

## 액체금속로용 3차원 다군 노달 확산코드 개발

김영일, 김상지, 김영균, 김영진

한국원자력연구소

대전광역시 유성구 덕진동 150

e-mail: yikim1@nanum.kaeri.re.kr

### 요 약

STEP 코드는 액체금속로 노심해석을 위해 개발된 3차원 다군 노달 확산코드로 각 원소별 미시적 단면적자료와 수밀도로부터 노심 구성물질에 대한 거시적 단면적 자료를 구하여 중성자속 계산에 사용하고 있다. 열수력계산 모듈이 들어 있어 중성자속 계산과 함께 연계계산을 통하여 핵연료온도와 냉각재온도 변화에 따른 반응도 케환효과를 고려해 줄 수 있다. 열출력이 392 MWt인 칼리머 중식특성 노심에 대한 검증계산을 수행한 결과 DIF-3D 노달 계산결과와 잘 일치하였으며 모의 노심구조에 대한 시험계산을 통하여 열수력 계산기능이 잘 동작함을 확인하였다.

### Abstract

STEP is a three-dimensional multigroup nodal diffusion code for the neutronics analysis of the LMR core and accepts microscopic cross section data. Material cross sections are obtained by summing the product of atom densities and microscopic cross sections over all isotopes comprising the material. STEP contains a thermal-hydraulics module which enables feedback effects from both fuel temperature and coolant temperature changes. Numerical results of the STEP code over the KALIMER core (392 MWt) agree well with those of DIF-3D. And it has been observed that the thermal-hydraulics module is working properly.

### 1. 서론

본 연구에서는 열수력 케환효과를 고려해 줄 수 있는 액체금속로용 3차원 다군 노달 확산코드 STEP을 개발하였다. 노달 방법에는 크게 다차원 노달 확산식을 횡방향으로 적분하여 구한, 등가의

일차원 노달확산식을 푸는 방법과 노드 경계조건과 노드 평균 중성자속 등의 노달인자를 다차함수나 해석함수 등으로 대용시키는 방법의 두 가지를 들 수 있다. 횡방향 격분을 사용하는 전자는 보다 최근에 개발된 후자에 비해 정확도는 떨어지지만 고속로의 경우 그 차이가 매우 작으므로 STEP<sup>®</sup> 코드에서는 계산시간을 고려하여 DIF-3D 방법[1]과 HEXNOD 방법[2]을 사용하였다. 노달방정식은 핵분열 소스 반복계산에 의하여 푸는데 수렴속도를 가속화하기 위하여 거시격자 재균형 방법과 접근 외삽법(Asymptotic Extrapolation)을 사용하였다.

STEP<sup>®</sup> 코드의 열수력 계산모듈은 액체금속로용 2차원 노심 동특성 분석코드 FX2-TH[3]의 열수력 계산모듈을 3차원으로 확장한 것으로 각 노드별로 평균 핵연료온도와 냉각재온도를 계산한다. 이들 평균 온도는 중성자속 계산과 열수력 계산을 반복적으로 연계해서 수행하여 구하는데 핵연료의 경우 도플러효과에 의해 핵분열 단면적과 중성자 포획단면적에 영향을 주며 냉각재의 경우 수밀도 변화에 따라 중성자 포획단면적과 산란단면적을 보정해 줄 수 있다.

STEP<sup>®</sup> 코드는 현재 액체금속로 노심분석에 사용되고 있는 표준 핵자료 라이브러리인 CCCC 패트[4]의 다군 미시적 단면적 자료를 처리할 수 있다. 각 물질의 거시적 단면적은 이를 구성하고 있는 모든 원소의 수밀도와 미시적 단면적 자료의 곱을 합하여 계산되며 핵분열에 의한 열방출뿐만 아니라 중성자포획에 의한 열방출도 고려하고 있다.

