Understanding and Their Application of GoldSim Transport Pathways to Mass Trasport Simulation

질량 이동 모사 프로그램 개발을 위한 골드심 이동 패쓰웨이의 이해와 활용

Youn-Myoung Lee* and Jongtae Jeong

Korea Atomic Energy Research Institute, 111 Daedudok-daero 989, Yuseong-Gu, Daejeon, Korea

이연명*, 정종태

한국원자력연구원, 대전광역시 유성구 대덕대로 989번길 111

(Received October 28, 2013 / Revised December 19, 2013 / Approved December 20, 2013)

It is very important to properly understand such “Transport Pathways” elements as “Pipe” and “Cell” pathways in commercial GoldSim Transport Module (GTM) for developing higher quality models and programs for performance assessment of complex radioactive waste repositories. With an illustrative case under an earthquake scenario, by which an increase in the groundwater flow rate occurs through the geological medium, ways of avoiding possible modeling errors in the nuclide transport modeling in the radioactive waste repository system for its safety assessment by utilizing such pathways are discussed and a proper usage of the pathways is proposed.

Keywords: GoldSim (GTM), Nuclide transport pathway, Modeling methodology

상용의 GoldSim과 GoldSim 이동 모듈 (GoldSim Transport Module; GTM)을 이용하여 방사성폐기물 처분시스템과 같이 복잡한 질량 이동 시스템을 신뢰성 있고 효율적으로 모사할 수 있다. 그러나 GTM의 특성을 보다 정확하게 이해하여야 이를 사용하여 실제 처분시스템의 안전성 평가 프로그램을 개발할 때 발생할 수 있는 오류를 피할 수 있다는 것을 인지하는 것이 중요하다. 이를 위하여 GTM에서 다양하게 제공되는 요소 (element) 중, 질량 이동 모사에 유용한 Transport pathway의 특징에 대하여 소개하고, 방사성폐기물 처분시스템 안전성 평가를 위해 시스템 내 핵종의 거동과 같은 질량 이동 모사에서 이에 대한 올바른 활용 방안을 제시하였다.

중심단어: GoldSim (GTM), 핵종 이동 모사 pathway, 모델링 방법론

*Corresponding Author.

Youn-Myoung Lee, Korea Atomic Energy Research Institute, E-mail: ymlee@kaeri.re.kr, Tel: +82-42-868-2853

1. 서론

골드심(GoldSim)[1]은 GoldSim Technology Group LLC에 의해 상용화된 물질 이동시뮬레이션 패키지로, 당초 미국 에너지성이 고준위폐기물 처분을 위한 야카마운틴 프로젝트(Yucca Mountain Project)를 지원하기 위해 개발된 것이다. 다양한 시스템에서의 물질 이동 모사(simulation)에 유용하도록 풍부한 범용성을 가지면서 개발자 및 사용자의 편의성을 증시하여 모사할 수 있도록 템플릿(template) 프로그램을 개발하는 도구이다. 어떤 시스템 내에서 물질이나 질량의 이동을 모사하는 경우, 이미 만들어진 다양한 요소(element)를 활용하여 비교적 용이하고 정확하게 모사할 수 있도록 한다. 주요 개발 언어로서의 FORTRAN이나 C 언어와 유사한 기능의 이 GoldSim은 사용자의 개발 의도에 맞게, 가령 방사성폐기물 처분시스템(처분시스템)의 안전성 평가 프로그램을 적절한 용도의 프로그램 템플릿 형태로 개발할 수 있게 하여, 준비된 입력자료를 이 템플릿에 적용하여 계산을 수행할 수 있도록 한다. 질량 이동이나 선원항 모델링을 위한 다양한 요소를 미리 제공하여 사용자가 이들을 적절히 조합하여, 여러 핵종 유출 시나리오 하에서 처분시스템의 안전성 평가를 위한 프로그램을 개발할 수 있도록 한다.

사용자에게 편리한 그래픽 유저 인터페이스와 함께, 다른 GoldSim 모델에서 이미 개발된 모듈이나, GoldSim에서 지원하는 다양한 요소들을 자유롭게 붙이거나 떼어 내, 프로그램 간 이식 사용이 가능하도록 하는 객체지향적(object-oriented)인 프로그래밍 방식은 FORTRAN이나 C와 달리 제한된 프로그래밍 언어 형태에 구애 받지 않고도 즉각적인 프로그래밍, 즉 모델링을 수행할 수 있도록 해 주어, 세계 여러 나라에서 다양한 분야에, 특히 처분시스템 안전성 평가 분야에 그 이용이 점차 증가하는 추세이다[2].

GoldSim은 현재 PC의 윈도우버전 플랫폼만으로 제공되지만 빠른 연산 속도와 사용자의 편리한 개발 환경, 그 무엇보다도 모델링 및 평가 대상이 되는 시스템을, 마치 위에서 입체적으로 조망하며 시스템 안에서 물질의 이동을 실제로 바라보듯 정확하게 모사할 수 있도록 하여 평가의 신뢰도를 증가시켜준다. 사용자가 미리 통일시킬 필요없도록 단위 체계를 자동으로 전환한다든지, 프로그램 실행시의 오류의 인지 기능이나 자가 진단 등 사용자편의를 위한 기능적 요소도 버전이 바뀔 때마다 풍부해지고 있다. 보다 중요한 기능

으로서, 시나리오와 모델, 입력 자료, 그리고 계산 결과 데이터나 그래프가 서로 다른 성질과 종류임에도 이들을 순차적이거나 혹은 중속적으로 처리하지 않고 프로그램의 한 평면 상에서 동시에 구성되어 상호 유기적으로 취급할 수 있도록 하여, 즉각적으로 프로그램이나 시나리오, 그리고 결과물의 형태까지도 사후 추가나 삭제가 가능하도록 한다. 뿐만 아니라 확률론적 민감도 분석이나 서로 다른 입력자료 값에 따른 결과의 상호 비교와 상이한 시나리오에 대한 동시 계산도 가능하다. 그리고 GoldSim에서 아직 지원하지 못하는 부분이나 외부의 다른 프로그래밍 언어로 작성된 프로그램을 동적 라이브러리 형태인 DLL(dynamic link library)을 통해 프로그램에 링크시킬 수 있도록 한다. Excel 스프레드시트로 만들어진 입출력 자료의 직접적인 연동도 가능하며, 타 프로그램에서 계산된 입력 자료의 무가공 연계도 가능하며, 범용 프로그램으로서 매우 편리한 개발 환경을 제공하고 있다.

이러한 GoldSim 프로그램은 당초 핵종이동 모사 뿐 아닌 모든 물질이동 분야에 대해 범용성을 가질 수 있도록 확장되면서 다양한 서브모듈을 별도로 준비하여 특정 분야에 맞는 모사 프로그램을 메인과 이 서브 모듈들을 조합하여 사용 가능하도록 서브 모듈 분야별로 다양하게 특화 시키고 있는데, 이 중 주요한 서브 모듈로서 GoldSim Contaminant Transport Module(이하 GTM)만을 이 논문에서는 논의하게 된다. 이 GTM은, 처분시스템이 갖는 다양한 매질과 인공 및 천연방벽에서의 핵종의 거동과 이동, 그리고 매질간 그리고 시스템 요소간 전달 등을 정확하고 편리하게 모사할 수 있도록 질량 이동을 위한 다양한 Transport pathway 요소를 제공한다. 처분시스템은 그 특성상 다양한 구조물의 형태나 재질로 인공 및 자연 방벽이 구성되어, 지질 및 생태계 매질 내에서의 핵종의 이동 및 거동은 매질 내 지하수의 유동이나 생태 환경 내 다양한 섭생 경로 등과 복잡한 형태로 상호 얽혀 있다. 이러한 시스템을 가능한 한 간략화하여 모델링하는 기존의 수치적 접근 방법과 달리, GTM은 시스템을 거의 그대로 두고 물질수지만을 맞춰가며 실제 관찰하듯이 질량 전달을 모사하고 평가할 수 있도록 한다.

이 연구의 목적은 이러한 상용의 GoldSim과 GTM 모듈(이하 이들을 GTM으로 묶어 통칭하기로 함)을 이용하여 처분 환경과 같이 복잡한 질량 이동 시스템을 모사할 때 GTM의 특성을 보다 정확하게 이해하여 실제 처분시스템의 안전성 평가 프로그램 개발시 발생할 수 있는 오류를 피하도록

제안하기 위한 것이다. 이를 위하여 GTM에서 제공되는 다양한 요소 중에서도 물질, 즉 질량의 이동에 관계하는 pathway, 이 중에서도 대표적인 두개의 주요한 pathway인 Pipe pathway와 Cell pathway에 논의를 국한하고 이에 대한 올바른 활용 방안을 제시하고자 한다.

이러한 의도는 실제로 GoldSim을 능숙하게 사용하는 사용자라도 GTM의 특성은 물론 이들 pathway의 성질과 용도를 정확히 이해하지 않은 채 타성적으로 기존의 수치 모델링과 같은 개념만으로 모델링하는 경우가 많고, 이러한 경우 특정한 시나리오에 대해서 정확한 모사가 가능하지 않는 경우가 있기 때문이다.

