TUNNEL & UNDERGROUND SPACE Vol.30, No.5, 2020, pp.446-461
https://doi.org/10.7474/TUS.2020.30.5.446 ISSN: 1225-1275(Print) ISSN: 2287-1748(Online)

ORIGINAL ARTICLE

MX80 벤토나이트 펠렛의 열-수리-역학적 복합거동 모델링

이창수[1]*, 최희주[2], 김건영[2]

[1]한국원자력연구원 선임연구원, [2]한국원자력연구원 책임연구원

Numerical Modeling of Coupled Thermo-hydro-mechanical Behavior of MX80 Bentonite Pellets

Changsoo Lee[1]*, Heui-Joo Choi[2], and Geon-Young Kim[2]

[1]Senior Researcher, Korea Atomic Energy Research Institute
[2]Principal Researcher, Korea Atomic Energy Research Institute

*Corresponding author: leecs@kaeri.re.kr

Received: June 23, 2020
Revised: July 22, 2020
Accepted: July 24, 2020

ABSTRACT

Numerical simulations of CIEMAT column test in Spain are performed to investigate the coupled thermo-hydro-mechanical (THM) behavior of MX80 bentonite pellets using TOUGH2-FLAC3D. The heater power and injection pressure of water in the numerical simulations are identical to those in the laboratory test. To investigate the applicability of the thermo-hydraulic (TH) model used in TOUGH2 code to prediction of the coupled TH behavior, the simulation results are compared with the observations of temperature and relative humidity with time. The tendencies of the coupled behavior observed in the test are well represented by the numerical models and the simulator in terms of temperature and relative humidity evolutions. Moreover, the performance of the models for the reproduction and prediction of the coupled TH behavior is globally satisfactory compared with the observations. However, the calculated stress change is relatively small and slow due to the limitations of the simple elastic and swelling pressure model used in numerical simulations. It seems that the two models are insufficient to realistically reproduce the complex coupled THM behavior in the bentonite pellets.

Keywords: Coupled Thermo-Hydro-Mechanical behavior, Bentonite pellets, Numerical simulation, TOUGH2-FLAC3D

초록

MX80 벤토나이트 펠렛에서의 열-수리-역학적 복합거동 특성을 파악하고자 TOUGH2-FLAC3D 시뮬레이터를 이용하여 스페인 CIEMAT에서 수행된 컬럼 시험에 대한 수치해석을 수행하였다. 수치해석에서는 실험실에서 사용된 것과 동일한 히터 파워와 물 주입압을 경계조건으로 설정하고 해석을 수행하였다. 사용된 열-수리 모델이 벤토나이트 펠렛의 복합거동 예측에 적용하기 적합한지 판단하기 위해 가열과 물 주입에 의한 벤토나이트 펠렛에서의 온도와 상대습도 변화를 시간 경과에 따라 잘 예측할 수 있는지를 살펴보았다. 계산된 결과가 계측된 온도와 상대습도 변화 경향을 적절하게 재현 할 수 있었기 때문에 사용된 열-수리 모델은 벤토나이트 펠렛의 열-수리 복합거동을 예측하고 재현하기에 적절한 것으로 판단된다. 하지만, 물 주입 이후의 계산된 응력변화가 상대적으로 작고 느리게 변화되는 것으로 보아 사용된 탄성모델과 스웰링 모델에 한계점이 존재하는 것으로 보이며, 사용된 두 역학 모델로 완충재의 복잡한 열-수리-역학적 복합거동을 현실적으로 재현하기에 부족한 것으로 판단된다.

핵심어: 열-수리-역학적 복합거동, 벤토나이트 펠렛, 수치해석, TOUGH2-FLAC3D

© The Korean Society for Rock Mechanics and Rock Engineering 2020. This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (http://creativecommons.org/ licenses/by-nc/4.0/) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

1. 서 론

고준위방사성폐기물(high-level radioactive waste, HLW)의 특성 중 하나인 방사성 붕괴열(decay heat)은 고준위방사성폐기물 처분 시스템 및 처분장 주변 암반의 온도 분포에 영향을 미칠 뿐만 아니라 온도 변화에 따른 열응력을 유발하여 처분시스템 및 처분장 주변 암반의 응력 상태에 영향을 미치게 된다. 그리고 처분 시스템으로 유입되는 지하수는 벤토나이트 완충재의 열전도도를 변화시켜 처분 시스템의 열적 거동을 변화시키게 되고, 포화도 변화에 따른 팽윤압(swelling pressure)이 발생하여 처분 시스템 및 처분장 주변의 응력 상태를 변화시키게 된다. 이러한 열응력과 벤토나이트 완충재의 팽윤압은 처분 시스템과 처분장 주변의 응력을 변화시킬 뿐만 아니라 벤토나이트 완충재 및 암반의 투수계수와 모세관압(capillary pressure)에 영향을 주게 되어 수리적인 거동에 영향을 미치게 된다(Fig. 1). 이러한 열-수리-역학적 복합거동(coupled thermo-hydro-mechanical (THM) behavior)의 변화는 장·단기 고준위방사성폐기물 처분장의 안전성 및 안정성에 영향을 미칠 수 있기 때문에 고준위방사성폐기물 처분장 부지선정, 설계, 운영을 위해서는 방사성 붕괴열의 발생과 지하수 유입에 따른 THM 복합거동 변화에 대한 이해와 이를 분석하고 예측할 수 있는 수치해석 코드 및 모델이 반드시 필요하다.