2절에는 STEP<sup>®</sup> 코드의 중성자속 및 열수력 계산 방법과 온도변화에 따른 반응도 케환효과 모델이 간략히 기술되어 있으며 다음 3절에는 검증계산 결과를 기술하였으며 마지막 4절은 이 논문을 결론짓고 있다.

## 2. 해석 모델

### 2.1 육방형 노달 확산모델

노달 방법에는 크게 다차원 노달 확산식을 횡방향으로 격분하여 구한 등가의 일차원 노달확산식을 푸는 방법과 노드 경계조건과 노드 평균 중성자속 등의 노달인자를 다차함수나 해석함수 등으로 대용시키는 방법의 두 가지를 들 수 있다. 이들 방법 중 고속로 노심 동특성 분석시의 효율성 및 정확도를 고려하여 횡방향 격분을 이용하는 DIF3D 방법과 HEXNOD 방법을 사용하여 3차원 노달확산 코드를 작성하였다. DIF3D 방법은 노달확산식을 횡방향에 대하여 격분하여 얻은 1차원 중성자 확산식을 풀기 위하여 1차원 중성자속을 다차함수로 근사하고 있으며 HEXNOD 방법은 1차원 중성자 확산식 전개시 육각형 집합체 구조의 특이점 때문에 횡방향 중성자누출항에 추가로 존재하는 항을 무시하여 사각형 집합체에서와 같은 1차원 중성자 확산식으로 놓고 소스와 횡방향 중성자누출을 2차함수로 근사한 후 해석적으로 푼다.

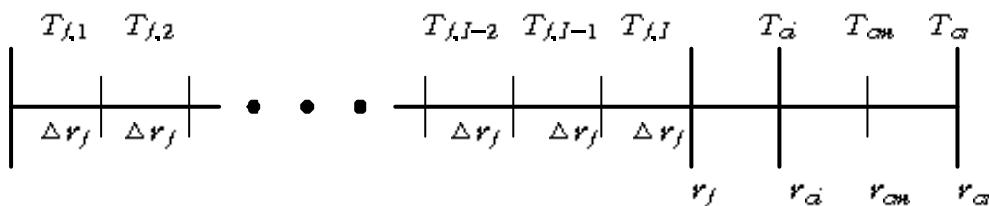
노달방정식은 핵분열 소스 반복계산에 의하여 푸는데 수렴속도를 가속화하기 위하여 거시격자 재균형 방법과 접근 외삽법(Asymptotic Extrapolation)을 사용하였다. 각 핵분열 소스 반복계산에

서는 주어진 그룹별 소스를 사용 반응행렬식을 풀어 부분중성자류를 계산한 후 중성자속 모멘트를 계산하는 내부 반복계산을 수행하게 된다. 이때 내부 반복계산은 공간적으로 나누어 수행되는 데 우선 축방향으로 출수 평면에 대해 계산을 수행하고 난 다음 이 계산결과를 사용하여 짐수 평면에 대해 계산을 수행한다. 각 평면에서의 계산은 이 평면의 각 노드를 다시 몇 가지 색깔로 분류하여(Red-Black Ordering) 계산을 수행한다. DIF3D 방법 계산시 유출 부분중성자류는 반경방향과 축방향으로 나누어 계산하는데 먼저 반경방향에 대해 계산한 후 여기서 얻어진 값을 횡방향 중성자누출로 하여 축방향 유출 부분중성자류를 계산하게 된다. 반면 HEXNOD 방법 계산에서는 모든 방향에 대해 한꺼번에 계산하고 있다.

## 2.2 열수력 계산모델

중성자속은 육각형 집합체를 축방향으로 적절히 분할한 노드에 대해 노달확산식을 풀어 구하기 때문에 각 노드를 하나의 열수력 영역으로 정의하였다. 이때 각 열수력 영역은 완전히 독립적인 것, 즉 영역간에 열과 질량의 상호교환이 없는 것으로 간주한다.

