는 방법이다. MSM의 계산과정을 그림으로 나타내면 Fig. 1과 같다. 먼저 에어로졸 계산을 위한 시간구간

Δt 를 계산하고 이것을 더 세분한 시간단위(dt)로 구간의 경계를 이동시키면서 수증기 응축/증발에 의한 구간별 에어로졸량을 계산한다. Δt 동안의 계산이 완료되면 그 결과를 원래의 구간구조에 맞추어 배분하고, 초기시간(t_0)으로 돌아가 앞서 계산한 구간별 에어로졸량을 토대로 MAEROS 모델을 이용하여 결합(coagulation), 제거(removal), 생성(source)에 의한 변화를 계산한다.

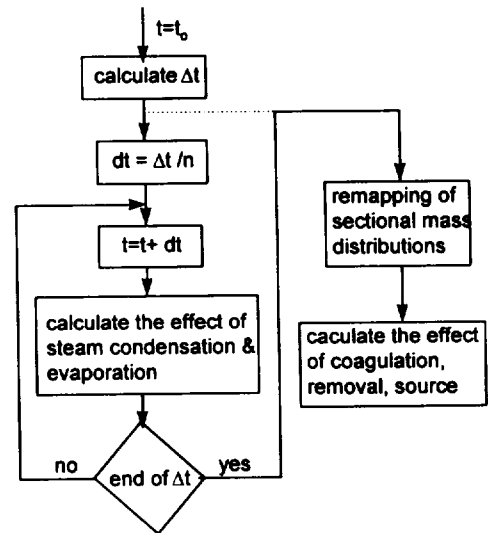


Fig. 1 Computational procedure of Moving Sectional Method

이동하는 구간의 경계는 수증기 응축률 모델을 이용하여 다음의 방정식에 의거하여 계산된다.

$$\frac{dm}{dt} = \psi(m) \tag{10}$$

따라서 t에서 질량이 $m_i(t)$ 인 입자의 dt후 질량 $m_i(t+dt)$ 는 다음과 같이 주어진다.

$$dt = \int_{m_i(t)}^{m_i(t+dt)} \frac{dm}{\psi(m)} \tag{11}$$

식 (11)으로부터 $m_i(t+dt)$ 의 해를 찾는 방법은 $m_i(t+dt)$ 을 반복적으로 변화시키면서 적분한 값이 dt가 되도록 하는 것이다.

수증기 응축/증발 계산을 통하여 얻어진 구간별 에어로졸량은 입자간 결합, 제거, 생성의 영향을 계산하기 앞서 원래의 구간구조에 중첩된 비율에 따라 배분

한다. 예컨대 j -구간의 경계인 m_j 와 m_{j+1} 이 수증기 용축으로 dt 동안 성장하여 각각 m_j^d 와 m_{j+1}^d 로 이동하였고 이것은 Fig. 2와 같이 원래의 l -구간의 경계(m_l, m_{l+1})와 부분적으로 중첩되었다고 하자. j -구간의 입자는 수증기 용축으로 크기가 성장하여도 물을 제외한 성분의 변화는 없으므로 dt 후의 j -구간 k -성분의 에어로졸량은 처음과 같아서 $Q_{j,k}(t+dt) = Q_{j,k}(t)$ 이다. Fig.2의 경우 원래의 l -구간에 배분될 에어로졸량은 다음과 같이 계산된다.

$$Q_{l,k}(t) = Q_{j,k}(t) \frac{\ln(m_{l+1}/m_j^d)}{\ln(m_{j+1}^d/m_j^d)} \quad (12)$$

위에서 구간경계의 대수값을 사용한 이유는 입자질량의 대수값에 근거하여 구간분할을 하기 때문이다.

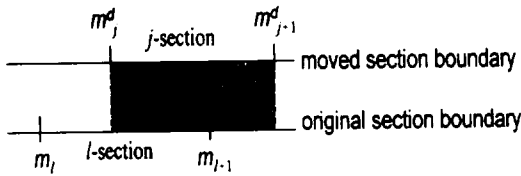


Fig. 2 An overlapping of moving section boundaries and original section boundaries

수증기 용축으로 각 구간에 첨가되는 물의 양은 에어로졸 전체에 용축될 물의 양을 먼저 계산하고 이것을 각 구간에 포함된 물을 제외한 성분의 비율에 따라 배분하여 결정한다. 에어로졸 전체에 용축될 물의 양은 현재 공기중 수증기농도와 평형 수증기농도의 차이로부터 계산한다.