2. Pathway의 개념

질량의 이동 현상을 모사하기 위해 특화된 모듈로서의 GTM은 다양한 기능을 갖는 요소를 객체적 형태로 제공하여 사용자가 이를 적절히 조합하여 사용함으로써 신뢰성있는 모사적 프로그램을 직관적으로 개발할 수 있도록 한다. 핵종이나 오염물과 같은 물질, 즉 질량의 이동을 모사하는데 보다 적합하여, 처분시스템에서 처분장에 처분된 방사성폐기물의 장기적 영향으로서 인간에게 주는 영향, 즉 피폭 선량을 평가할 수 있도록, 처분시스템 안전성 평가를 평가할 수 있는 템플릿 프로그램을 보다 쉽게 개발하도록 해준다.

GTM은 매질 내에서의 질량의 이동을 모사할 수 있도록 제공되는 요소로서 pathway를 다양하게 제공하고 있다. 이렇게 질량의 이동에 관여하는 Pathway로는, Pipe나 Cell 외에도 이 둘의 장점을 이용해 제공되는 Aquifer pathway나 균열 암반과 같이 복잡한 균열 매질의 일차원적 네트워크 모델을 다중 pipe의 네트워크로 접근할 수 있도록 하는 network pathway 등, 여러가지 물리적인 형태를 갖고 있는 매질 내에서의 질량의 이동이나 보유를 적절히 모사하고 표현할 수 있도록 다양하게 제공하고 있다. 사용자는 단지 이들 pathway를 조합하여 실제 시스템을 적절히 모사하도록 하기만 하면 된다. 처분장에 처분된 방사성폐기물 내의 핵종이 지하수를 만나 처분장으로 부터 유출이 일어나면, 처분시스템 내에서의 핵종의 이동을 통해 궁극적으로 생태계를 통하여 인간에게 피폭을 주게 된다. 이 때 처분시스템의 장기 안전성 평가를 통하여 처분장의 성능을 보여야 하는데, 핵종의 유출 및

이동에 관여하는 다양한 현상, 사건 그리고 과정(features, events and processes, FEPs)을 파악하여 이로부터 가능한 핵종 유출 및 이동에 관한 시나리오를 인지해 내면 이러한 시스템에 대한 안전성 평가가 가능해진다. 그러면 처분시스템의 형태나 시스템 주변 이동이 이루어지는 매질을 고려하여 정량적 평가를 위한 모델링 도메인을 구성하게 되고, 시스템 구성물의 다양한 물질에 대하여, 가령 용질의 화학적 방사선적 특성, 매질의 물성과 화학적 특성 등 입력 자료를 모으면, 다양한 pathway를 적절히 구성할 수 있게 되고, 그러면 이들을 핵종 전달이 이루어지도록 네트워크로 연결해주면 된다. 선원향과 생태계내 피폭 경로도 함께 구성해 주면 비로소 처분시스템 내 핵종 이동 및 거동에 따른 정량적 평가가 가능한 GoldSim 모델이 템플릿으로 구현된다. 결국 매질 내 질량의 이동에 관한 어떤 시스템도 GTM을 통해 이들 pathway의 네트워크로 구성되는 개념으로 요약될 뿐이다.

이러한 pathway 중 이 논문에서 논의될 두가지는, 공간에 무관한 매질 내 “질량 이동”을 시간에 대한 질량의 변화를 상미분 지배 방정식으로 기술하는 Cell pathway와, 이와는 대조적으로 매질 내의 공간과 시간에 대한 “농도 변화”를 지배하는 편미분 방정식을 간접적으로 이용하여 얻어 내는, 수학적 응답함수 형태의 연산자(operator)로 기술하는 Pipe pathway이다. 이 외에도 매질의 형태와 매질 내 주요한 이동 메커니즘에 따라 효율적으로 사용되도록 준비된 몇가지 pathway가 더 있지만 Cell과 Pipe pathway가 주요 pathway로 볼 수 있으며, 논의를 이 두가지에 국한하는 이유는 사실상 나머지 다른 pathway들은 이 둘의 변종으로 볼 수 있기 때문이다.

GTM에서 제공하는 pathway의 속성을 보면 Fig. 1에서 보이는 것 처럼 응답함수 또는 전달 함수(transfer function)로 표현되는 연산자가 된다. 즉, Pathway의 개념이 곧 연산자가 된다. 질량의 플럭스 전달률 $[M/T]$, 즉 시간당 유동되는 질량이 이 연산자의 입구로 유입되면 이 pathway를 통하는 동안 지연, 방사성 붕괴, 그리고 확산이나 분산 등의 과정을 블랙박스 내에서 처리된 후 그 결과로서의 질량의 플럭스 전달률이 연산자의 출구에서 나타나게 된다.

그러나 엄격한 의미에서 수학적으로 표현되는 Pipe pathway만이 이러한 연산자이며, Cell pathway는 그 자체로 물리적 속성을 갖는 만큼 완전한 연산자로 보기는 어렵다. 또한 Pipe pathway는 그 자체로서 한 매질 내에서의 질

량 전달을 완벽히 기술하지만, Cell pathway는 다른 cell이나 pipe와의 네트워크를 구성해서 cell 간, 또는 cell과 Pipe pathway 간의 네트워크로 기술되어야만 질량 이동을 기술하는 요소로서의 pathway의 의미를 비로소 갖게 된다. 이렇게 Pathway는 질량 전달을 발생시키기 위해 매질 자체, 또는 매질간을 연계한다. 처분시스템내의 핵종의 이동이 일어나는 매질, 가령 처분장 근계 영역이나 천연방벽으로서의 지하 암반 매질, 대수층 또는 생태계 내의 호수나 대기층 등을 구성하고, 이들 구성 요소가 서로 연계되면서 질량, 즉 핵종의 이동이 처분장으로부터 생태계까지 연속적으로 발생할 수 있는 매질계가 구성된다.

Fig. 1. Conceptual pathway as an operator of transfer function.

GTM에는 질량에 관한 시간적 변화 외에, 지하수 유동 등 그 어떤 다른 지배 방정식은 따로 존재하지 않는다. 이는 당연한 것이지만 질량 이동을 다루는 GTM이 지하수의 유동까지 직접 묘사해 주지 않는 이유이다. 따라서 질량의 이동 속도, 즉 질량의 이동 출력스 $[M/T]$ 에 관여하는 지하수 유동에 대한 입력 자료는 사용자가 외부에서 별도로 공급해주어야 한다. 들어온 입력 신호로서의 질량률은 pathway에 의해 나가는 질량률로 변화되어 나타나는 형태이다. 즉, pathway의 내부에서의 질량률이 아니고, pathway 내부로 들어오고 내보내며 나타나는, 형태상으로는 경계에서의 질량률만을 다루게 되어, 다른 pathway로 부터 한 pathway에 최종적으로 공급되는 것은 질량 플럭스(mass flux $[M/T]$)가 아니고 결국 일정한 시간 간격 사이에 축적되는 질량 $[M]$ 이라는 것이라는 사실에 유의하여야 한다. 자연이나 붕괴, 그리고 암반 조직으로의 확산 등을 잠시 논의에서 배제하고 질량 전달 속도에만 한정하여 극한적으로 모식화하여 표현한다면, 어느 시간 경과 사이에 어떠한 질량 이동률을 가지고 Pipe pathway에 유입되는 질량은, 유입된 이후에는 그 pathway에 어떻게 언제 들어 왔나 하는 이력은 더 이상 의미가 없어지고, 들어온 질량은 pathway라는 연산자 안에서 대기 상태로 있다가 pathway의 출구에서의 질량을 이동시키는 매질의 속도가

정해지면 이 속도가 내부의 상황을 반영한 것으로 되고 비로소 그 질량률을 가지고 다음 pathway에 전달해 주게 되는 방식이라는 의미이다. 즉, 물론 pathway의 내부는 물리적으로 아무것도 정의되지 못하며, 출구에서는 질량 자체가 아닌, 질량을 옮기는 매질에게 부여되는 이동률에 의해 질량이 다음 pathway에 전달되는 것이다.

Pipe pathway의 경우, 매질의 입구에서 질량 플럭스를 입력 받아 이를 응답한 질량의 전달률을 매질 내에서 이동시키거나 또는 보관하며 출력시키게 되어 하나의 이동응답 함수(transfer function)인 연산자로 간주된다고 하였는데, Cell pathway의 경우는 단독의 cell만으로는 수학적으로는 엄밀히 연산자로 볼 수가 없다고 전술하였다. 이는 연속된 cell이나 아니면 다른 pipe와 연계된 후에 비로소 질량을 받아 다른 cell이나 pipe 등으로 이를 전달할 수 있다는 의미이다. 이에 대한 내용은 뒤에 이들 pathway에 관련된 수학적 측면에서 명확하게 논의 하기로 한다.

이류와 분산에 의한 질량(농도가 아닌)의 이동을 기술하는데 적합하도록 마련된 Pipe pathway에서는, 우선 핵종 농도에 관한 이류-분산식(advection-dispersion equation)을 라플라스 역변환을 통해 농도에 관한 해를 구하고, 이를 통해 질량의 출구에서 유출률을 계산하는데 그 근거를 두고 있긴 하다. 그렇다고는 하지만 이런 논의는 질량이 아닌, 농도에 기반을 둔 것임에 주의하여야 한다. Pipe pathway가 농도에 기반을 둔 지배방정식으로 연산자를 만들고 여기에 농도가 아닌, 질량의 입력 신호를 적용시켜 질량의 출력 신호를 내보내는, 수학적으로 엄밀하지는 않은 구조가 되는 이유이다.