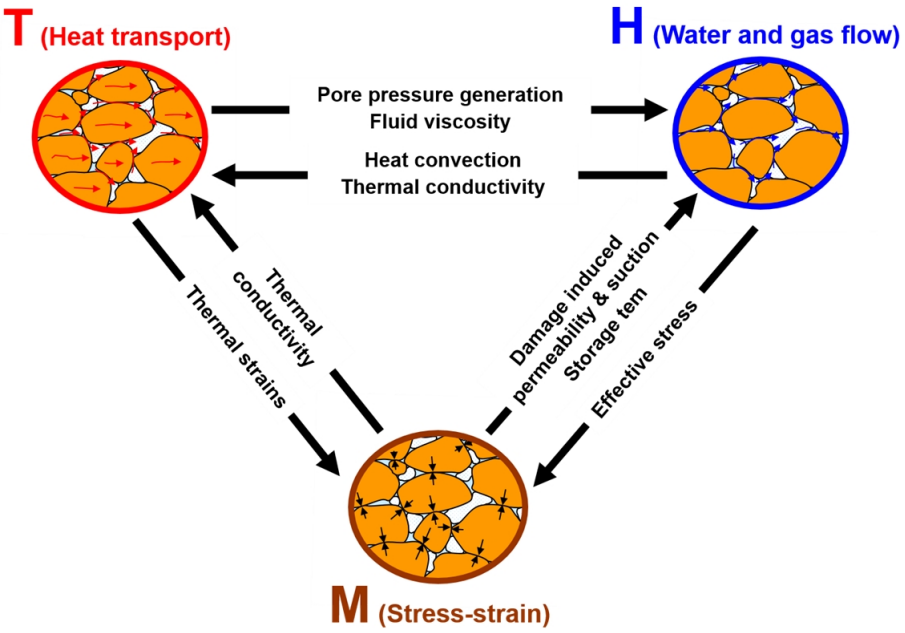

Fig. 1. Mutual relationship between THM processes in a porous medium (CODE_BRIGHT, 2004)

하지만 THM 복합거동은 비선형적인 거동을 보이며, 구성방정식에 필요한 인자 수가 많기 때문에 복합 거동을 예측하는 것은 매우 어렵다. 이러한 어려움을 효과적으로 해결하고 상호 검증하고자 세계 각국의 모델링 전문가들이 모여 국제 공동연구인 DECOVALEX(DEvelopment of COupled models and their VALidation against EXperiments) 프로젝트를 1992년부터 진행해오고 있다(Birkholzer et al., 2019). DECOVAELX 프로젝트는 DECOVALEX-I을 시작으로 DECOVALEX-II, DECOVALEX-III, DECOVALEX-THMC, DECOVALEX-2011, DECOVALEX-2015, 그리고 DECOVALEX-2019를 거쳐 현재 DECOVALEX-2023이 진행 중에 있으며(Fig. 2), 지금까지 수행된 과제와 DECOVALEX-2023에서 현재 수행 중인 과제는 Appendix에 나타나있다.

한국원자력연구원의 경우, DECOVALEX-2011부터 참여하여 THM 복합 거동을 예측하는 모델링 기법을 개발하고 문제점을 개선하고자 하고 있다. 한국원자력연구원은 DECOVALEX-2011에 참여하여 FLAC3D를 이용하여 암반에서 예상되는 열-역학적 복합거동(coupled TM behavior) 특성을 규명하고 이를 수치해석적인 방법으로 평가하였으며(Kwon et al., 2013), DECOVALEX-2015에서는 암반 및 벤토나이트 완충재에서의 THM 복합거동 해석을 위한 수치모델을 선정하고 이를 TOUGH2-FLAC3D 시뮬레이터를 활용하여 THM 복합거동을 해석할 수 있는지 확인하고자 하였다. 본 논문에서는 TOUGH2-FLAC3D 해석시뮬레이터의 THM 수치모델을 검증하고 그 적용성을 검토하고자 DECOVAELX-2015 Task B에서 수행한 스페인 CIEMAT(Centro de Invstigaciones Energéticas, MedioAmbientales y Tecnológicas) 컬럼 시험 (column test) 모델링을 소개하고 한국원자력연구원이 수행한 모델링 결과와 실험 결과를 비교 및 분석하였다.