핵연료와 냉각재 열전도 식을 직접 풀어 온도를 계산하는데 이때 각 열수력 영역에 대해 기체간극, 퍼복판, 그리고 이 주위로 냉각재가 흐르는 원통형의 평균 핵연료봉이 정의된다. 핵연료와 퍼복재내 온도를 계산하기 위하여 우선 퍼복재 외부 표면에서의 온도  $T_\sigma$ 를 알고 있다고 가정한다. 그리고 다음 그림과 같이 핵연료는 반경방향으로 1개의 등간격으로 나누고 퍼복재는 2개의 등간격으로 나눈다.



핵연료내 각 영역별 온도는 다음의 열전도식을 유한차분법으로 풀어 구하게 된다:

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} rk_f \frac{\partial}{\partial r} T_f(r) = q(r) \quad (1)$$

여기서

$T_f(r)$  = fuel temperature at point  $r$  along the fuel pin radius ( $^{\circ}\text{C}$ )

$k_f$  = fuel thermal conductivity (watts/cm $^{\circ}\text{C}$ )

$q(r)$  = volumetric power generation rate at point  $r$  along the fuel pin radius  
(watts/cm $^3$ )

$\rho_f C_f$  = fuel specific heat density (watt-sec/cm $^3\text{-}^{\circ}\text{C}$ )

$T_{f,i}$ 를 영역  $i$ 에서의 평균 핵연료온도,  $\rho C_{f,i}$ 와  $k_{f,i}$ 를 각각 영역  $i$ 에서의 평균  $\rho C$ 와  $k_f$ 라 하면 식 (1)을 다음과 같이 유한차분식의 형태로 나타낼 수 있다:

$$\begin{aligned} & -\frac{2k_{f,i}k_{f,i+1}r_{i+1}}{\Delta r(k_{f,i}+k_{f,i+1})}(T_{f,i+1}-T_{f,i}) \\ & + \frac{2k_{f,i-1}k_{f,i}r_i}{\Delta r(k_{f,i-1}+k_{f,i})}(T_{f,i}-T_{f,i-1}) = q_i \frac{(r_{i+1}^2 - r_i^2)}{2} \end{aligned} \quad (2)$$

식 (2)를 풀어 핵연료 영역별로 온도를 계산하게 되며 괴복재에 대해서는 세 지점에서의 온도를 구하는데  $T_\alpha$ 는 괴복재의 왼쪽 표면,  $T_{\alpha m}$ 은 중앙,  $T_\beta$ 는 괴복재 바깥 표면에서의 온도를 나타낸다. 앞의 핵연료온도를 구하는 방법에서와 마찬가지 형태의 열전도 식을 풀어 구하게 된다.

핵연료의 열전도도와 비열은 각 영역에서의 평균 핵연료온도의 다차함수로 표현된다. 핵연료온도는 수렴할 때까지 반복계산을 수행하여 구한다. 핵연료온도 변화에 따른 도플러효과를 고려해주기 위하여 평균 핵연료온도가 사용되는데 이는 다음과 같이 구한다:

$$T_{f,av} = \frac{\sum_{i=1}^I (r_{i-1} + r_i) T_{f,i}}{\sum_{i=1}^I (r_{i-1} + r_i)} \quad (3)$$

앞에서 계산된 핵연료온도는 각 열수력 영역에서의 평균 온도이지만 냉각재에 대한 온도는 영역 경계면에서의 값이 구해지게 된다. 평균 냉각재온도는 이들 경계면에서의 온도를 평균하여 구한다. 정상상태에서 냉각재온도에 대한 계산은 질량과 에너지 연속조건으로부터 얻어지는 다음 식을 이용하여 풀게 된다:

$$GC_t \frac{\partial}{\partial z} T_f(z) = \gamma \phi(z) \quad (4)$$

여기서

$G(z)$  = coolant mass flow rate for this channel ( $\text{g/cm}^2\text{-sec}$ )

$C_t$  = coolant specific heat ( $\text{watt}\cdot\text{sec/g}\cdot^\circ\text{C}$ )