그러나 이와는 다르게 Cell pathway간의 이동은, 농도에 관한 지배 방정식을 빌어 쓰지 않고, 처음부터 완전 혼합 탱크(mixing tank)를 갖는 구획(compartment)간의 질량 전달 모델로 기술한다. 즉 질량의 시간적 변화에 대한 지배 방정식에 질량 이동의 근거를 둔다. 각 cell로서 구현되는 구획은, 처음에는 그 크기나 부피를 갖지 않는 질점으로만 간주되어 이 질점 내, 그리고 각 질점 사이에서의 질량 전달은 시간에 대한 질량변화라는 상미분식으로 주어지는 지배 방정식을 따르게 되는데, 이 Cell pathway가 다른 Cell pathway와 연계되면 수학적으로 유한차분법과 같은 방식으로 해를 제공하여 확산과 이류에 의한 물질 이동을 기술할 수 있도록 한다.

Fig. 2와 3에 GTM에서 제공되는 Cell과 Pipe에 대한 개

Fig. 2. Cell pathway concept.

Fig. 3. Pipe pathway concept.

념을 도시하였다. 요약하면 Cell pathway의 경우는 매질이 다양하게 복합적으로 구성되어 있는 매질에서 질량의 이류와 확산이 존재하는 경우에, 그리고 Pipe pathway의 경우는 단일한 매질에서 질량의 이류와 분산, 그리고 조직 내 확산이 존재하는 경우에 대해서 유용한 pathway가 된다.

GTM은 상호 이질적이기도 한 이 두 pathway의 사이, 혹은 동일한 pathway 사이에서라도 오로지 질량의 흐름만을 유지하여 서로간의 상호 네트워크를 구성할 수 있게 한다. Fig. 4에서 보는 대로 GoldSim에서는 네트워크로 구성되는 매질 시스템 내 다양한 pathway를 구성하여 이들 사이에 오로지 질량의 이동만을 관찰하고 유지하게 한다. 질량만을 전달하고 질량 수치를 맞추지 못한다면 Pipe pathway와 Cell pathway는 상호 연계가 불가능하다. 이런 관점에서 GoldSim, 즉 GTM에서는 매질 내에서의 농도라는 것은 일반적인 수치 모델에서 다루는, 액체에 용해되어 있는 용질로 기술되는 재래의 농도의 개념과는 다를 수 밖에 없으며 본질적으로, 또는 물리적으로 정확하게는 매질의 단위 질량이나 부피당 질량일 뿐이지 액상 내 질량의 농도라는 고전적인 정의에만 국한되어서는 안 된다는 것에 유의하여야 한다.

한편 기본적인 요소로서의 이러한 pathway 외에도, GoldSim과 GTM에는 프로그램에 편리한 다양한 요소를 미리 만들어 제공하고 있다. 가령 선원항을 기술하기 위해 특별히

Fig. 4. A Mass transfer network through the various pathway provided in GoldSim.

따로 준비된 Source 등 다양한 객체로서의 개발도구 요소가 사용자나 개발자 편의를 위해 준비되어 있다. GoldSim에서는 각 pathway에 필요할 수 있는 매질이나 용매 등을 위해 따로 모아 그 성질을 미리 정의해 둘 수 있도록 한 것도 편리한 특징인데, 유체(Fluid)나 고체(Solid)로 이루어진 매질을 미리 정의해 두고, 공극률이나 밀도 등의 물성 등을 미리 기술해 두거나, 이 매질 내에서의 원소의 지화학적 분배계수도 미리 정의해두면, 이후 특정한 매질에서의 질량 전달을 기술하는 경우, 적절히 이를 끌어와, pathway에 정의된 매질을 매칭하여 모든 물리적, 지화학적 특성을 참조시키게 된다.

다른 예이지만, Species라는 요소에 오염물질이나 방사성물질 등을 미리 선정, 정의해둘 수 있도록 하여, 방사성 붕괴나 붕괴 사슬, 동위원소의 유무 등을 이 곳을 통해 미리 지정해둘 수 있게 한다. 이러한 요소와 개념들이 GTM을 비롯한 모든 GoldSim 모듈을 이용한 모델링에서 사용자가 쉽고 편리하도록 해 주는 것이다.

3. GoldSim pathway를 통한 이동 시스템 내 질량 이동 모사

3.1 Pipe pathway의 수학적 기술

이제 부터는 다양한 매질에서의 질량 전달에 관한 논의를 한정해서, 방사성 폐기물 처분시스템 내 다양한 매질에

서의 질량, 즉 핵종의 이동에 관한 것으로 국한해 보도록 한다. 사용후핵연료를 파이로처리(Pyroprocessing)하는 결과로 생성되는 방사성폐기물을 처분하는 처분시스템을 구체적인 예로서 논의한다. KAERI에서는 현재 이러한 처분장 개념을 개발하여 A-KRS로 발표하였다[3]. 이러한 A-KRS가 위치하는 주변은 방사성폐기물 처분장에 의한 방사선 영향권을 가지는 것으로 상정될 수 있어서 포괄적으로 처분시스템으로 정의할 수 있다. 이 때 처분장에서 잠재적으로 유출된 핵종이 주변 지하매질과 지표 생태계를 포함하는 이러한 처분시스템에 장기적인 방사선적 영향을 준다고 보고, 이를 정량적인 인간이 받는 피폭선량으로 평가하여 안전 기준치와 비교하는 것으로서 처분장의 안전성을 평가하게 된다. 이는 처분장 측면에서는 처분장의 성능을 평가하는 것이 된다.

A-KRS는 파이로 처리(pyroprocess)에 의한 사용후핵연료의 건식재처리를 통하여 우라늄자원을 재활용하며 TRU도 줄이고, 고방열 핵종을 따로 분리시켜 고준위 폐기물의 처분량을 줄일 수 있는, 새로운 파이로 처분시스템 개념으로, 처분되는 폐기물의 형태는 사용후핵연료의 피복관 탈

피로 생성되는 중저준위 폐기물로서의 금속폐기물과, LiCl-KCl 공용융염을 산화침전법으로 수집 여과하여 모나자이트(Monazite)로 고화한 고준위 폐기물 형태의 세라믹폐기물이다. 200 m 심도에는 비교적 방사능 준위가 낮은 금속폐기물을, 그리고 500 m 심도에는 방사능 준위가 높고 고방열인 세라믹 고준위 폐기물을 분리하여 Fig. 5와 같이 처분하는 방안으로 되어 있다. 이러한 A-KRS의 안전성 및 성능 평가를 위하여 GoldSim과 GTM을 이용하여 안전성 평가 프로그램을 템플릿 형태로 개발하여 다양한 입력 자료에 대응한 계산을 수행해 오고 있다[4-10].

그림에 요약된 처분시스템은, 단순화 된 모델링 도메인으로 A-KRS의 안전성 평가를 위해 모식적이며 개념적으로 그려진 것이다. 이러한 모델링 도메인에서도 모암 내 균열매질과 MWCF 등 다양한 매질에서 Pipe와 Cell pathway가 GTM의 핵심적인 질량 이동 요소로서 두루 사용되어지는 것을 볼 수 있다. 이렇게 GTM이 처분시스템의 안전성 및 성능 평가 프로그램 개발과 그 사용에 편리하게 이용되지만 전술하였듯이 정확한 모사 결과를 위해서는 pathway의 사용에

Fig. 5. A modeling domain of A-KRS for safety assessment.

세심한 주의를 요구한다. 이는 다른 개발 도구와 달리 각 매질에서의 핵종 이동을 모사하면서 핵종의 농도나 플럭스의 보존은 고려하지 않고, 핵종의 질량만을 보존하게 하는 GTM만의 특성 때문이다. 물리적인 매질이 아닌 수학적 응답함수로서의 연산자 형태의 Pipe pathway는 물론, 이와는 다르게 어느 정도 물리적 매질의 형태를 가지긴 하지만, 구획 모델에서 이용하는 순간적으로 평형에 도달되는 혼합 탱크 (mixing tank) 형태의 구획의 성질을 갖는 Cell pathway 사이에서 물질의 전달과 이동을 모사하기 위해서는, 즉 상이한 성질의 pathway를 연계하기 위해서는 단지 질량만을 보존시키는 것 외에 다른 방안이 없기 때문이다.

그러나 이러한 GTM의 방식은, 지진이나 인간 침입 등과 같은 처분시스템 환경에 대한 급변 시나리오나, 장기 부지 상황 변화에 따라 시스템 내 핵종 이동이 시간적으로 변화하는 경우 정확한 결과 예측에 당장 문제가 될 수가 있다.