V. CONTAIN 코드의 에어로졸 현상 모델

CONTAIN 2.0 코드에서 고려되는 에어로졸 현상은 다음과 같다.

- 입자간 결합(coagulation)
 - 브라운운동에 의한 결합
 - 중력에 의한 결합
 - 난류운동에 의한 결합
- 수증기 용축/증발
- 부착(deposition)에 의한 제거

- 중력침전
- 확산부착
- 기체와 벽면과의 온도차에 의한 부착(thermophoresis)
- 수증기의 벽면 용축에 따른 부착(diffusiophoresis)
- 에어로졸 생성(sources)

각 현상에 대한 상세한 모델은 코드 메뉴얼에 주어 있으므로 여기서는 생략한다. 수증기 용축/증발에 의한 입자 성장/수축 모델은 Mason 모델⁽¹⁰⁾을 사용하고 있으며 아래와 같다.

$$\psi(m) = \frac{2\pi d [S - a_w \exp(-\frac{4\sigma M_w}{RT\rho_w d})]}{\frac{1}{\rho_s D} + \frac{L}{K_g T} (\frac{M_w L}{RT} - 1)} \quad (13)$$

위에서 d 는 질량이 m 인 입자의 직경, S 는 수증기 포화비(saturation ratio), a_w 는 물의 화학적 활동도, σ 는 물의 표면장력, M_w 는 물의 그램분자량, R 은 기체상수, ρ_w 는 물의 밀도, ρ_s 는 포화수증기 밀도, D 는 수증기 분자의 확산계수, L 은 수증기 잠열, K_g 는 기체의 열전도계수, T 는 절대온도이다. 식 (13)의 지수함수는 구형 입자의 표면이 수증기 용축에 미치는 영향(Kelvin effect)을 나타내는 항이고 a_w 는 입자에 흡습성 성분이 포함된 경우 수증기 용축에 미치는 영향(solute effect)을 나타내는 항이다. a_w 는 다음의 식으로 계산된다.

$$a_w = \frac{1}{1 + f \frac{M_w m_s}{M_s m_w}} \quad (14)$$

여기서 m_s 와 m_w 는 각각 입자에 포함된 흡습성 성분과 물의 질량이고 M_s 는 흡습성 성분의 그램분자량이다. f 는 van't Hoff 계수로 흡습성 성분의 용해를 나타낸다.

VI. VANAM M3 에어로졸 실험의 계산 모델

VANAM M3 실험은 흡습성 성분인 NaOH 에어로졸을 사용하여 수증기 용축조건에서 시간에 따른 에어로졸의 농도변화를 측정된 실험이다. 실험용기는 원

자로 격납건물과 유사한 구조를 가진 Battelle Model Containment이며 전체 구조는 Fig. 3에 보인 바와 같다. 용기내부는 콘크리트 벽으로 여러 개의 격실로 구분돼 있으며 격실간에는 관통구가 있어 기체가 유통될 수 있다. CONTAIN 2.0 코드 계산을 위해서는 각 용기내부를 단위방(cell)으로 세분하여야 하므로 실험용기를 Fig. 4와 같이 모형화 하였다. 실험용기의 R9는 상부의 돔과 외곽의 환형공간이 하나로 연결된 공간이나 3개(R9.1, R9.3, R9.4)의 단위방(cell)으로 나누었고, R4는 2개(R4.1, R4.2)로 나누었다. 단위방간에 표시된 점선은 실험용기에 벽이 없는 경우이고 실선은 콘크리트 벽이 있는 경우이다. 격실간을 연결하는 관통구는 기체의 유통이 일어나는 유통로(flow path)로 나타내었다. R5와 R3에는 에어로졸과 수증기를 주입하는 배관이 설치되어 있다. 하부에 위치한 단위방