$T_f(z)$  = coolant temperature ( $^\circ\text{C}$ )

$\gamma$  = ratio of the surface area of cladding to the volume of the coolant ( $\text{cm}^{-1}$ )

$\phi(z)$  = heat flux ( $\text{watts/cm}^2$ )

생성되는 모든 출력은 냉각재온도를 상승시키는데 사용되므로 열속에 대하여 다음과 같은 식이 얻어진다:

$$\gamma \phi(z) = \frac{P(j)}{\Delta z_j A_t} \quad (5)$$

여기서

$P(j)$  = total power produced in this fuel pin in axial mesh region  $j$  (watts)

$\Delta z_j$  = length of axial mesh region  $j$  (cm)

$$A_t = \text{coolant flow area (cm}^2)$$

식 (4)를  $z_k$ 에서  $z_{k+1}$ 까지 적분하면 다음 식을 얻는다.

$$T_f(z_{k+1}) = T_f(z_k) + \frac{\Delta z_k \rho \phi(z)}{QC_t} \quad (6)$$

핵연료온도와 냉각재온도는 열속, 퍼복재 표면온도와 다음과 같은 관계를 가진다:

$$T_\alpha(z) = T_f(z) + \frac{\phi_c(z)}{h_c} \quad (7)$$

여기서

$$\phi_c(z) = \frac{T_{cm}(z) - T_f(z)}{R_{ec}(z)} \quad (8)$$

이고

$$T_{cm}(z) \quad \text{clad midpoint temperature at } z (\text{°C})$$

$$T_f(z) \quad \text{coolant bulk temperature at } z (\text{°C})$$

$$R_{ec}(z) = \frac{1}{h_c} + \frac{\Delta r_c}{2k_c} \quad \text{convection-film heat transfer coefficient (watt/cm}^2\text{-°C)}$$

$$\Delta r_c \quad \text{clad thickness (cm)}$$

$$k_c \quad \text{clad thermal conductivity (watts/cm}^2\text{-°C)}$$

위에서 계산된 열속  $\phi_c(z)$ 는  $T_f(z)$  계산값과 함께 퍼복재 표면온도  $T_\alpha(z)$ 를 새로 계산하는 데 사용되게 된다. 다음에는 핵연료온도가 계산되게 된다.

그림 1은 열수력 계산흐름을 간략히 보여주고 있다. 우선 열속  $\phi(z)$ 를 식 (5)로부터 계산하고 다음 식 (6)을 사용하여 냉각재온도를 계산한다. 이로부터 열전달계수  $h_c$ 와 퍼복재 표면온도  $T_\alpha$ 를 계산하게 된다. 다음에 영역별 핵연료온도는 식 (2)로부터 계산하고 최종적으로 식 (3)과 같이 평균 핵연료온도를 구한다. 이 계산은 냉각재 노심 출구온도가 수렴할 때까지 반복적으로 수행된다.

### 2.3 반용도 계획효과 모델

액체금속로 노심분석에 사용되고 있는 단면적 라이브러리는 CCCC 포맷 파일인 ISOTXS를 사용하고 있다. ISOTXS 파일로부터 읽어 들인 각 원소의 미시적 단면적자료를 사용하여 물질별 거시적 단면적 자료를 다음과 같이 구하게 된다:

$$\Sigma_{m,g} = \sum_{i=1}^{MS} \sigma_{i,g} N_{i,m} \quad (9)$$

여기서

$$\Sigma_{m,g} = \text{macroscopic cross section of material } m \text{ in energy group } g (\text{cm}^{-1})$$

$\sigma_{i,g}$  = microscopic cross section of isotope  $i$  in energy group  $g$  ( $\text{cm}^2$ )

$N_{i,m}$  = atom density of isotope  $i$  of material  $m$  ( $\text{cm}^{-3}$ )

$NISO$  = number of isotopes in material  $m$ .