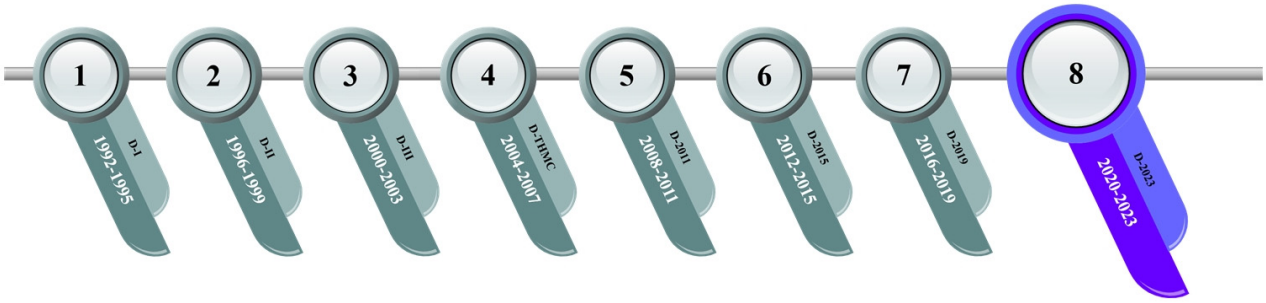

Fig. 2. Evolution of the DECOVALEX project

2. CIEMAT 컬럼 시험

스위스 Mont Terri Rock Laboratory에서 PEBS(Long-term Performance of Engineered Barrier System) 프로젝트의 일환으로 수행된 HE-E 현장 시험의 경우, 1:2 스케일의 가열 시험으로 최대 140°C까지 가열하고 공학적 방벽 및 자연 방벽에서의 THM 복합거동 특성을 파악하고자 하였다(Fig. 3). HE-E 현장 시험 수행 전, 스페인 CIEMAT에서는 HE-E 현장시험에서 사용할 벤토나이트 완충재 물질에 대한 THM 복합거동 특성을 규명하고자 실험실 규모의 컬럼 시험을 수행하였다. CIEMAT 컬럼 시험은 직경 7 cm 그리고 높이 약 50 cm의 크기로 설계되었으며, 방사성 붕괴열을 모사하기 위해 바닥부에 히터를 설치하였고 지하수 유입을 모사하기 위해 상부에 쿨링 시스템을 설치하고 물을 주입할 수 있게 설계되었다(Fig. 4). 또한, 온도와 습도를 계측하기 위해 히터로부터 약 10 cm, 22 cm, 그리고 40 cm 이격된 지점에 센서가 설치되었으며, 시험 수행에 앞서 열 손실을 막기 위해 열전도도가 0.25 W/mK인 15 mm 두께의 Teflon PTFE와 열전도도가 0.04 W/mK인 5 mm 두께의 dense foam을 이용하여 시험 장치를 단열처리하였다. 하지만, 시험이 진행되면서 시험 장치에서 열 손실이 발생하는 것으로 판단되어 5 mm 두께의 dense foam을 시험시작 후 1,518 시간이 지난 다음 열전도도가 0.04 W/mK 인 30 mm 두께의 Superwool 607 HT Blanket로 교체되었으며 열전도도가 0.034 W/mK인 두께 25 mm의 ISOVER BT-LV를 시험 장치 바닥부에서 5 cm 높이로 설치되었다. Fig. 5는 추가적인 단열재의 설치 전·후의 모습을 나타낸 것이다.

CIEMAT 컬럼 시험에 사용된 벤토나이트의 초기 함수율은 6.4%였으며, 약 7cm 높이의 7개의 층을 이루며 만들어졌다. 먼저, 7 cm 높이를 채우고 난 이후, 2.5 kg의 다짐장비(rammer)를 자유 낙하시켜 다짐을 하는 일련의 과정을 통해 시험장치 안에 완충재 물질을 채워 넣었다. 컬럼 시험에 사용된 벤토나이트의 기본 물성 및 초기 물성은 Table 1에 나타나 있다.

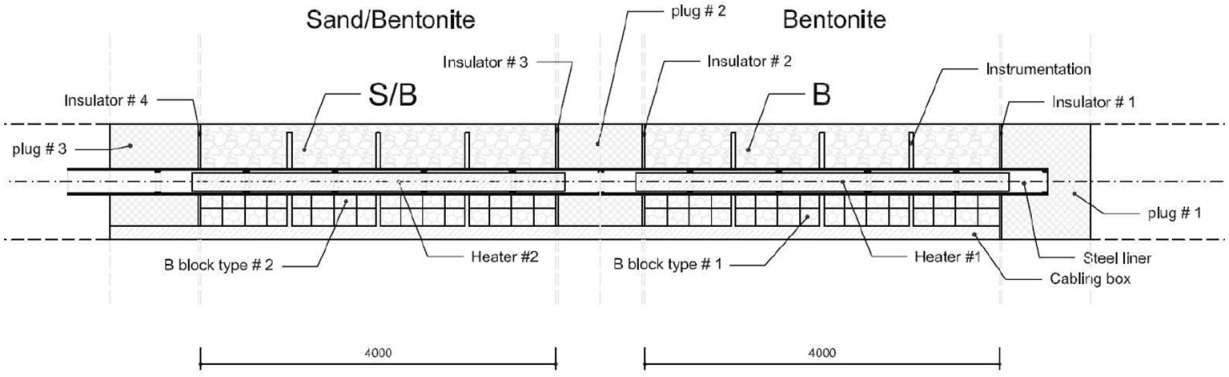

Fig. 3. Layout of the In-situ HE-E experiment (Villar et al., 2014)