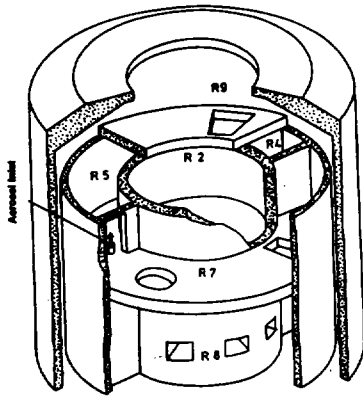


Fig.3 Battelle Model containment used for the experiment

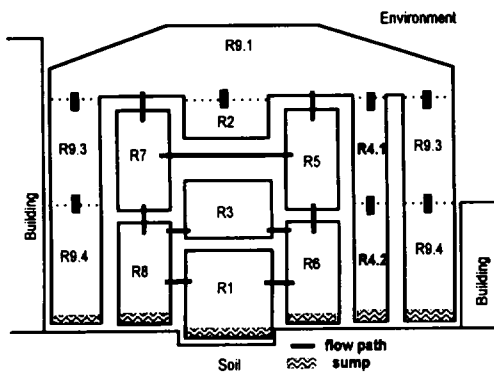


Fig. 4 Nodalization of the model containment

에는 벽면에 응축한 물이 모이는 집수조(sump)를 마련하였고 상부 단위방의 응축수는 자동적으로 바로 아래에 위치한 단위방의 집수조로 이동되는 것으로 가정하였다. 실험용기의 외부경계는 대기(environment)와 실험제어건물(building) 그리고 지면(soil)으로 나타내었다.

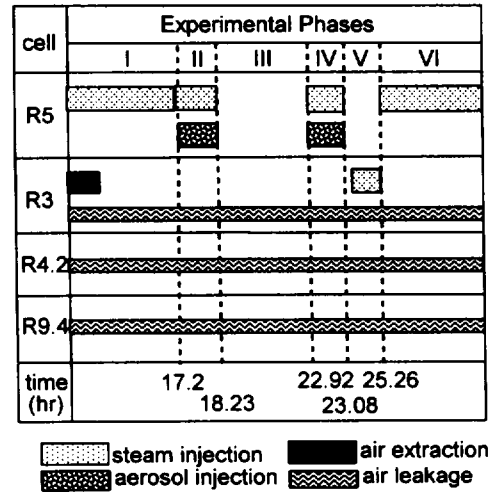


Fig. 5. VANAM M3 experimental phases

실험의 전 과정은 Fig. 5에 보인바와 같이 여섯 단계로 나누어진다. 제 I단계(1.13-17.2hr)는 R5를 통하여 수증기를 주입하여 용기내부를 가열하는 과정이다. 주입된 수증기가 용기의 구석까지 확산되도록 하기 위하여 R3를 통하여 공기의 일부를 배출하였다. I단계 후 용기내부의 온도는 환형공간(R9.3, R9.4)은 22 °C, 나머지는 25 °C로 되었다. 제 II단계(17.2-18.23 hr)는 R5를 통하여 NaOH 에어로졸이 수증기와 혼합되어 주입되는 과정이다. 제 III단계(18.23-22.92 hr)는 모든 주입이 중단되고 이미 주입된 에어로졸이 자연 감소하는 과정이다. 제 IV단계(22.92-23.08 hr)에는 R5를 통하여 수증기와 에어로졸 혼합물이 재차 주입되었으며, 제 V단계(23.08-25.26 hr)의 처음 10분간은 모든 주입이 중단되었고 이후 R3를 통하여 다시 수증기가 보충 주입되었다. 제 VI단계(25.26-30 hr)에는 수증기 주입이 R3에서 R5로 전환되어 계속 유지되었다. 실험의 전 과정을 통하여 R3, R4.2, R9.4에서 일부 기체의 누출이 지속적으로 발생한 것으로 추정하였다.

VANAM M3 실험의 시간에 따른 에어로졸 농도변화를 계산하기 위해서는 격실간의 기체 유통, 온도 및 압력변화, 기체와 벽간의 열전달, 수증기의 벽면 응축 등 열수력 계산을 동시에 실시하여야 한다. CONTAIN

Table 1. Aerosol injection rates and properties

Parameters	1st injection (Phase II)	2nd injection (Phase IV)	
Duration of injection (hr)	17.2 - 18.23	22.92 - 23.08	
Total injected mass (kg)	2.21	0.719	
Injection rate (kg/s)	1.28×10^{-3}	1.25×10^{-3}	
Initial size distribution based on particle diameter (d)	$m(d) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\ln^2(d/d_m)}{\ln^2 \sigma_g}\right)$		
Mass median diameter (d_m)			0.2 μm
Geometric standard deviation (σ_g)			1.9
NaOH density (kg/m^3)			2130
Molecular weight (kg/mol)			0.04
van't Hoff factor (f)			2.0