물질의 측발중성자 스펙트럼은 각 영역에서 중성자속은 일정하다고 가정하여 다음과 같이 계산되고 있다.

$$\chi_{m,g} = \frac{\sum_{i=1}^{NISO} \chi_{i,g} N_{i,m} \sum_{g'=1}^{Ng} (\nu\sigma_i)_{g'}^i}{N_{i,m} \sum_{g'=1}^{Ng} (\nu\sigma_i)_{m,g'}^i} \quad (10)$$

핵연료온도 변화는 도플러효과를 통해 미시적 단면적에 영향을 주게 되는데 포획단면적과 핵분열단면적만을 고려해 주고 있다. 이를 위하여 ISOTXS 파일에는 특정 원소에 대하여 네 핵연료온도에서의 미시적 단면적이 들어가게 된다. 물질을 구성하고 있는 각 원소의 수밀도와 미시적 단면적자료로부터 각 온도별 거시적 단면적이 구해지고 이로부터 다음과 같이 핵연료온도 채환계수  $C_{m,g}^{P,i}$  ( $i=1, 2, 3$ )가 계산되어 도플러효과를 고려해 주게 된다:

$$\begin{aligned} \Sigma_{m,g}^P(T_f) &= \Sigma_{m,g}^P(T_0) + C_{m,g}^{P,1} \cdot (\sqrt{T_f} - \sqrt{T_0}) \\ &\quad + C_{m,g}^{P,2} \cdot \ln(T_f - T_0) \\ &\quad + C_{m,g}^{P,3} \cdot \left( \frac{1}{T_f} - \frac{1}{T_0} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

여기서

$\Sigma_{m,g}^P(T_f)$  = macroscopic cross section for process  $P$  (capture or fission) for material  $m$  and group  $g$  at temperature  $T_f$

$\Sigma_{m,g}^P(T_0)$  = macroscopic cross section for process  $P$  for material  $m$  and group  $g$  at reference temperature  $T_0$

$C_{m,g}^{P,i}$  =  $i^{\text{th}}$  fuel temperature feedback coefficient for process  $P$  for material  $m$  and group  $g$ .

냉각재온도 변화에 따른 냉각재 구성원소의 수밀도는 냉각재온도의 함수로 표시되므로 냉각재의 거시적 단면적이 다음과 같이 계산된다:

$$\Sigma_{m,g}^P(T_f) = \Sigma_{m,g}^P(T_0) + D_{m,g}^P(T_f - T_0) \quad (12)$$

여기서

$\Sigma_{m,g}^P(T_f)$  = macroscopic cross section for process  $P$  (capture, scattering) for material  $m$ , group  $g$  at temperature  $T_f$

$$\Sigma_{m,g}^P(T_0) = \sum_{i=1}^{NISO} \sigma_{i,g}^P N_{i,m}^0$$

$$D_{m,i}^P = \sum_{i=1}^{N^0} \sigma_{i,m}^P N_{i,m}^1$$

$N_{i,m}(T_t)$  = atom density for isotope  $i$  in material  $m$  at temperature  $T_t$   
 $N_{i,m}^1$  = atom density at reference temperature  $T_0$   
 $N_{i,m}^1$  = the first derivative of the atom density with respect to coolant  
 temperature for isotope  $i$  in material  $m$  (user input)  
 $T_0$  = base coolant temperature

핵연료물질에 대해서는 핵연료온도에 따라 포획단면적과 핵분열단면적을 수정해 주게 되며 냉각재에 대해서는 포획단면적과 산란단면적을 수정해 주고 있다. 온도변화에 따른 이들 단면적의 변화는 수송단면적 계산시에도 고려된다.