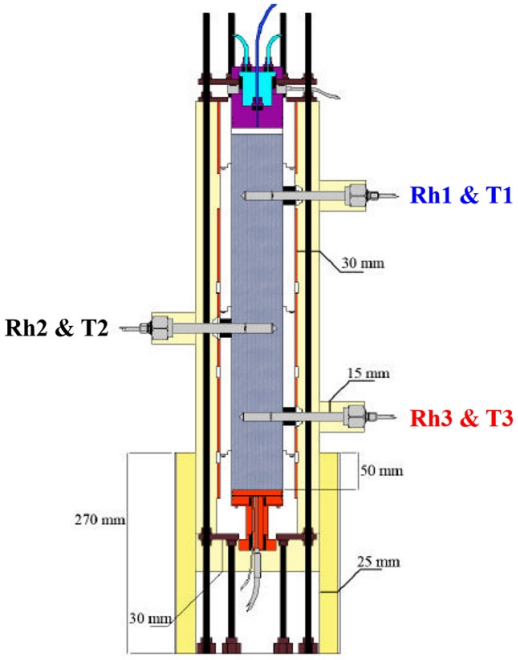

Fig. 4. Experimental layout and location of sensors (Villar et al., 2012)

Fig. 5. Cell B before being wrapped with the insulation material (left) and THM cells in operation (right) (Villar et al., 2012)

Table 1. Characteristics of the samples after compaction (Villar et al., 2014)

Properties (unit)	value	Properties (unit)	value
Initial water content (%)	6.4	Diameter (mm)	70.0
Degree of saturation (%)	22	Height (mm)	483.9
Sample mass (g)	3,094	Dry density (g/cm3)	1.53
Sample mass after drilling (g)	3,076	Porosity (%)	0.444
Volume of sensors (cm^3)	20	Void ratio	0.797
Theoretical dry mass (g)	2,891		

3. 수치해석 모델

3.1 시뮬레이터

벤토나이트 완충재에서의 THM 복합거동을 모델링하기 위해 미국 LBNL(Lawrence Berkeley National Laboratory)에서 개발한 TOUGH2(Pruess et al., 1999)와 Itasca consulting group에서 개발한 FLAC3D(ITASCA, 2009)를 연동하여 계산하는 TOUGH2-FLAC3D(Rutqvist, 2011) 해석 시뮬레이터를 이용하였다. TOUGH2에서 일정시간(△t)에 대해 열·수리 해석을 수행하고 TH 해석의 결과인 온도, 압력 그리고 포화도를 FLAC3D의 입력값으로 사용하여 역학적 해석을 수행하여 응력과 변위를 계산한다. 계산된 응력 값을 이용하여, 공극률과 투수계수 그리고 모세관 압력의 변화를 계산하여 TOUGH2의 입력값으로 사용하여 계산을 진행하였다(Fig. 6).

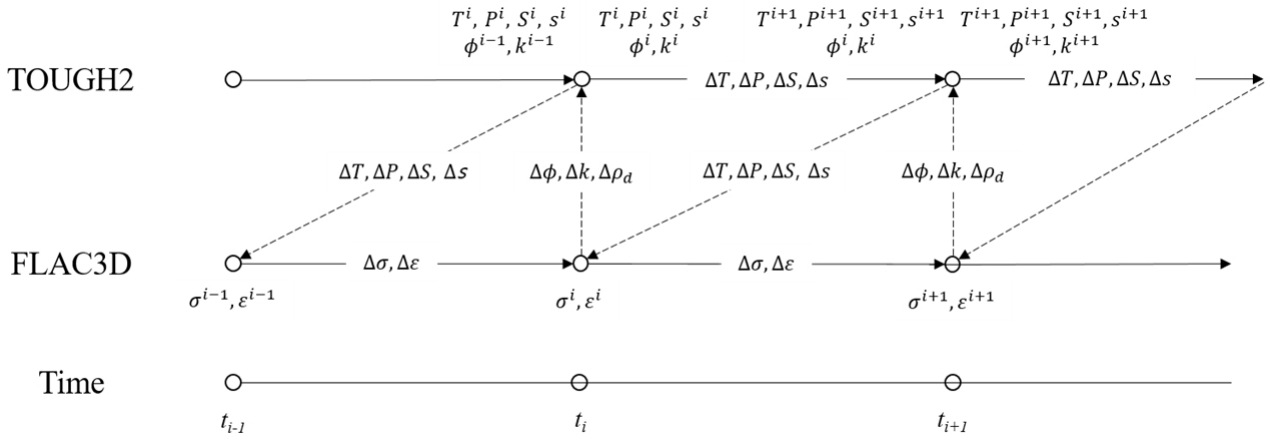

Fig. 6. Numerical procedure of a linked TOUGH2 and FLAC3D simulation with explicit sequential solutions (modified after Rutqvist et al., 2002)

3.2 초기조건 및 경계조건

컬럼 시험 해석을 위해 8008개의 요소로 TOUGH2-FLAC3D 모델 메쉬를 생성하였으며(Fig. 7), 모든 요소의 초기온도는 21.0°C, 그리고 대기압 상태를 가정하였으며, 유효응력은 0.1 MPa로 가정하였다. 경계부에서의 온도를 초기온도로 고정하였으

며, 유체의 유동은 벤토나이트 펠렛에서만 이루어진다고 가정하였다. 또한 변위의 경우 벤토나이트 완충재의 최외각부분에서의 수직변위를 고정하여 역학적 해석을 수행하였다.