이에 대한 논의를 명확히 하기 위하여 먼저 이 절에서 먼저 Pipe pathway에 대해서 수학적으로 고찰해 보고, 이어서 Cell pathway에 대해서도 수학적으로 고찰해 보기로 한다. 먼저 Pipe pathway를 나가 이웃하는 다른 pathway에 전해지는 핵종 s 의 질량의 이류와 확산에 의한 질량 이동률 (M/T)은 가상적인 물리적 길이 L 을 갖는 Pipe의 출구 $x = L$ 에서 시간의 함수로 (1)식과 같이 표시된다. 그러나 GTM에서는 농도에 관한 이류-분산으로 모사되는 물리적 매질에 대해서와 다르게 이 식에 보이는 c^s 를 따로 분리하여 풀지는 않는 것에 유의해야 한다. 이런 모순은 (2)식을 통하지 않고, (2)식에 기반을 둔 (1)식을 통째로 구해내는 개념으로 해결할 수 있게 된다.

여기서,

ϕ_s = flux of s leaving the pipe pathway [M/T]

c^{ss} = concentration of the suspended solid in the mobile zone [M/L^3]

Q = volumetric flow rate in the pathway [L^3/T]

K_{ss}^s = sorption coefficient between the suspended solid and the fluid for s [L^3/M]

D^s = effective diffusivity of s in the mobile zone [L^2/T]

α = dispersivity of the pathway [L]

L = length of the pathway [L]

x = distance into the pathway [L]

c^s = dissolved concentration of s in mobile zone of pathway [M/L^3] 이 되고,

$$\phi^s = (1 + c^{ss}K_{ss}^s) \left\{ Qc^s - (D_s + \alpha Q) \frac{\partial c^s}{\partial x} \right\} \Big|_{x=L} \quad (1)$$

전술한 대로 GTM에서는 (1)식에서 요구되는 농도 c^s 를 직접 구할 수는 없는데 이는 Pipe pathway내에서 거리에 따른 핵종의 profile을 구할 수 없다는 의미이다. 따라서 (1)식으로 기술되는 지배방정식은, 물리적 매질 자체가 아닌 수학적으로 기술되는 Pipe pathway내에만 국한되는 개념이며, 오직 Pipe pathway내로 들어 오는 질량에 대해서만 연산자로서, $x = L$ 에서만 값을 내어 주는, 블랙박스로서의 응답함수로 작동한다. 이것이 Pipe pathway가 어떤 물리적인 pipe 형태의 컬럼과 같은 매질로 오인하면 안되는 이유이다. Pipe의 응답함수를 블랙박스적 연산자로 구해내기 위해 유한한 길이 L 을 갖는 매질을 상정하고 이 상정된 물리적 매질에 임시로 (2)식으로 기술되는 “농도”에 관한 지배방정식을 적용할 수 있는 것으로 가정한다는 의미이다. 그리고 이 식을 통해 얻어지는 “농도”를 (1)식에 적용하여 질량의 플럭스를 구할 수 있는 것으로, 여기서의 농도 개념은 그저 수학적 논리 전개상 잠정적일 뿐이다. 이러한 논리를 바탕으로 길이 L 을 갖는 물리적 pipe에 대한 “농도”와 이 농도에 의한 출구 플럭스를 얻기 위해 Laplace Transform된 해를 얻어 이를 응답함수로 간주한 다음, 이를 Pipe payhway라는 연산자의 더 이상 농도가 아닌 “질량”의 응답함수로 이용하는 것이다. 그러면 이전의 pathway에서 일정한 질량률을 가지고 지금의 Pipe pathway입구에 전해진 질량(질량률이 아니고 질량 뿐임에 유의)은 이 연산자를 거쳐 Pipe pathway의 출구에서의 질량의 전달률을 출력하게 되는 것이다. 원래는 농도의 응답인 것으로 일시 상정하여 연산자를 만들었다 하나, GTM에서는 농도의 응답이 아닌, 질량의 응답임에 주의하여야 한다. 결국 Pipe 내에서의 농도, $c^s(x,t)$ 의 프로파일은 따로 구할 일도, 또 정확히 구해낼 수도 없게 된다는 의미이다. 다시 (1)식을 살펴 보며 정리해보자. 농도 $c^s(x,t)$ 를 구해내기 위해 길이 L 을 갖는 Pipe를 잠시 물리적 매질로 간주한다. Pipe내로 이러한 논의를 국한하여 이 임시의 “물리적” Pipe 내에서 농도 $c^s(x,t)$ 를 지배하는 이류-분산(advection-dispersion) 식을 (2)식과 같이 고려한다:

$$\frac{\partial c^s}{\partial t} = -\frac{Q}{\theta AR_s} \left\{ (1 + c^{ss} K_{ss}^s) \frac{\partial c^s}{\partial x} - \alpha [(1 + c^{ss} K_{ss}^s) + D_s] \frac{\partial^2 c^s}{\partial x^2} \right\} + \left\{ -c^s \lambda^s + \sum_{p=1}^{N_p} c^p \lambda^p f_p^s S^{p \rightarrow s} \frac{W^s R^p}{W^p R^s} \right\} - \frac{1}{\theta AR_s} \sum_{im=1}^{NMD} P f_{im} D_{im}^s \frac{\partial c_{im}^s}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (2)$$

여기서,

A = diffusive area of the matrix zone per unit length of mobile zone [L]

θ = porosity for s

R^s, R^p = retardation factor for s and parent in the mobile zone, respectively

P = perimeter of the pathway [L]

f_{im} = perimeter fraction occupied by matrix diffusion zone [L]

D_{im}^s = diffusivity of matrix diffusion zone for s [L²/T]

NMD = number of matrix diffusion zone

이 때 암반의 매트릭스로 확산되어 들어가는 핵종의 농도로서,

c_{im}^s = concentration of s in the rock matrix diffusion zone im , 은 다시 아래 (3)식과 같이 기술될 수 있다:

$$\frac{\partial c_{im}^s}{\partial t} = \left\{ \frac{D_{im}^s}{\theta_{im} R_{im}^s} \frac{\partial^2 c_{im}^s}{\partial z^2} + \frac{D_{im}^s}{\theta_{im} R_{im}^s A_{im}} \frac{\partial A_{im}}{\partial z} \frac{\partial c_{im}^s}{\partial z} \right\} + \left\{ -c_{im}^s \lambda^s + \sum_{p=1}^{N_p} c_{im}^p \lambda^p f_p^s S^{p \rightarrow s} \frac{W^s R_{im}^p}{W^p R_{im}^s} \right\} \quad (3)$$

여기서,

D_{im}^s = effective diffusivity of s in the matrix zone [L²/T]

θ_{im} = porosity of the matrix zone

R_{im}^s, R_{im}^p = retardation factor in the matrix zone for s and parent, respectively

A_{im} = diffusive area of the matrix zone per unit length of mobile zone [L]

이다.

한편 (1)식의 마지막 항에서 처럼 Pipe내부 벽에 수직하는 방향으로의 조직 확산도 고려하게 되는데 이 때 조직 내 확산에 대한 경계조건은 아래 (4)식으로 기술된다.

$$\begin{aligned} c_{im}^s &= c^{ss} \text{ at } z = 0; \\ \frac{\partial c_{im}^s}{\partial z} &= 0 \text{ at } z = T_{im} \end{aligned} \quad (4)$$

이 때 T_{im} = thickness of the diffusion zone [L]이다.

이제 (2)식에 대해서는 출구에서는 무한대에서 핵종의 농도가 0이 되도록 가정하고, 입구에서는 Pipe 내에 이미 존재하는 질량과 Pipe 내로 들어 오는 핵종의 질량 유입률을 고려하여 아래 (5)식과 같이 플럭스 형태의 경계 조건을 고려할 수 있다.

$$\begin{aligned} c^s &= 0 \text{ as } x \rightarrow \infty; \\ (1 + c^{ss} K_{ss}^s) Q - [D_s + \alpha (1 + c^{ss} K_{ss}^s) Q] \frac{\partial c^s}{\partial x} \Big|_{x=0} &= -\delta(t) M_0^s + \phi_b^s + \phi_e^s \end{aligned} \quad (5)$$

여기서,

$\delta(t)$ = Dirac delta function [1/T]

M_0^s = initial mass of s applied to the pathway [M]

ϕ_b^s = boundary flux of s [M/T]

ϕ_e^s = flux of s from external pathways [M/T]

그러면 농도 $c^s(x, t)$ 에 관한 (2)식의 1차원 이류-분산식의 해를 얻을 수 있고, 실제로 그 해를 구하는 일은 없지만, 이를 통하여 pipe 출구에서의 질량에 대한 플럭스를 기술하는 (1)식을 얻어 낼 수 있게 된다.

이제 임시의 물리적인 길이 L 을 갖는 pipe는 버리고, Pipe pathway의 속성으로 다시 돌아가기로 한다. Pipe pathway의 응답함수라는 것은, 결국 $t = 0$ 에서의 단위 입력 신호에 대한 Pipe pathway 출구에서의 출력 이력(discharge history)으로 나타내지게 되는데, 이는 출구, 즉 $x = L$ 에서 아래 (6)식과 같은 convolution integral의 형태로 표현된다.

$$\vec{f}(L, t) = \int_0^t \vec{f}(0, \tau) \bar{T}(t - \tau) d\tau \quad (6)$$

여기서,

$\vec{f}$ = a vector containing the flux of each species in the decay chain

$\bar{T}$ = a matrix of discharge histories (functions of time) due to slug inputs of each species in the decay chain

(6)식과 같은 convolution integral의 라플라스 변환식은 다행히도 아래 (7)식과 같이 아주 단순한 형태로서 선형적으로 얻어진다.

$$\bar{f}(L, s) = \bar{T}(s)\bar{f}(0) \quad (7)$$

여기서,

$\bar{f}(L, s)$ = transfer function matrix for the mass discharge rate, function of Laplace variable s (아래 첨자로 표시)

$\bar{T}$ = transformed transfer matrix

$\bar{f}(0)$ = Laplace transform of the pathway mass in flux history

이렇게 되면 GTM은, 이들 식들의 해를 Laplace transforms를 통해 제공하는 것으로 되어, (7)식의 $\bar{f}(L, s)$ 는 독립된 두 함수의 곱으로 나타내지고, 결국 $\bar{T}(s)$ 는 $\bar{f}(0)$ 를 $\bar{f}(L, s)$ 로 변환시키는 선형적 연산자로서의 역할이 가능하게 된다.