### 3. 검증 계산

열출력이 392 MWt인 칼리어 중식특성 노심에 대하여 검증계산을 수행하였다. 그림 2에서 보는 바와 같이 이 노심은 중앙 핵연료집합체 주위를 11개의 핵연료집합체 링이 둘러싸고 있는 구조로 핵연료집합체 간격은 16.186cm이고 유효높이는 120cm이며 아래와 윗쪽 블랭킷 영역의 높이는 각각 111.76cm, 157.54cm이다. 9 중성자 그룹을 사용하였으며 축방향으로 아래 블랭킷 영역은 22개, 핵연료집합체 영역은 25개, 윗쪽 블랭킷 영역은 32개로 나누어 계산하였다. STEP 계산 결과 그림 3에 나타나 있는 바와 같이 핵연료집합체별 상대출력 차이가 DIF-3D와 0.007 이내에서 잘 일치하였다.

열수력 계산모델이 제대로 작동하는지를 알아보기 위하여 중앙 핵연료집합체 주위를 6개의 집합체 링이 둘러싸고 있는 모의 노심구조를 구성 FX2-TH 코드 계산결과와 비교하였다. 그림 4에서 보는 바와 같이 맨 바깥 링은 반사체로 구성되어 있고 그 안쪽 2개 링에는 블랭킷이 위치하고 있으며 나머지 안쪽은 핵연료집합체가 장전되어 있는 것으로 가상하였다. FX2-TH 코드는 2차원 미시격자 코드인 반면 STEP 코드는 3차원 노달 확산코드이므로 직접적인 비교가 어려워 노심을 축방향으로 1개의 평면으로 놓고 계산하였다. FX2-TH 계산은 핵연료집합체를 반경방향으로 6개의 삼각형으로 분할하여 수행하였다. 그림 4에는 집합체별 평균 핵연료온도와 냉각재온도가 비교되어 있다. FX2-TH 계산값은 각 삼각형 노드값을 집합체별로 산술 평균하여 구한값으로 그림에서 보는 바와 같이 두 코드 계산 결과가 잘 일치함을 보여주고 있다.

### 4. 결론 및 향후 계획

본 연구에서는 액체금속로 노심 핵특성 분석용 STEP 코드를 개발하였다. 이 코드는 노달방법을 사용하는 3차원 다중 확산코드로 CCCC 포맷의 미시적 단면적 라이브러리의 처리가 가능하고 열

수력계산 모듈이 포함되어 있어 중성자속 계산과의 연계계산을 통하여 핵연료온도와 냉각재온도 변화에 따른 도플러효과와 냉각재 수밀도 변화 등의 반응도 계획효과를 고려해 줄 수 있다.

향후 천이상태 중성자속 계산모듈을 개발하여 이 코드와 결합시켜 액체금속로 노심 등특성 분석용 독자코드로 확장시킬 계획이다.

### 감사의 글

이 논문은 대한민국 과학기술부에서 시행하는 원자력중장기사업의 지원으로 수행되었습니다.

### 참고문헌

1. R. D. Lawrence, "The DIF3D Nodal Neutronics Option for Two- and Three- Dimensional Diffusion Theory Calculations in Hexagonal Geometry," ANL-83-1, Argonne National Laboratory (1983).
2. M. R. Wagner, "Three-Dimensional Nodal Diffusion and Transport Theory Methods for Hexagonal-z Geometry," Nucl. Sci. Eng., 103, 377-391 (1989).
3. R. A. Shober, T. A. Daly, and D. R. Ferguson, "FX2-TH: A Two-Dimensional Nuclear Reactor Kinetics Code with Thermal-Hydraulic Feedback," ANL-78-97, Argonne National Laboratory (1978).
4. R. D. O'Dell, "Standard Interface Files and Procedures for Reactor Physics Codes, Version IV," LA-6941-MS, Los Alamos Scientific Laboratory (1977).