코드 계산에 필요한 입력자료인 실험용기 규격, 구조 재료의 물성치, 격실간 유통로의 크기, 수증기 주입률 및 물성치, 공기 및 기체의 배출률과 누출률 등에 관한 자료는 ISP-37⁽¹²⁾에 제공된 자료를 사용하였다. NaOH 에어로졸 주입률과 물성치는 Table 1에 주어진 바와 같다.

VII. 계산결과 및 분석

흡습성 에어로졸에 대한 변동구간분할법(Moving Sectional Method)의 상대적 정확성을 평가하기 위하여 기존의 모델인 고정구간분할법(Fixed Sectional Method)도 함께 사용하여 두 가지 계산을 실시하였다. 에어로졸 농도의 실험자료는 R9.1, R3, R9.3에 대해서만 제공되었기 때문에 이들에 대해서 계산결과와 실험자료를 비교하였다.

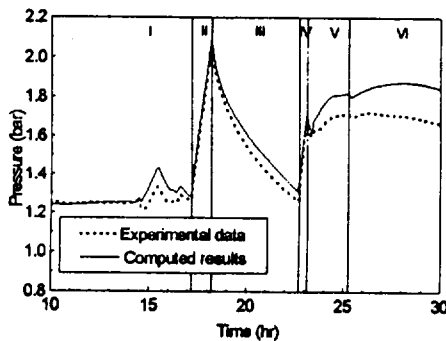


Fig. 6 Calculated containment pressure

Fig. 6은 실험용기의 압력변화를 계산한 결과이다. 코드 계산결과는 제 III단계와 V, VI단계에서 실험자료보다 최대 0.4 bar 정도 높은 값을 보이고 있다. Fig. 7은 R9.1, R9.3, R3의 온도변화를 계산한 결과이다. R9.1과 R9.3의 온도는 제 IV단계까지는 비교적 실험자료에 근접한 결과를 보이고 있으나 그 이후는 실험자료보다 약 10-15%정도 높은 값을 보이고 있다. R3의 온도는 제 I단계와 IV단계를 제외한 전 시간대에 걸쳐 실험자료보다 최대 20%정도 높은 값을 예측하였다. 온도와 압력은 변동구간분할법을 사용한 경우와 고정구간분할법을 사용한 경우에 계산결과는 거의 일치하였기 때문에 한 가지 계산결과만 제시하였다.

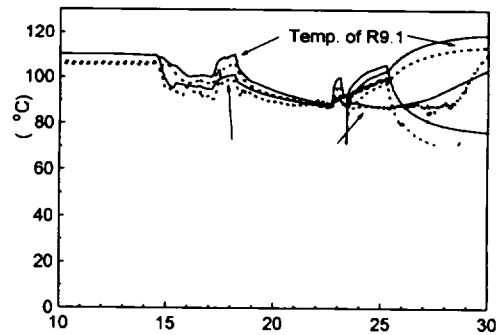


Fig. 7 Calculated temperatures in R9.1, R9.3, R3R3

Fig. 8은 R9.1, R9.3, R3에서 수증기 포화비 변화를 계산한 결과이다. 포화비 역시 두 모델의 계산결과가 거의 일치하였기 때문에 제시된 계산결과는 변동구간

분할법에 의한 것이다. 포화비는 정확한 실험자료가 제공되지 않아서 계산결과의 정확도는 평가할 수 없으나 수증기 응축률에 직접적인 영향을 미치는 열수력 계산결과로서 에어로졸 자연 감소가 일어나는 III 단계와 V, VI 단계에서의 변화가 주목된다. III 단계 동안은 R9.1, R9.3, R3 모두 포화비가 1.0(즉 상대습도 100%)보다 작은 값을 보이고 있으나 V 단계 중반 이후와 VI 단계에서 R9.1과 R3에서는 수증기가 거의 포화상태임을 알 수 있다. 그러나 R9.3의 포화비는 1보다 상당히 낮은 값이다.