이제 GTM은 각 Pipe에 대하여 라플라스 변환식 $\bar{T}$ 를 통하여 핵종의 질량 유출률에 대한 라플라스 변환값을 구해 내게 된다. 이 때 각 time step, 즉 매 정지된 개념의 Δt 시간 사이에 이전 pathway에서 부여받은 질량률을 가지고 Pipe pathway로 들어 온 모든 질량에 관한 입력 신호가 라플라스 변환이 된 후 변환식 $\bar{T}$ 와 곱해져서 얻어진 각 time step에 대한 출력 신호는, 시간의 흐름에 따라 모두 합해져 $\bar{f}(L, s)$ 을 구해낼 수 있게 된다. 즉, GTM은 이렇게 각 time step에 대해 출력신호를 구해내면, 이를 아래 (8)식과 같이 라플라스 역변환을 통해 그 time step 내에 해당되는 만큼의 질량을 얻어 내게 하여 이 질량의 전달률을 다음 pathway로 전달하도록 하게 되는 것이다.

$$\int_{t-\Delta t}^t \bar{f}(L, \tau) d\tau = \int_0^t \{\bar{f}(L, \tau) - \bar{f}(L, \tau - \Delta t)\} d\tau = L^{-1} \left\{ \frac{1-e^{-s\Delta t}}{s} \bar{f}(L) \right\} \quad (8)$$

여기서,

$\bar{f}$ = flux in the pathway (M/T)

L = length of the pathway (L)

Δt = GoldSim time step (T)

L^{-1} = inverse Laplace transform

GTM에서는 이렇게 Pipe pathway의 경우와 같이, Cell

pathway도 pathway 사이에서 질량의 전달만 모사할 뿐이지 농도 자체나 질량의 플럭스 자체의 전달은 이루어지지 않는다. 전술한 이류-분산에 관한 지배 방정식은 Pipe pathway 내부, 즉 연산자를 구하기 위해 존재하는 것이지 Pipe pathway를 사용하여 이동을 모사하는 매질 그 자체에 관한 것이 아니라는 점에 유의하여야 한다는 의미이다.

뿐만 아니라 다시 강조하지만, GTM에서는 질량의 전달 외에 매질 자체에 대한 유동을 위한 그 어떤 지배 방정식도 사용하지 않는 점에 극히 유의하여야 한다. 더욱 더 중요한 것은 GTM에서는 pathway 간 질량 플럭스 link에 관여하는 매질로서는 유체는 물론 고체도 가능하다는 점을 염두에 두어야 한다. 지하수만이 핵종을 이동시키는 것이 아니며, 침적층에 내려 앉은 부유물로서 고체 매질도 핵종을 이동시키는 것을 생각하여야 한다.

GTM에서는 또한 사용자가 제공해 준 고체 매질의 이동률(M/T)이나 유체 매질의 유량률(L³/T)을 갖는 고체 및 유체 형태의 매체가 각 경로 사이에서 자신은 전달하지 않고 질량만을 배달해주고 또 질량만을 받아 들이는 방식이라는 점을 반드시 염두에 두어야 한다. 가령 Cell과 Pipe가 나란히 연계된 매질에서 지하수와 토양 침식을 통한 질량전달의 경우라면, Pipe는 Cell pathway에서 전달 받는 지하수와 토양의 유량률과 이동률에 의해 결정되는 전달 속도를 통해 질량만을 전달받으며, 이렇게 전달받은 이 질량은 바로 응답함수에 의해 Pipe pathway 출구에서, 이 Pipe pathway에 부여된 이동률이나 유량률에 의해 응답된 질량을 다음 pathway에 전달하게 된다. 전술하였듯 Pipe는 Cell과는 다르게 물리적 매질로 모사될 수 없으며 질량에 대한 입력 신호를 출력 신호로만 전환할 뿐이다.

그러나 Pipe pathway는 핵종의 붕괴 사슬, 암반 조직 내로의 확산과 수력학적 확산계수(diffusivity), 그리고 Pipe를 채우는 매질의 종류가 정해지는데 따라 핵종의 분배와 매질 내 농도 구배에 따른 확산계수(diffusion coefficient)까지도 모두 고려하여 신호를 출력 해 준다. 다만 Pipe에서도 필요하다면 Pipe 출구에서도 농도를 얻을 수는 있지만, 연산자를 구하기 위해 사용한 농도에 관한 지배식 이류-분산식에서 직접 구하지는 못하고, Pipe 출구에서 얻어진 Δt 시간 사이, (8) 식으로 주어지는 외부로 나가는 질량에 대한 플럭스를 Pipe에 부여하여 Pipe의 출구에서 다음 경로에 전달해 주는 “매질의 유량률”로 나누어 역산하는 방식으로 출구에서의 핵종의

평형상태의 농도를 개략적으로 계산해 줄 뿐이다. 이는 Cell pathway에서와 같이, Cell 내로 들어 온 질량이 Cell을 구성하는 다양한 고체 및 유체 매질 간의 즉각적인 평형과 분배의 가정에 의한 결과로 얻어지는 실제 농도와는 다르며 Pipe 경로에 변화가 없는 상태에서만 의미가 있는 것이지 본문에서 논의한 대로 지진 등에 의해 유동계가 변하는 경우는 물론 변화가 심한 유동계를 갖는 경우 등의 이유로 정확한 농도 값으로 되지 못하는 것에 극도로 주의하여야 한다.

3.2 Cell pathway의 수학적 기술

Cell pathway는 Pipe pathway와 태생부터 그 성질도 완전히 다른 속성을 지닌다. 그런데 GTM에서는 이 Cell pathway와 Pipe pathway를 어떻게든 연계 시켜야 하며 이는 질량의 전달에 의해서만 가능하다고 전술했었다. 그럼 Cell pathway의 수학적 근거는 무엇일까. Cell pathway는 구획(compartment), 즉 수학적으로 혼합된(mixing) cell을 표현하기 위한 것이다.

분배(Partitioning), 용해도 제한(Solubility constraint), 이류와 분산, 그리고 확산까지 모두 기술하게 해 주며, 다양한 형태의, 그것도 복수의 종류의 매질을 동시에 기술하게 해 준다. 보다 물리적인 pathway로서 단일 매질에 대해서만, 그것도 물리적인 매질로 보기는 어려운, 그저 블랙박스 와 같이 기술되는 Pipe pathway와는 확연히 구별되는 이유이다. 복수의 Cell끼리 서로 연결되어 확산과 이류적 이동이 모사되는 경우라면 수학적으로 유한 차분법과 동등하게 여겨질 수 있다는 점이 큰 특징이 된다. 이러한 측면에서 Cell pathway는 물리적 매질 그 자체로 보아도 문제가 없지만, 이 역시 다른 pathway와 연계 되었을 때 전달 및 이동이 작동한다는 점에서라면 역시 Pipe pathway와 같이 연산자로서 간주될 수도 있다.

한편 GTM에서의 약속과 배려이지만, Pipe pathway와 달리, Cell pathway의 경우, 만일 Cell 내의 어떤 유체 매질 속에 부유 입자(suspended particulate)의 형태로 고체물질이 존재한다면, 이 고체물질은 Cell Properties 내에서 반드시 맨 첫번째 기술되는(preceding) 유체 내에 존재하는 것으로 가정되는 것으로 정의할 수 있도록 하여 어떤 유체와 그 유체 내의 부유 고체를 모두 매질로 동시에 구현하는 것을 가능하게 해 준다.

이제 Cell에서의 확산을 생각해 보자. Pipe pathway와 마찬가지로 Cell pathway에 대해서는 절대로 농도의 확산에 관한 지배방정식을 풀지 않는다는 것에 유의하여야 한다. GTM에서는 질량의 이동 외에 농도의 이동에 관해 고려하는 일이 없다. Cell pathway에서는 Fick's 2nd law를 풀지 않는다는 의미이다. 사실 풀지 않는 것이 아니고, 농도가 아닌 질량의 이동에 관한 것이니 농도에 관한 이 식을 풀 수 없기 때문이다. 대신 Pipe pathway에서 질량의 이동을 위해 농도를 지배하는 식을 빌려 오듯이 Cell pathway에서도 1st law로 기술되는, 농도 구배에 의한 확산 메커니즘을 빌려올 뿐이다. 즉 두 확산 매질 사이의 확산 거리 Δx , 확산이 이루어지는 접촉 면적과 확산의 용이성을 기술하는 파라미터 등만이 확산의 저항(diffusion resistance)적 개념으로만 질량을 이동시키는데 관여하게 한다. 이는 당연한 것으로, 농도라는 것이 유체에 녹아 있는 고체의 농도의 구배에 의해 확산이 이루어지는 재래의 매질과 달리, GoldSim에서는 비단 유체 내의 고체의 농도 뿐 아니라 가령 고체 내의 고체의 농도(엄격히는 농도가 아닌 Specific 질량)에 대해서도 확산적 이동을 고려하고 가능하게 해 주기 때문이다. 농도 구배에 의해서 질량이 이동하지 질량의 전달률의 차이에 의해 확산이 이루어지지 않는 사실에 주목하여야 한다.