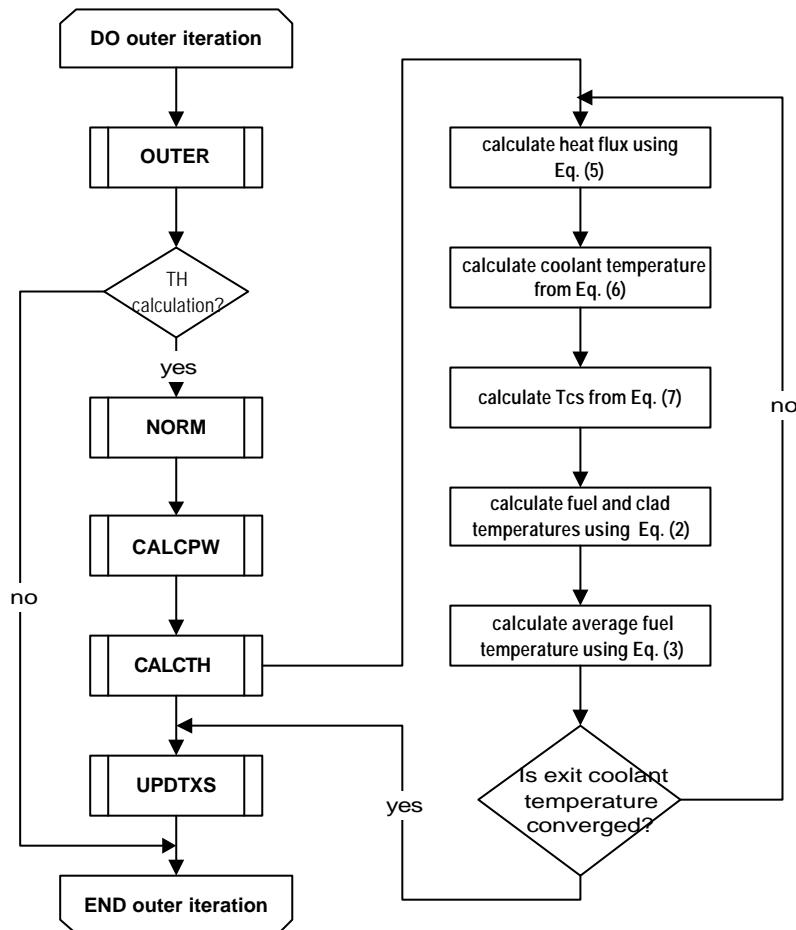


그림 1. 중성자속 계산과 열수력 계산 연계 흐름

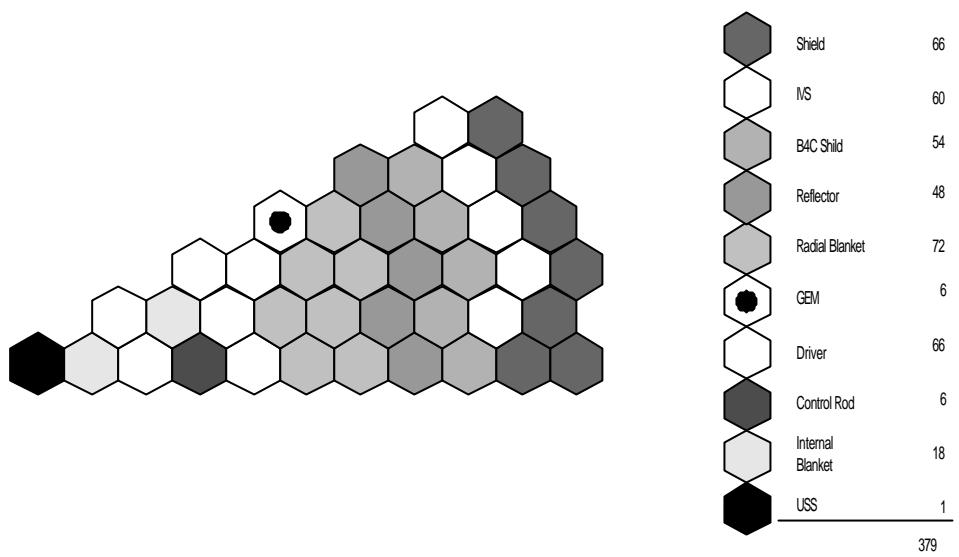


그림 2. 1/6 칼리머 중식특성 노심 장전모형

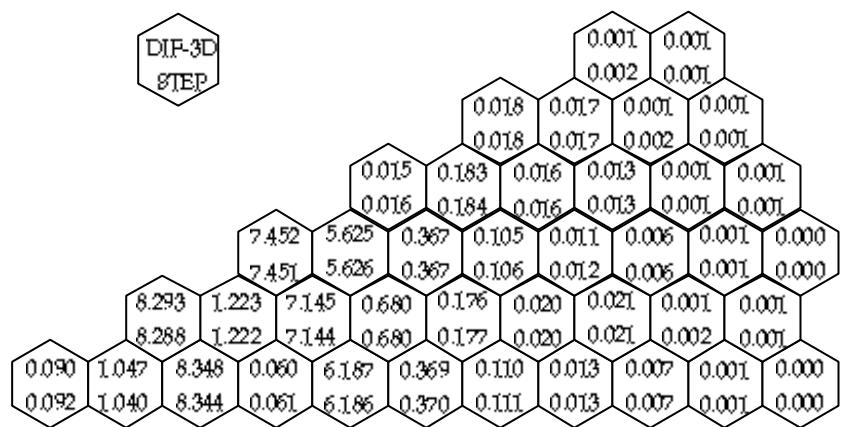