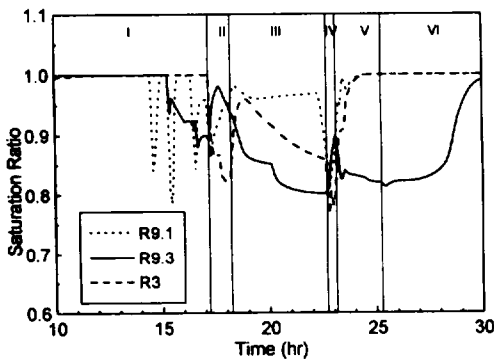


Fig. 8 Calculated steam saturation ratios

Fig.9-Fig.11은 각각 R9.1, R9.3, R3에서의 NaOH 에어로졸의 농도변화를 비교한 것이다. 실험자료에 의하면 III 단계 초기에 R9.1에서 에어로졸 농도는 급속히 감소하고 있다. 이때의 급속한 에어로졸 감소는 수증기 응축에 의한 빠른 입자성장으로 중력침전이 가속화되었기 때문이다. 이 단계에서 수증기 포화비의 계산치는 0.95 정도로 불포화 상태다. 그럼에도 불구하고 변동구간분할모델(MSM)은 NaOH 에어로졸의

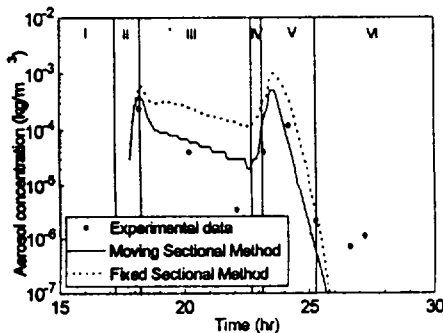


Fig. 9 Calculated NaOH aerosol concentration in the dome (R9.1)

성장에 의한 감소를 정확하게 예측하였으나 고정구간 분할모델(FSM)은 실제보다 10-40배 정도 높은 값을 예측하고 있다. FSM의 계산결과에 나타난 지수함수적 감소는 수증기 응축이 없는 상태에서 에어로졸이 감소하는 양상과 거의 일치한다. 이러한 양상은 R9.3과 R3 구역에서도 나타나고 있다. 3단계 초기 이들 구역의 포화비는 0.9이상으로 MSM은 수증기 응축에 의한 급속한 감소를 짧은 시간동안이나마 계산하였으나 FSM의 계산결과에는 거의 보이지 않고 있다. III 단계 후반부에서 R3의 실험자료와 MSM 계산결과간의 큰 편차는 열수력계산의 오차에서 기인한 것으로 보인다. 이 때 수증기 포화비 계산치는 0.9 이하로 코드 계산에서는 수증기 응축성장이 거의 무시된다고 볼 수 있다. 그럼에도 불구하고 실험자료에서 급속한 에어로졸 감소가 발생한 것을 보면 열수력계산에서 포화비를 실제보다 낮게 계산하였거나 다른 격실로 유출된 에어로졸의 양을 정확하게 계산하지 못한 것으로 추정된다.

