

공학적 방벽 열화평가를 위한 지화학 모델링 검증 고찰

김건영, 류지훈, 고용권, 정해룡*

한국원자력연구원, 대전광역시 유성구 대덕대로 1045

*한국방사성폐기물관리공단, 대전광역시 유성구 대덕대로 1045

kimgy@kaeri.re.kr

1. 서론

장기간에 걸친 공학적방벽과 지하수와의 반응, 특히 콘크리트-지하수 반응 및 이로 인한 콘크리트 방벽내의 시멘트계 물질의 물리/화학적 변화특성을 예측 할 수 있는 지화학 모델링은 처분장 안전성 평가를 위해 매우 중요하다. 콘크리트와 지하수 반응의 해석과 이와 관련되어 수행된 기존의 수많은 모델링들은 시멘트의 수화과정 및 열화과정에 의한 다양한 조성광물들의 복잡한 화학과정에 그 초점을 맞추고 있다. 이 중 시멘트의 수화과정 및 열화과정은 콘크리트와 지하수 반응 체계를 개발하는데 핵심적인 내용이며 이 과정들을 이해하기 위해서는 무엇보다 시멘트 수화과정과 열화과정과 관련된 화학과정을 이해하는 것이 중요하다. 따라서 시멘트의 수화과정과 열화과정을 열역학 및 화학적으로 정량화 하려는 노력이 많은 연구들에 의하여 시도 되어왔다. 하지만 시멘트의 수화과정과 열화과정은 다양한 화학 과정들이 매우 복잡하게 얽혀있기 때문에 이러한 과정들을 모델링하는 일은 그리 쉬운 일이 아니다. 또한, 현재까지 실험연구에 의해 조사된 시멘트의 수화과정과 열화과정에 의해 생성된 광물들의 화학성분이 매우 방대하고 또한 아직까지 명확하게 정의되지 못한 광물조성들이 많이 존재하기 때문에 이에 따르는 방대한 열역학데이터 베이스를 가지고 있는 검증된 모델링이 필요하다. 본 연구에서는 콘크리트 열화평가를 위해 콘크리트-지하수 반응체계를 모델링하기 위해서 PHREEQC를 선택한 이유 및 이 프로그램을 본 연구목적에 적용하였을 때 적합성 여부를 평가해보았다. 즉, 수행하고자 하는 연구목적에 따라 PHREEQC 프로그램을 선택하여 모델링을 수행할 때 무엇보다 이 모델링 프로그램으로 본 연구목적을 달성할 수 있을지에 대한 검증이 필요하며, 따라서 본 연구에서는 연구 목적을 달성하기 위하여 설정된 개발과정들과 연계된 PHREEQC 프로그램의 이용 사례들을 기존 문헌에서 살펴봄으로써 PHREEQC

프로그램이 설정된 연구목표를 정확하게 달성할 수 있을지를 판단하고자 하였다.

2. 본론

2.1 모델링 프로그램 검증의 정의

기존 문헌들로부터([1],[2],[3],[4]) 정의된 모델링 프로그램의 'verification' 과 'validation'에 대한 내용을 정리하면 다음과 같다.

Verification : 어떤 모델링 프로그램이 연구목적에 맞는지, 즉 그 프로그램이 본 연구 목적을 위해 적절한 모델체계와 정확한 수학적 계산을 수행할 수 있는지를 확인 하여야 한다.

Validation : 모델링 프로그램에 의하여 실행된 결과가 그 모델링 프로그램과는 독립적으로 실행된 실험의 결과와 비교 분석되어야 한다. 아울러 어떤 연구에 사용된 모델링 프로그램을 충분한 실험결과에 의하여 비교하여 모델링에 의해 계산된 예측이 정확한지에 대한 평가가 이루어져야 한다.

2.2 콘크리트 열화평가에 PHREEQC의 적용사례

PHREEQC는 시멘트의 수화과정은 물론이고 열화과정 그리고 다양한 화학과정에 따라 생성되는 광물들의 열역학적 특성들을 조사하기 위한 연구 등에 다양하게 사용되어 왔다. 또한 시멘트 광물들과 용해된 특정 화학요소들과의 상호반응을 조사하기 위하여 모델링 프로그램을 적용한 사례들도 있다. 이외에도 공학적 방벽에서의 시멘트 열화과정을 모델링하기 위하여 PHREEQC를 사용하였고 더 나아가, 방사성폐기물처분장에 사용될 시멘트의 열화과정과 그 영향에 대하여 PHREEQC를 사용하여 예측하고 그 결과물을 제시한 사례도 있다 (표 1).