또한 비단 GTM의 Cell pathway에서는 질점간의 질량 이동률을 모사하는 일반적인 구획 모델과 달리 Cell의 부피를 요구 받긴 해도, 이는 time step내 정지된 일순간의 평형 상태에서의 그 Cell의 부피를 기술하는 것이지, 이 부피를 바탕으로 농도를 얻어 이 농도에 관한 지배방정식을 풀기 위한 것은 아니라는 것이다. 전술했듯이 Cell pathway에 대한 지배방정식은, (9)식에서 보이는 대로 질점(mass point)로 dm/dt 에 대한 것이다. 식에서 보듯 그 어느 곳에도 부피에 관해서는 기술되지 않는다.

즉 Cell 간의 이동은, 일반적인 구획 모델링의 경우와 똑같이 완전한 혼합 탱크를 갖는 구획간의 질량 전달 모델로 기술된다. 즉 각 cell로서 구현되는 구획은 크기나 부피를 갖지 않는 질점으로 간주되어 이 질점 내, 그리고 각 질점 사이에서의 질량은 시간에 대한 상미분식으로 주어지는 아래 (9)식의 지배 방정식을 따르게 된다.

$$\frac{dm_i^s}{dt} = -m_i^s \lambda^s + \sum_{p=1}^{Np} m_{ip} \lambda^p f_p^s S^{p \rightarrow s} \left(\frac{W^s}{W^p} \right) + \sum_{c=1}^{Nl} \phi_{l \rightarrow i}^s + S_i^s \quad (9)$$

여기서,

M_i^s = mass of nuclide s in cell i [M]

p = denotes for parent of s

λ^s, λ^p = decay constant for s and parent nuclide, respectively [T^{-1}]

N^p = number of direct parents for s

f_p^s = fraction of parent which decays into s

$S^{p \rightarrow s}$ = stoichiometric ratio of moles of s produced per mole of parent decayed

W^s, W^p = molecular weight of s and parent, respectively [M/mol]

N_i = number of mass flux links from/to cell i

$\phi_{i \rightarrow l}^s$ = influx ratio of s into i through advective and diffusive mass flux link l [M/T]

S_i^s = rate of direct input of s to i from external sources [M/T]

이 때 $\phi_{i \rightarrow l}^s$ 를 통하여 pipe 등 다른 pathway와의 질량 전달이 이루어진다.

다시 정리해 보면, Cell에서는 확산 현상이라는 옷만 빌려 질량이 확산적으로 이동하는 것으로 간주되는 것이며, 이 경우라도 매질이 유체인 경우만 가능한 것으로, 이 점이 Cell pathway가 기존의 구획 모델에서의 구획과는 다른 점이 되는 것이다. 구획에서는 혼합탱크로서의 구획이, 부피가 없는 질점으로 정의 되어, 이 질점으로 들어 오는 유체와 나가는 유체의 유량률이 일정하지만, Cell pathway에서는 들어오는 유량 정보를 해당 Cell에서는 알지도 못하고, 알 필요도 없으며, 그저 매질이 데리고 오는 질량만 받아 들일 뿐, 질량이 매질과 함께 이동하는 구획모델에서의 구획과는 다르게, Cell pathway에서는 해당 Cell에 주어진 Cell pathway의 출구에서의 유체의 유량률(flow rate)에 의해 질량을 다음 pathway로 전달할 뿐임에 유의하여야 한다. 가령 확산적 이동만 고려하고 이를 Cell pathway로 기술하는 어떤 완충재 매질에서 지하수의 유동이 상존하는 다른 pathway로 질량 이동을 생각해 보자. 이러한 경우 Cell pathway에 부여한 매질의 이동률이 그 Cell pathway의 내부에서의 핵종의 이류적 이동이라고 오해할 수 있는데, 이 유량률은 Cell pathway에서 확산적 이동으로 질량이 Cell pathway의 출구로 이동되면, 이후 지하수의 유동이 있는 다른 pathway로 이류적 이동이 일어나는 것을 기술

할 뿐인 것이다.

또한 일반적 구획은 단일 매질의 질점이지만, Cell은 비록 그 지배방정식은 dm/dt 에 관한 질점사이의 질량전달을 사용하면서도 Cell 매질 자체는 다중 매질의 복합체인 물리적 체적으로 보는 시점을 가지는 점에 주의하여야 한다. 이런 점이 GTM, 나아가 GoldSim의 모사적 장점이기도 하며 수학적으로 엄밀하지 않은 점이기도 한 것이다.

다시 언급하지만, GTM에서의 농도는 일반적인 이동 모델에 의해 지배되는, 고체 질량/유체 부피(M/L)만이 농도가 아니고, 고체 내 고체(M/M)도 기술하는, 즉 specific 질량 개념임에 유의하여야 한다. 이러한 specific 질량로서의 독특한 개념의 농도는 Pathway 사이에서 매질에 실어 질량만을 전달해 주고 매질 자신은 정작 이동을 하지 않는 개념으로 설명될 수 있어서 “농도”를 이동 시키는 매질이 고체일 수 있다는 점에 극히 유의하여야 하는 것이다. 가령 “A” pathway에서 “B” pathway로 질량 전달을 생각해 보자. “A” pathway의 “C” 고체에 있는 어떤 질량의 농도가 “B”로 이동하는 경우, (10) 식과 같이 이 질량은 “C”고체의 이동률에 의해 결정되는 속도에 의해 “B”로 전달될 뿐, “C” 자체는 전달되지 않아 “A”에서의 “C”의 부피에 어떤 영향도 주지 않게 되는 개념이다. 또한 만일 전달된 “B”에 하필 “C”매질이 존재하지 않는 경우에는 “C”내의 질량은 아예 전달되지 않는 못하고 “A”에 그대로, 가령 침전물 등으로 남는 개념이 된다.

$$\{\text{Advective mass flux, M/T}\} = \{\text{Concentration, M/L}^3 \text{ or M/M}\} * \{\text{Flow rate given by user, L}^3/\text{T or M/T}\} \quad (10)$$

4. 지진에 따른 MWCF 내 유량 증가 모델링의 예시

이제 이러한 논의를 바탕으로 실제적으로 Pathway를 사용하는 데 있어 주의할 점을 간단한 예시를 통하여 논의해 보기로 한다. Cell pathway는 물리적 매질로 간주할 수 있으니 모델링 상 별다른 문제가 없을 수 있으나, Pipe pathway의 경우에는 전술한 대로 실제 처분시스템 내 핵종의 이동을 모사하는 경우, 수학적 연산자로서의 Pipe pathway는 실제 물리적인 매질 사이에서 문제의 소지가 있을 수 있다는 것을 이 절에서 보이고자 한다.

A-KRS 안전성 평가 모델에서는 주요한 사고 시나리오로서 지진을 고려하고 있다[5,6]. 지진이 발생하면, 주요 지하수 유동대(MWCF)내 유량률이 증가하는 것으로 모사된다. 이 MWCF는 암반 지하 매질에서 지하수의 유동이 주로 일어나는 곳으로 핵종의 이동 측면에서 매우 중요한 평가 대상으로 간주된다. 이러한 MWCF 내에서의 유량이 갑자기 변화하는 상황을 상정할때, GTM에서는 이러한 상황을 즉각적으로 정확하게 반영할 수 있도록 모델링이 되어야 하지만, 불행히도 일반 수치모델과는 달리 GTM으로는 이러한 시나리오를 정확하게 반영하기는 것이 어렵다. 지진 전에 이미 Pipe pathway에 전달된 핵종의 질량은 응답함수에 따라 지진의 영향을 받지 않고 Pipe pathway의 출구로 전달될 수 있기 때문이다. 이는 전술하였듯 Pipe pathway가 그 자체로 pipe, 즉 물리적인 매질이 아니고, 그저 수학적인 연산자이기 때문이다. Pipe pathway에 적용된 이동 및 유량률은 물리적 매질에서처럼 Pipe의 입구에서의 것이 아니라 다음 pathway로 질량을 전달해 주는 매질자체의 것이란데에서 의문이 보다 더 명확해진다. 지진으로 인하여 MWCF 내의 유량률이 가령 10배로 늘어난다는 의미는 그 Pipe로 들어가는 유량이 10배가 증가한다는 것이 아니라, 그 Pipe에서, 그것도 그 Pipe pathway의 내부가 아닌, Pipe pathway의 출구에서 다른 pathway로 10배 더 빠른 유속으로 질량을 전달한다는 의미일 뿐이다. 이 때문에 실제 물리적인 매질로 간주할 수 있는 연속된 Cell을 이용하여 MWCF를 모사하는 편이 당장은 더 정확하게 보이는 이유이다. 그렇지만 Cell은 물론 암반 조직으로의 확산을 지원하지 않아 그 사용에 한계를 가지고 있긴 하다. Fig. 6은 지진의 경우를 가상하여, MWCF 내의 유량률의 갑작스런 변화를 고려하는, GTM의 pathway를 이용해서 구성한 간단한 GoldSim 프로그램 모듈을 보이고 있다.