CIEMAT 컬럼 시험은 초기에 히터의 온도를 100°C로 유지시키기 위해 12 W의 열을 공급하며 벤토나이트 펠렛에서의 열·수리·역학적인 복합거동을 살펴보았다. 1,518 시간 경과 이후, 시험 장치에서의 열 손실을 막기 위해 추가적인 단열재를 설치하고 7.5 W의 열을 공급하며 히터의 온도를 100°C로 유지하였다. 3,424 시간 경과 이후에는 12 W의 열을 공급하여 히터의 온도를 140°C로 유지하면서 시험을 수행하였으며 5,015 시간이 지난 이후 상부에서 0.1 bar의 압력으로 물을 주입하였다. 이러한 일련의 시험 과정을 수치해석에 그대로 반영하여 아래의 Table 2와 같이 경계조건을 설정하여 수치해석을 수행하였다.

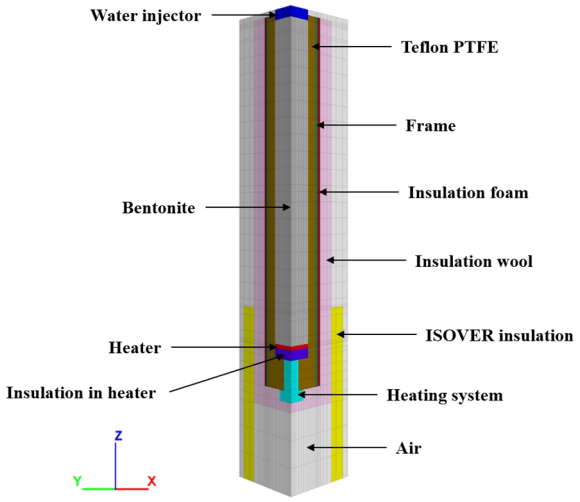

Fig. 7. Numerical model for CIEMAT column test

Table 2. Modelling procedures

Phases		Initial time (hours)	Final time (hours)	Heater temperature (°C)	Power (W)	Hydraulic pressure (bar)
Heating phase	1st heating phase, H1	0	1,518	100	12.0	-
	2nd heating phase, H2	1,518	3,524	100	7.5	-
	3rd heating phase, H3	3,524	5,015	140	12.0	-
Heating and hydration phase, H3&H		5,015	20,000	140	12.0	0.1

3.3 입력 물성

DECOVALEX-2015에서 주어진 벤토나이트 물성은 밀도와 공극률 두 가지이며, 본 연구에서 사용된 열적 물성과 함께 Table 3에 정리하였다. 벤토나이트 펠렛의 열전도도를 제외한 나머지 물성에 대해서는 포화도에 따른 물성 변화를 고려하지 않았다. 벤토나이트 열전도도(λ)의 경우, 식 (1)과 같이 포화도(S) 변화에 따른 열전도도 변화를 고려하였다.

$$\lambda = \lambda_{dry} + (\lambda_{sat} - \lambda_{dry}) \times S \tag{1}$$

여기서, λ_{dry}와 λ_{sat}는 각각 완전 건조($S=0$) 및 완전포화($S=1$) 상태에서의 열전도도를 의미한다.

Table 3. Input parameter for thermal properties in the numerical simulations

Materials	Grain density (kg/m^3)	Porosity (-)	Specific heat (J/kg°C)	Thermal conductivity (W/mK)
Bentonite pellets	2,750	0.444	950	0.4-1.0
Teflon PTFE	2,160	0.00001	1,300	0.25
Dense foam	70	0.00001	1,300	0.16
Insulation wool	70	0.00001	1,300	0.16
ISOVER BT-LV	70	0.00001	1,300	0.034
Frame	7,850	0.00001	440	10.0
Heater	7,850	0.00001	440	52.5
Insulation in heater	70	0.00001	440	1.2
Air	1	0.99999	1,000	0.026

3.3.1 수리적 물성

본 연구에서는 벤토나이트를 제외한 모든 매질은 불투수층으로 가정하였고, 수분보유곡선은 Van Genutchen 모델을 따른다고 가정하였으며, P_0의 값은 Gaus et al. (2014)에 제시된 값을 사용하였다. Van Genutchen 모델에서의 λ_{van} 값은 가정된 P_0 값과 초기 상대습도 40.0%를 기준으로 도출하였다. 또한 본 연구에서는 Jacinto et al. (2009)에 언급된 것과 마찬가지로 λ_{van}와 S_{ls} 값은 온도가 증가함에 따라 선형적으로 감소한다고 가정하여 식 (2)에 나타나 있는 λ_{van}와 S_{ls}를 각각 식 (3)과 (4)와 같이 수정하여 수치해석에 사용하였다. 수치해석에서 사용된 상수 A_1과 A_2는 각각 2.5×10^{-4}과 7.0×10^{-3}이다.

$$P_{cap} = -P_0([S^*]^{-1/\lambda_{van}}-1)^{1-\lambda_{van}}, \qquad S^* = \frac{(S-S_{lr})}{(S_{ls}-S_{lr})} \tag{2}$$

$$\lambda_i = \lambda_{van,0} - A_1 \times (T_i - T_0) \tag{3}$$

$$S_{ls,i} = S_{ls,0} - A_2 \times (T_i - T_0) \tag{4}$$

여기서, P_0와 λ_{van}는 van Genuchten 모델의 물질상수이고, T_0는 초기온도, $\lambda_{van,0}$와 $S_{ls,0}$는 각각 초기온도에서의 물성값 0.420과 1.0이다. T_i, λ_i, 그리고 $S_{ls,i}$는 i번째 스텝에서의 온도와 온도에 따른 물성변화 값들을 의미한다.