콘크리트와 지하수 반응체계를 개발하기 위하여 시멘트의 수화과정과 열화과정을 모델링 하기 위하여 기존연구사례들을 검토해 볼 때 그 들 연구 사례에서 PHREEQC를 이용하여 그 연구 목적을 정확히 달성하였다고 볼 수 있다. 기존 문헌에 따르

면 시멘트의 수화과정을 시작으로 열화과정 및 시멘트 관련 각종 광물들에 대한 특성과 다른 화학종과의 상호반응 등 시멘트와 관련하여 방대한 연구과제에서 PHREEQC 프로그램이 사용되어왔고 실질적으로 공학적방벽내에서 시멘트 열화과정에 대한 연구사례와 스웨덴의 방사성폐기물 처분장에 사용될 시멘트 열화과정을 예측하고자 PHREEQC를 사용하기도 하였다. 이들 대부분의 연구사례에서는 모델링과 실험이 동반되어 실질적으로 모델링에 대한 검증 'validation'이 이루어 졌다. 따라서 이러한 기존 연구사례에 비추어 볼 때 본 연구에서 수행하고자 하는 콘크리트-지하수 반응체계 개발을 위하여 PHREEQC 프로그램을 선택한 것에 대한 검증 'verification' 또한 기존문헌조사에 따른 사례들에 의해 입증될 수 있다.

Table 1. Cases of application of PHREEQC code for the cement degradation assesement

대상	연구과제내용	참고문헌
시멘트 수화과정	실험을 통하여 시멘트 공극수를 분석하고 모델링을 통하여 수화과정에 의한 생성광물의 포화도 조사	Rothstein et al. (2002) 와 Thomas et al. (2003)
특정광물의 특성 조사	실험과 모델링을 통하여 시멘트 수화과정에 따라 생성된 광물들의 열역학적 특성조사	Reardon and Fagan (2000)
시멘트페이스트와 다른 화학요소들과의 반응	실험과 모델링을 통하여 시멘트 수화과정에 의해 생성된 광물과 다른 화학요소들사이의 반응과정 (특히 흡착과정)을 조사	Elakneswaran et al. (2009)
시멘트 침출과정	실험과 모델링에 의한 시멘트 페이스트로부터의 침출현상 조사	Halim et al., (2005), Martens et al., (2010)
시멘트 열화과정	시멘트 열화과정에 mass balance 개념을 적용하여 장기적인 시멘트 열화과정을 예측	Jacques et al. (in press)
시멘트와 점토광물의 반응	시멘트/점토광물간의 화학적 반응을 모델링하고 실험과 비교분석	Gaucher et al., (2004)
공학적 방벽에서 시멘트 열화과정의 영향	스웨덴 방사성폐기물 처분장 환경에서 시멘트 열화과정에 의한 영향을 모델링에 의하여 예측	Höglund and Konsult, (2001)

본 연구 과제를 수행하기 위해 선택한 모델링에 대한 'validation'은 앞에서 정의한 그대로 실험을 통한 검증이 우선시 되어야 한다. 연구목적에 적합한 실험이 모델링과 동반되어 서로의 결과를 비교할 때 그 모델링에 대한 'validation'이 이루어질 수 있을 것이다. 하지만 어떤 이유에서건 실험이 모델링과 동반되지 못하는 경우 (예로 연구목표가 시멘트의 열화과정을 장기간에 걸쳐 예측하고자 하는 경우), 실험결과는 기존문헌조사에 의하여 얻어질 수밖에 없고 이러한 기존문헌조사에 의해 취합된 실험결과로 모델링의 결과가 비교되어야 한다. 또 다른 검증방안으로써 다른 모델링 프로그램을 사용하여 그 모델링 결과를 비교분석하는 방법이 있을 수 있다. 예를 들어 콘크리트 열화평가를 위해서 수행하고 있는 지화학 모델링의 다양한 검증을 위해서 PHREEQC 외에 TOUGHREACT 혹은 EQ3/6 등을 사용하여 그 결과를 상호 비교함으로써 사용된 지화학 모델링의 결과에 대한 검증을 수행할 수도 있을 것이다.

3. 감사의 글

본 연구는 2010년도 지식경제부의 재원으로 한국에너지 기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 연구 과제입니다(No.2009T100100523).

4. 참고문헌

- [1] AIAA, 1998. Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations. American Institute of Aeronautics and Astronautics, AIAA-G-077-1998.
- [2] ASME, 2006. Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics. American Society of Mechanical Engineers, ASME V&V 10-2006.
- [3] DoD, 1996. DoD Instruction 5000.61: Modeling and Simulation (M&S) Verification, Validation, and Accreditation (VV&A). From www.dmsomil/docslib.
- [4] Roache, P.J., 1998. Verification and Validation in Computational Science and Engineering. Hermosa Publishers, Albuquerque, NM.