이 모델에서 보이는 것 처럼 길이 100 m를 갖는 MWCF 내에서의 어떤 핵종의 이동을 생각해 보자. Pipe pathway의 면적을 1 m^2 로 하고 Pipe pathway에서의 유동률을 $100 \text{ m}^3/\text{yr}$ 로 하고, 매질은 지하수로만 채워져 있다고 가정한다. MWCF 입구에서의 핵종의 질량 유입률은 100 g/yr 로 주고, 이 때 비교 목적상 방사성 붕괴나 지연 등도 고려하지 않는다. 다만 확산도(diffusivity)는 MWCF 내 총 이동 길이의 10%로 가정하기로 한다. 그리고 Pipe pathway와 Cell pathway의 모델링 비교 목적 상, 암반 조직 내로의 확산은 일어나지 않는 것으로 한다.

이러한 MWCF를 단일한 Pipe pathway로 모델링 하거나, 다수의 Pipe, 즉 2개, 5개, 10개, 그리고 20개의 Pipe pathway로 차례로 모델링하여 100 m 길이의 MWCF에 대하여 출구에서의 질량 즉 핵종의 유출률을 상호 비교한 결과를 Fig. 7에 보였다. 같은 매질을 동일한 Pipe pathway를 사용하여 모사하고 있음에도, 그림에서 보면 Pipe pathway의 갯수를 어떻게 사용하느냐에 따라 이 둘 사이의 결과가 서로 다르게 나타나는 것을 알 수 있다. 지진이 일어나는 시점, 즉 핵종이 MWCF에 유입되고 나서 1.5 년이 지난 후의 유출률이 갑자기 증가하는 과과곡선을 보면, 보다 많은 Pipe를 사용하면 피크가 두드러지게 증가하는 것을 알 수 있다. 사실 이는 명백한 오류인데, 동일한 매질에 대하여 Pipe를 하나를 쓰든, 다수를 쓰든 그리 큰 차이가 발생해서는 안 된다. 왜냐 하면 Pipe pathway라는 연산자 자체가 비록 질량을 이동시키기는 해도 농도를 기술하는 이류-분산 식에 대한 엄밀한 해석해를 빌려 사용하는 것이므로 pipe 개수의 선택에 따른 그 어떤 수치적 오류가 나타날 수가 없어야 하기 때문이다. Time step을 작게 해도 이 문제에서는 차이가 없어야 한다. 시간 당 일정한 질량의 공급률이 유지되기 때문이다. 그런데도 그림에서는 명백히 차이가 보이는 것을 알 수 있다. 이 뿐만 아니라 이러한 증가의 추세를 보면, Pipe의 개수에 따라 계속적으로 진행되긴 하지만 여전히 어느 정도의 일정한 값으로 수렴하고 있는 것으로는 보이지 않는 것을 알 수 있다. MWCF 매질의 입구, 즉 최초의 Pipe pathway의 입구에서 100 g/yr 의 유입률로, 즉 연간 100 g의 핵종이 지속적으로 공급되는 선원항을 고려하고 것에 비추어 볼 때, 1.5 년이 경과하여 지진이 발생하면 유동률이 10배로 상승하게 되고, 이에 따라 지진이 발생한 시간 1.5 년이 지난 직후에 즉각적으로 핵종의 유출률은 정상상태일 때와 다르게 10배 가까이 증가하여, 거의 $1,000 \text{ g/yr}$ 에 근접한 값의 유출률을 가지는 것이 타당해지기 때문이다.

또 다른 결과로서 Fig. 8에서는, Cell pathway만을 사용한 경우에 대한 결과를 도시하였다. 연속된 Cell로 MWCF가 모사되는 경우로 하여 Cell수를 각각 2개, 5개, 10개, 그리고 20개로 변화시켰다. 이 경우도 Pipe pathway의 경우와 다르지 않게 외관상으로는 cell의 수를 증가시켜 나가면 이에 따라 피크가 보다 정확한 값, 즉 $1,000 \text{ g/yr}$ 로 증가하는 것으로 나타나는 것을 알 수 있다. 확실히 Pipe pathway만을 사용했을 때와는 다른 양상을 보여준다. 또한 이렇게 Cell pathway

Fig. 6. MWCF modeled with Pipe and Cell pathways for comparison purpose.

Fig. 7. Nuclide release rates from the MWCF modeled with various number of Pipe pathways.

Fig. 8. Nuclide release rates from the MWCF modeled with various number of Pipe pathways.

Table 1. Peak release rates at their peak release times

Time, yr	1 pipe	2 pipe	5 pipe	10 pipes	20 pipes	2 Cells	5 Cells	10 Cells	20 Cells
1	56.244	52.898	48.723	45.631	29.438	58.042	53.794	51.226	48.975
1.05	60.703	59.189	58.479	58.515	43.283	60.716	58.047	57.115	56.898
1.1	64.824	64.973	67.348	70.152	57.873	63.258	62.081	62.68	64.338
1.15	68.603	70.195	75.019	79.73	71.303	65.669	65.874	67.844	71.087
1.2	72.048	74.835	81.37	86.978	82.153	67.951	69.413	72.556	77.016
1.25	75.172	78.901	86.432	92.063	89.884	70.108	72.692	76.79	82.075
1.3	77.99	82.424	90.331	95.396	94.773	72.143	75.708	80.542	86.276
1.35	80.522	85.442	93.246	97.449	97.534	74.059	78.468	83.823	89.675
1.4	82.791	88.005	95.367	98.646	98.935	75.861	80.977	86.658	92.363
1.45	84.816	90.164	96.875	99.309	99.578	77.554	83.247	89.079	94.442
1.5	86.619	91.97	97.925	99.66	99.846	79.142	85.291	91.125	96.017
1.55	89.472	113.4	237.19	450.91	695.23	734.47	869.1	934.06	967.12
1.6	122.51	204.51	423.48	644.24	747.04	524	642.36	697.02	727.19
1.65	166.31	270.17	493.41	545.13	472.49	340.9	359.03	351.26	340.53
1.7	184.99	290.82	446.68	364.29	262.22	226.21	195.54	168.26	149.59
1.75	191.11	290.07	348.81	224.03	158.4	162.97	129.65	113.44	106.23
1.8	193.2	280	255.27	148.15	117.82	130.41	108.15	102.09	100.53
1.85	193.84	263.76	189.6	115.93	104.34	114.35	102.05	100.27	100.03
1.9	193.53	243.72	148.74	104.87	100.84	106.65	100.48	100.03	100
1.95	192.27	222.38	125.71	101.3	100.11	103.04	100.11	100	100
2	190.05	201.7	113.32	100.34	99.996	101.38	100.02	100	100

로 구성한 경우, cell의 개수에 따라 피크값의 차이는 여전히 존재한다 해도 Pipe pathway와는 다르게 피크의 위치가 거의 변하지 않는 것을 알 수 있다. 이 점은 Table 1에서 잘 확인할 수 있으며 이 점이 매우 중요하다. 이는 매질 내에 갑작스러운 변화가 있는 경우, Cell pathway로 모델링하는 것이 Pipe pathway로 모델링하는 것 보다 더 정확한 결과를 준다는 의미일 수 있기 때문이다.

Pipe가 아마도 Cell과 같은 성격의 물리적 매질이었다면, 유한 차분법의 경우와 다르지 않게 Pipe 수를 증가 시켜나가며 보다 정확한 수치해를 얻어 내는 것이 가능하고, Pipe pathway와 Cell pathway에 의한 결과가 어느 정도 상호간에 일치하였을 것이다. 어쩌면 수치해를 사용하는 개념인 Cell pathway의 경우 보다도 더 정확한 값을 주는 것이 오히려 타당하다. Fig. 9에 Pipe pathway와 Cell pathway로 계산된 결과를 함께 도시한 것을 보면, Pipe pathway로 모델링한 경우는, Cell pathway로 모델링한 경우와 다르게, 지진이 일어난 후에 정확한 피크치를 주지도 않으며 피크가 나타나는 시간이 달라지는 것을 확인할 수 있다. 이러한 오류는 이전에 논의했듯 Pipe에서는 아무리 작은 거리를 모사하는 경우라 하더라도, Pipe에 대해서는 지진이 발생하는 순간에 이미 Pipe로 전달한 질량에 대해서는 지진에 따른 유량을 증가의 영향을 받지 않는 부분으로 여전히 남는 것에 기인하기 때문이다. 결국 GTM은 처분시스템 안전성 평가를 위한 핵종 거동 모사에 매우 유용한 도구임은 분명하지만 이러한 예와 유사한 경

우로 유동계가 급변하거나 매질 내에 질량의 변화가 있는 경우에 대한 모사에서 세심한 유의가 필요한 이유이다.