벤토나이트의 물에 대한 포화상태에서의 투수계수(permeability)를 5.0×10^{-21} m^{2}로 가정하였으며, 포화도에 따른 유체와 기체의 상대 투수계수(relative permeability)는 식 (5) 및 (6)을 이용했고, 식 (7)에 나타나 있는 기체의 투수계수에 대한 Klinkenberg 파라미터는 1.5 GPa로 가정하였다.

$$k_{rl} = (S^*)^{1.0} \tag{5}$$

$$k_{rg} = 1 - K_{rl} \tag{6}$$

여기서, k_{rl}과 k_{rg}는 각각 유체와 기체의 상대 투수계수를 의미하고, S^*는 유효 포화도를 의미한다.

$$k_{gas} = k_{liq}(1 + \frac{b}{P}) \tag{7}$$

여기서, k_{gas}와 k_{liq}는 각각 기체와 유체의 투수계수를 의미하고, P는 압력 그리고 b는 Klinkenberg 파라미터를 의미한다.

3.3.2 역학적 물성

수치해석에서는 벤토나이트 펠렛의 경계부에서의 수직 변위를 고정하였기 때문에 역학 해석에서는 벤토나이트 완충재의 물성만 필요하다. 본 연구에서는 탄성모델을 사용하였고, 탄성계수(E)와 포아송 비(υ)는 40 MPa와 0.35로 각각 가정하였다. 열응력과 유효응력 계산을 위한 열팽창계수와 Biot 상수는 각각 2.6×10^{-6} 1/°C와 1.0으로 가정하였다. 포화도(S)의 변화에 따른 팽윤압($P_{swelling}$)은 식 (8)과 같이 비선형 거동을 보인다고 가정하였고 열응력 및 팽윤압으로 인한 응력변화로 야기되는 공극률(ϕ), 투수계수(k) 그리고 삼투압(P_{cap})의 변화는 식 (9), (10) 그리고 (11)과 같다. 본 연구에서 사용된 역학적 물성과 각각의 상수는 Table 4에 정리되어 있다.

$$P_{swelling} = P_{swelling,\max} - \frac{C_1}{(1 + \mathrm{Exp}(\frac{S - C_2}{C_3}))} - C_4 \tag{8}$$

여기서, $P_{swelling,\max}$는 최대 팽윤압이고, C_1, C_2, C_3, 그리고 C_4는 각각 팽윤압 관련 상수들을 의미한다.

$$\phi = (\phi_0 - \phi_r)\exp(C_5 \cdot \sigma_M) + \phi_r \tag{9}$$

$$k = k_0\exp[C_6(\phi/\phi_0 - 1)] \tag{10}$$

$$P_{cap} = P_{cap0}(S)\frac{\sqrt{k_0/\phi_0}}{\sqrt{k/\phi}} \tag{11}$$

여기서, ϕ_0, k_0, 그리고 P_{cap0}는 각각 초기 공극률, 초기 투수계수, 그리고 초기 삼투압을 의미하고, ϕ_r는 잔류 공극률을 의미하며, σ_M은 평균유효응력을 의미한다. 또한, C_5와 C_6은 모델 상수이다.

Table 4. Input parameters for the mechanical calculations

Parameter	Value (Unit)	Parameter	Value (Unit)
E	40 (MPa)	C_3	0.025
υ	0.35 (-)	C_4	1.011 (MPa)
$P_{swelling,\max}$	3.0 (MPa)	ϕ_r	0.3552
C_1	2.0 (MPa)	C_5	5.0×10^{-8}
C_2	0.35	C_6	22.2

4. 수치해석 결과

수치해석 기법과 사용된 THM 모델의 타당성을 검토하고자 히터의 온도와 계측지점 세 곳에서 계측된 온도 및 상대습도, 그리고 시험 장치 상부에서 계측된 물 주입량 및 응력을 수치해석 결과와 비교하였다. 본 연구에서는 히터에서부터 약 10 cm 이격된 지점의 온도계와 상대습도계를 T3 및 Rh3, 약 22 cm 이격된 지점의 센서들을 각각 T2 및 Rh2, 그리고 약 40 cm 이격된 지점의 센서들을 각각 T1 및 Rh1로 명명하기로 한다(Fig. 4).

4.1 온도

수치해석에서는 실험실 시험에서 사용된 것과 동일한 히터 파워와 물 주입압을 사용하였다(Table 2). 수치해석에서 계산된 히터의 온도와 실험실 시험에서 계측된 온도는 Fig. 8에 나타나있다. 검은색 도형은 실험실 시험에서 계측된 값이고, 붉은색 실선은 모델링에서 계산된 값을 의미한다. 실험실 시험에서 수행된 첫 번째 가열구간(1st heating phase, H1)과 두 번째 가열구간(2nd heating phase, H2)에서의 목표온도는 100°C이고 세 번째 가열구간(3rd heating phase, H3)에서의 목표온도는 140°C였다. 수치해석에서 계산된 각 구간별 히터 온도는 첫 번째 가열구간에서 99.73°C, 두 번째 가열구간에서 97.75°C, 그리고 세 번째 가열구간에서는 141.10°C로 계산되었다. 상대적으로 두 번째 가열구간에서 조금 낮게 계산되었지만, 전반적으로 실험실에서 계측된 온도와 큰 차이를 보이지 않는 것으로 나타났다.