그림 3. 핵연료집합체별 상대출력 분포

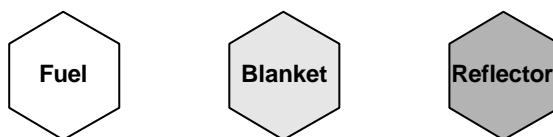
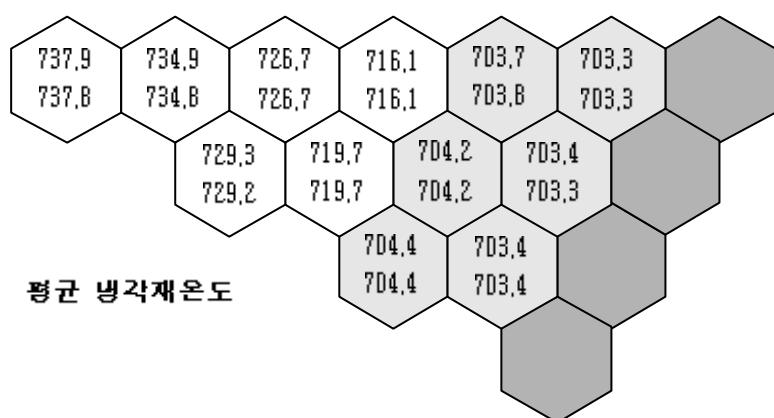
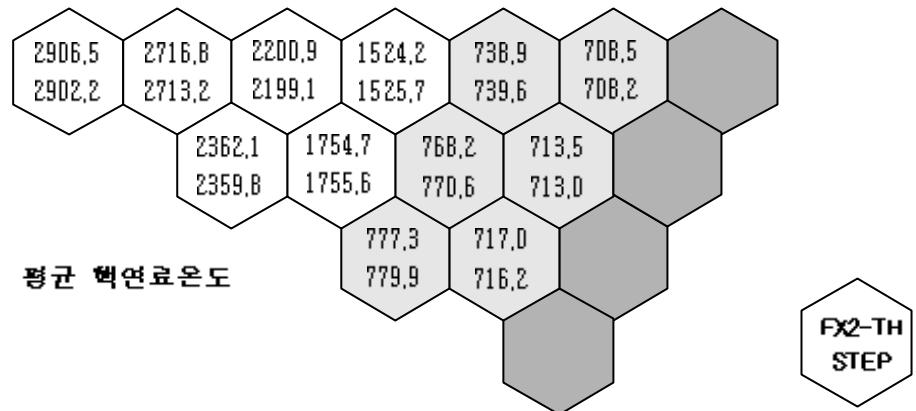


그림 4. 핵연료온도 및 냉각재온도 계산결과