그러면 Pipe pathway로 모델링 된 경우와 다르게 언제나 Cell pathway가 매질에 갑작스런 변화가 발생한 경우를 잘 반영하며 훨씬 더 정확한 결과를 주는가? 그렇긴 하지만 사용된 cell의 갯수의 증가에 따라 파과 곡선들이 여전히 변화하는 것에 주의하여야 한다. 또한 Pipe pathway와 다르게 가령 조직 내 matrix diffusion등을 직접적으로 지원하지 않는 점이나, 단순한 매질 조차 소수의 pipe대신 다수의 cell로 모델링하여야 한다는 번거로움, 그리고 수치분산(numerical dispersion)에 의한 결과의 부정확성 등도 조심하여야 하는 점에도 유의하여야 한다.

수치분산에 대한 것은, 지진이 발생하지 않는 경우로서의 결과인 Fig. 10에서 잘 보여진다. Pipe이든 Cell이든 이 두 pathway로 모델링될 때, 그 pathway의 갯수에 거의 무관하게 피크 등이 대체적으로 서로 잘 일치하고 있는 것을 알 수 있으나, 다만 Cell pathway로 모사되는 경우, Cell의 갯수가 적어지면 이러한 수치분산 현상은 이에 반비례하여 두드러지게 나타나는 것을 알 수 있다. 이는 유한 차분법의 수치 모델의 특성을 따르는 Cell pathway의 모델링 상 당연한 결과이다.

한편 Pipe pathway의 경우도 Pipe의 개수에 따른 영향이 그림에서 나타나고 있는데, 이 역시 GTM에서의 time step과 Pipe의 개수의 상관관계에 따른 것으로 분석된다. 따라

Fig. 9. Nuclide release rates from the MWCF modeled with various number of Pipe and Cell pathways under an earthquake scenario.

Fig. 10. Nuclide release rates from the MWCF modeled with various number of Pipe and Cell pathways under the normal scenario.

서 GTM은 처분시스템 안전성 평가를 위한 핵종 거동 모사에 매우 유용한 도구임은 분명하지만 이러한 예에서 시사하는 바 대로 GTM에서의 pathway의 사용은 세심한 유의가 필요할 것으로 보인다.

5. 결론 및 논의

이 연구를 통하여, 상용의 GoldSim과 GTM 모듈을 이용하여 처분 환경과 같이 복잡한 질량 이동 시스템을 모사하는데 있어서, GTM의 특성을 보다 정확하게 이해하고 이를 사용하여 실제 처분시스템의 안전성 평가 프로그램을 개발하는 경우 발생할 수 있는 오류와 이를 회피할 수 있는 대안을 논의하였다. 논의와 예시를 통하여 GTM은 처분시스템 안전성 평가를 위한 핵종 거동 모사에 매우 유용한 도구임은 분명하지만 이러한 예에서 시사하는 바 대로 GTM에서의 pathway의 사용은 세심한 유의가 필요하다는 것도 보였다. 따라서 처분시스템과 같이 갑작스런 변화를 수용하는 매질 내 질량 전달에 관한 모사 프로그램을 개발하는 경우, GTM에서 제공되는 pathway의 사용에 관련하여 아래와 같이 정리해 볼 수 있다:

- 1) GTM은 다양한 형태의 pathway를 제공하여 매질 내에서 질량 전달을 효율적으로 모사가 가능하도록 하며 질량 전달이 일어나는 처분시스템 내 다양한 매질의 구성 요소로서 활용되지만, GTM에서는 이러한 pathway 사이에서 질량의 전달만 모사할 뿐이지, 농도 자체나 질량 플럭스 그대로의 전달은 이루어지지 않는 점에 극히 유의하여야 한다. 뿐만 아니라 GTM에서는 질량의 전달 외에 그 어떤 매질에만 국한된 형태, 가령 지하수의 유동 방정식 등을 다루는 지배 방정식도 사용하지 않는다는 점을 염두에 두어야 한다.
- 2) GTM은 pathway 사이에서 질량, 가령 핵종만을 서로 전달해주고 받는 방식이다. 가령 Cell과 Pipe가 차례로 연계된 매질에서 지하수와 토양 침식을 통한 질량 전달의 경우라면, Pipe는 Cell pathway에서 전달 받는 지하수와 토양 각각의 유량률과 이동률에 의해 결정되는 전달 속도를 통해 오로지 시간에 따른 질량만을 전달받으며, 이렇게 전달받은 입력 신호로서의 질량 이동률은 바로 Pipe pathway라는 연산자에 의해

Pipe pathway출구에서의 응답함수인 질량 이동률만을 나타내게 된다. 이 때 Pipe pathway는 다시 사용자에게 의해 Pipe pathway로 부여된 매질의 유량률을 가지고, 질량 즉 핵종을 다음 pathway에 다시 전달하게 되는 것임을 유의하여야 한다.

- 3) 예시로써, 단일한 Pipe pathway와 다수의, 일련의 Pipe pathway로 모델링된 MWCF에 대하여 출구에서의 핵종의 유출률을 갖는 경우, 핵종의 이동 결과를 상호 비교한 결과에서 보면, MWCF 출구에서의 질량의 전달률이 뚜렷한 차이를 보이게 나타나는 것을 알 수 있었다. 지진이 일어나는 시점, 즉 1.5년이 지난 직후 핵종의 유출률이 갑자기 증가하는데, 많은 pipe를 사용하는 경우 정확한 모사에 근접해 가는 것으로 나타나기는 하지만 여전히 그 피크값이 정확한 값으로 수렴하지도 않고 피크가 나타나는 시점도 변화하면서 수렴하지 않고 지속적으로 증가하는 것 처럼 보이는데 반해, Cell pathway를 사용한 경우는 cell의 개수를 증가시킬 때 보다 정확한 피크 값으로 접근 하면서 피크가 나타나는 시점도 잘 일치하는 것으로 나타나고 있다는 결론을 얻었다. 이는 피크값의 차이는 연속된 Cell로 모델링하는 것은 Pipe의 경우와 다르게 수치해석의 유한 차분 모델과 사실상 동일한 방법으로 물리적인 cell수가 증가하며 차분에 따른 수치적 오류를 줄이기 때문인 것으로 보인다. 이는 분명히 Cell pathway가 갑작스러운 변화를 포함하는 매질 내 이동을 Pipe pathway보다 정확히 모사할 수 있다는 의미이긴 하지만, Pipe pathway와 다르게 가령 조직 내 matrix diffusion등을 직접적으로 지원하지 않는 점, 단순한 매질 조차 소수의 pipe대신 다수의 cell로 번거롭게 모델링하여야 하는 점, 그리고 수치분산에 대해서도 조심하여야 하는 불편함을 안고 있는 점을 고려하여야 하는 점이 있음에 유의하여야 할 것으로 보인다.

감사의 글

이 논문은 2013년도 정부(미래창조과학부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임.
(원자력연구개발사업, No. 2012M2A8A2025589)

REFERENCES

- [1] GoldSim Contaminant Transport Module, User's Guide, Version 11, GoldSim Technology Group (2013).
- [2] C. Markley, O. Pensado, J.P. Gwo, J. Winterle, T. Ahn, R. Benke, T. Cao, H. Gonzalez, A. Gray, X. He, R. Janetzke, H. Jung, G. Oberson, P. Shukla, T. Sippel, S. Stothoff, and L. Tipton. "SOAR: A Model for Scoping of Options and Analyzing Risk: Version 1.0, User Guide", ML112440119, Center for Nuclear Waste Regulatory Analyses, San Antonio, Texas, USA, August 2011.
- [3] H.J. Choi, "Preliminary conceptual design of a geological disposal system for high-level wastes from the pyroprocessing of PWR spent fuels", Nuclear Engineering and Design 241, pp. 3348-3356 (2011).
- [4] Y.M. Lee, "A GoldSim model for the afety assessment of an HLW repository", Progress in Nuclear Energy, 51, pp. 746-759 (2009).
- [5] Y.M. Lee, "Evaluation of Nuclide Release Scenarios for a Hypothetical LILW Repository", Progress in Nuclear Energy, 53, pp. 760-774 (2011).
- [6] Y.M. Lee, "An Evaluation of an Earthquake Scenario for a Pyroprocessed Waste Repository", Progress in Nuclear Energy, 66, pp. 133-145 (2013).
- [7] Y.M. Lee and J.T. Jeong, "A-KRS GoldSim Model Verification: A Comparison Study of Performance Assessment Model", J. Korean Radioact. Waste Soc., 11(2), pp. 103-114 (2013).
- [8] Y.M. Lee and J.T. Jeong, "Sensitivities of Principal Parameters Associated with the Pyroprocessed Waste Repository System to Exposure Rate", Proceedings of Korea Radioactive Waste Society Spring Meeting, pp. 377-378, Chang Won (2012).
- [9] Y.M. Lee and J.T. Jeong, "A Modeling Approach to Nuclide Transport in the Far-field of the Pyroprocessed Waste Repository", Proceedings of Korea Radioactive Waste Society Autumn Meeting, pp. 289-290, Busan (2012).
- [10] Y.M. Lee and J.T. Jeong, "A GoldSim Modeling Approach in and around the Pyroprocessed Waste Repository", Proceedings of Korea Radioactive Waste Society Spring Meeting, pp. 199-200, Gyeongbuk Univ. (2013).