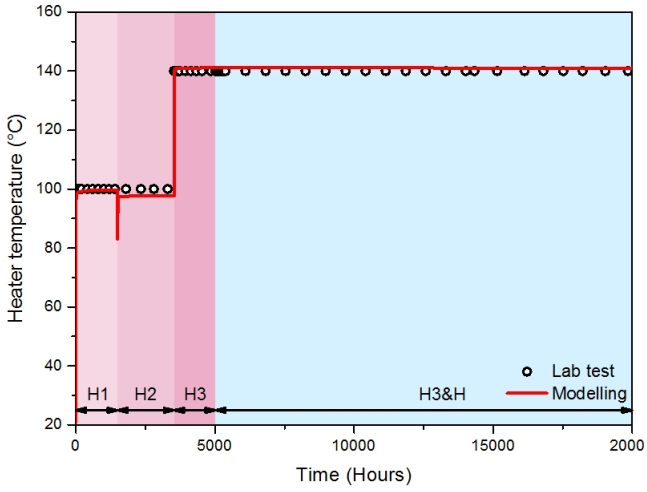

Fig. 8. Heater temperature during the heating phases (pink area) and hydration phase (light blue area)

Fig. 9는 계측지점에서의 온도변화를 도시한 것으로써, 각각의 가열구간에서의 온도 변화를 나타내고 있는 것이다. 붉은색, 검은색, 그리고 파란색의 결과는 각각 T3, T2, 그리고 T1에서의 결과를 나타낸 것으로써, 도형은 실험실 결과를 의미하며, 실선은 모델링에서 계산된 값을 의미한다. 가열 이후 전반적으로 온도 변화 경향은 히터의 온도변화와 마찬가지로 실험실 시험 결과와 모델링으로부터 계산된 값이 유사하게 나타났다. 두 번째 가열구간(1,518 시간 ~ 3,524 시간)에서 히터의 온도는 첫 번째 가열구간에서와 마찬가지로 100°C로 유지되고 있지만 , 계측지점 세 군데에서 온도가 상승하는 것으로 나타나고 있는데, 이는 두 번째 가열구간에서 추가적으로 설치된 단열재의 영향으로 시험장치 외부로의 열손실이 감소하여 벤토나이트의 온도가 상승한 것으로 판단된다. 세

번째 가열구간에서는 T2와 T3의 경우 실험실에서 계측된 값과 계산된 값이 거의 유사함을 알 수 있지만, T1의 경우 상대적으로 조금 낮은 것을 알 수 있는데, 이는 모델링에서의 경계부에서의 온도 고정으로 인한 영향이 실제 보다 크게 작용했거나, 주변 단열재와 구성물질을 통한 열전달이 모델링에서는 잘 이루어지지 않았기 때문으로 판단된다. 또한, 계측값은 계절의 영향으로 인해 약 3 ~ 4°C 정도 변화되었지만 모델링에서는 계절에 따른 실온의 변화를 무시하였기 때문에 일정하게 유지되었다.

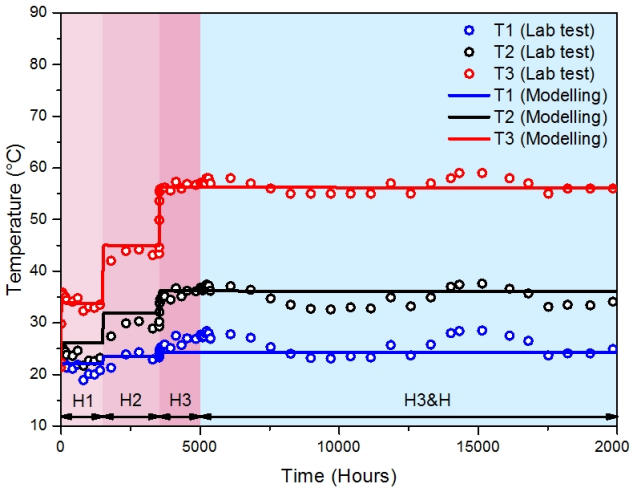

Fig. 9. Measured and calculated temperature in bentonite buffer material during the heating phases (pink area) and hydration phase (light blue area)