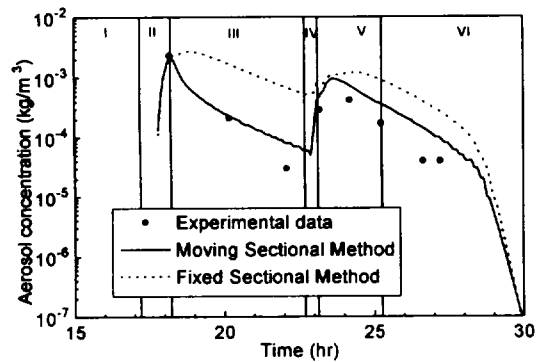


Fig. 10 Calculated NaOH aerosol concentration in R9.3

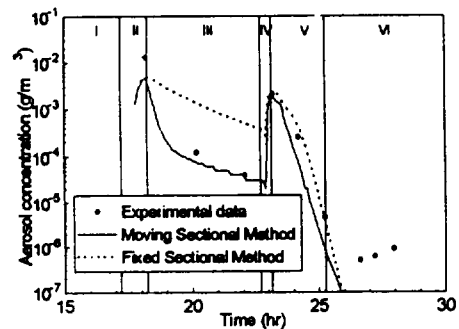


Fig. 11 Calculated NaOH aerosol concentration in R3

실험 V단계와 VI단계에서 R9.1과 R3에서는 급속한 에어로졸 감소가 일어나고 있으며 MSM과 FSM 모두 비교적 정확하게 예측하고 있다. 이 때 수증기 포화비의 계산치는 약 1.0으로 거의 포화상태이다. 포화조건 근처에서는 FSM은 비교적 정확하게 수증기 응축성장을 계산할 수 있음을 알 수 있다. VI 단계 말미에 실험자료의 값이 의외로 높게 나타난 것은 측정오류로 보고되었다. R9.3의 에어로졸 감소양상은 수증기 응축이 없는 건조한 에어로졸의 감소와 유사한 경향을 보이고 있다. 이 때 포화비 계산치를 보면 V단계 초기의 극히 짧은 시간을 제외하면 수증기 응축이 계산되지 않는다고 볼 수 있다. MSM의 계산결과는 다소 과대 예측을 하였으나 III단계 후반의 오차를 무시한다면 거의 실험자료에 근접한다고 볼 수 있다. VI단계 후반에 포화비가 급격히 증가함에 따라 MSM과 FSM 모두 빠른 에어로졸 감소를 예측하고 있다.

Ⅶ. 결 론

에어로졸 거동 계산 모델인 변동구간분할법(Moving Sectional Method)과 고정구간분할법(Fixed Sectional Method)을 사용하여 흡습성을 지닌 NaOH 에어로졸의 수증기응축 조건에서의 거동을 해석하였으며, 이를 통하여 두 모델의 정확성을 평가하였다. 계산에 사용된 전산코드는 최근에 발표된 CONTAIN 2.0 코드이고 실험자료는 VANAM M3 실험을 이용하였다. 해석 결과에 의하면 변동구간분할법은 수증기 불포화 상태에서 발생하는 흡습성 에어로졸의 수증기 응축 성장과 그에 따른 급속한 감소를 비교적 정확하게 계산하였으나 고정구간분할법은 실제보다 현저하게 느린 에어로졸 감소를 예측하였다. 이러한 경향은 수증기 포화도가 낮은 경우에 더욱 두드러졌다. 그러나 수증기가 거의 포화상태에 이르면 고정구간분할법도 상당히 정확한 계산을 할 수 있음을 발견하였다.

참 고 문 헌

(1) F. Gelbard, "Aerosol growth in a nuclear reactor containment environment", SAND-87-09430 1987.
 (2) S. L. Thompson, MELCOR 1.8.3: Reference

Manual and Programmer's Guide, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM 1992.
 (3) K.K. Muratta, CONTAIN 1.2 Code Reference Manual: A computer Code for Severe Accident Analysis (Draft for Review), Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 1993.
 (4) F. Gelbard, MAEROS User's Manual, SAND80-0822, NUREG/CR-1391, 1982.
 (5) M. Firmhaber, et.al., International Standard Problem ISP37, OECD/GD(97)16, NEA/CSNI/R(96)26, 1996.
 (6) F. Gelbard, "Modeling Multicomponent Aerosol Particle Growth by Vapor Condensation", Aerosol Sci. and Tech. 12, pp.399-412, 1990.
 (7) T. Kanzleiter, VANAM M3 Aerosol Experiment, Technical Report BleV- R67.098-304, Battelle, Frankfurt, 1993.
 (8) K.K. Muratta, et al., User's Guide for CONTAIN 2.0: A Computer Code for Nuclear Reactor containment Analysis, NUREG/CR-6533, 1997.
 (9) S. Simons, "The Condensation, coagulation and deposition of a multi-component radioactive aerosol", Annual Nuclear Energy, 9, pp. 473-479, 1982.
 (10) F. Gelbard and J.H. Seinfeld, "Simulation of Multi-component Aerosol Dynamics", J. Colloid and Inter. Sci. 78, pp. 485-501 1980.
 (11) R. J. Mason, *Clouds, Rain and Rainmaking*. Cambridge University Press, Cambridge, 1962.
 (12) S. Firmhaber, et. al., Specification of the International Standard Problem ISP 37, GRS, Colon 1995.