4.2 상대습도

물 주입 전과 후의 상대습도 변화를 각각 흰색과 푸른색 배경으로 구분하여 Fig. 10에 나타내었다. 붉은색, 검은색, 그리고 파란색의 결과는 각각 Rh3, Rh2, 그리고 Rh1에서의 결과를 나타낸 것으로써, 도형은 실험실 결과를 의미하며 실선은 모델링에서 계산된 값을 의미한다. 물 주입 전인 5015시간까지의 계측된 상대습도 변화를 살펴보면, 히터와 가까운 Rh3의 경우 히터 가동과 동시에 40%에서 약 60%까지 상대습도가 매우 빠르게 증가하는 것으로 나타났다. 이는 Fig. 11에 나타나 있듯이 가열에 따른 온도 증가로 인해 히터 부근 벤토나이트 완충재의 공극에 포함된 물이 기화(evaporation)되어 가스압이 증가함에 따라 온도가 상대적으로 낮은 쪽, 계측지점 Rh3로 수증기가 이동하면서 온도가 낮아져 액화(condensation)에 의해서 계측지점에서의 상대습도가 증가하는 것이다. 이후 온도가 지속적으로 증가함에 따라 상승된 상대습도는 감소하게 된다. 단열재의 설치와 히터 파워를 증가시켜 벤토나이트의 온도가 순간적으로 변화되는 가열 후 1,518 시간과 3,524시간이 지난 시점에서 상대습도는 처음 가열한 경우와 유사하게 순간적으로 증가하는 것으로 나타났다. 이 역시, 온도가 순간적으로 증가하여 기화와 액화 작용에 의한 것으로 볼 수 있다. 이러한 경향은 수치해석에서 적절하게 재현되었으며, 그 변화량도 유사한 것으로 나타났다. Rh2의 경우도 마찬가지로 상승되는 반응이 느리기는 하지만 Rh3에서와 유사하게 나타났으며, Rh3만큼 급격한 상대습도의 변화는 아니지만, 가열 후 1518 시간과 3524시간이 지난 시점에서 상대습도의 증가가 나타났으며 수치해석에서도 잘 재현되는 것으로 나타났다. Rh1에서의 상대습도 변화는 Rh2와 Rh3과 달리 급격한 변화를 보이지 않았는데, 이는 T2와 T3에서처럼 온도변화가 순간적으로 크게 변하지 않았기 때문으로 판단된다. 수치해석에서 상대습도가 최대 7~8 % 정도 크게 계산되었지만, 전반적인 경향이 잘 재현된 것으로 판단된다.

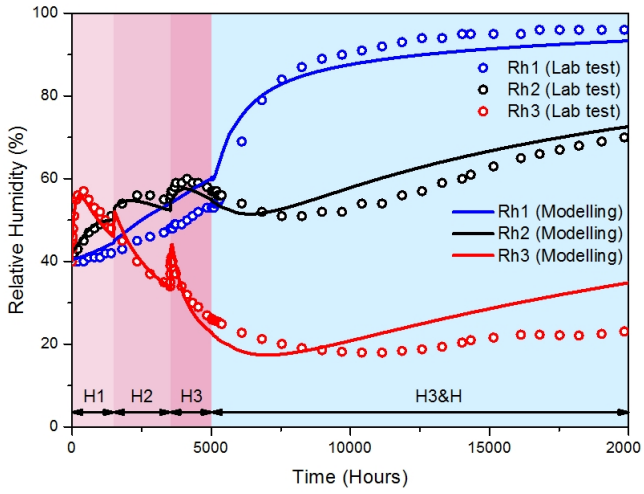

Fig. 10. Measured and calculated relative humidity during the heating phases (pink area) and hydration phase (light blue area)

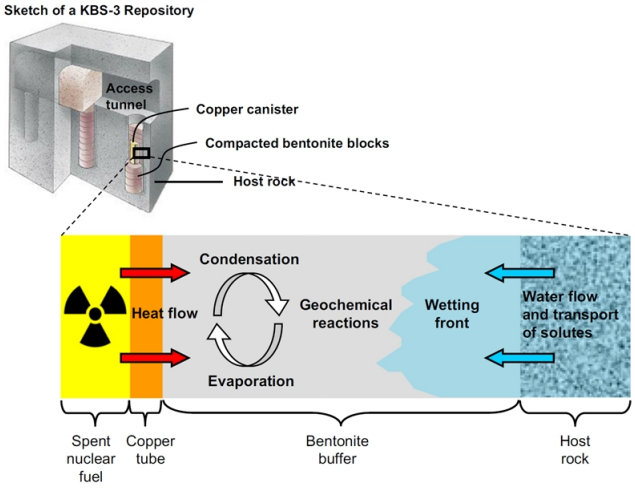

Fig. 11. Sketch of the thermo-hydraulic, geomechanical and transport processes in the bentonite buffer of a KBS-3 repository (Salas et al., 2014)

물 주입이 이루어진 가열 이후 5,015 시간이 경과한 이후의 계측된 상대습도 변화를 살펴보면, 시간이 지남에 따라 상대습도는 서서히 증가하는 것으로 나타났고 시험 진행 약 20,000 시간 후에도 벤토나이트 완충재는 포화상태에 도달하지 않았다. 물 주입은 상부에서 이루어졌기 때문에 Rh1 센서에서 먼저 상대습도가 증가하는 것으로 나타났다. 이후, 지속적인 물 주입으로 인해 약 7,500 시간이 지난 이후에 Rh2에서 상대습도가 증가하는 것으로 나타났으며, Rh3에서는 약 10,000 시간이 지난 이후 조금씩 증가하는 것으로 나타났다. 수치해석에서 계산된 물 주입 이후의 상대습도를 살펴보면 전반적으로 유사한 경향을 보이고 있다. 특히, Rh1과 Rh2에서의 상대습도 변화는 계측값과 계산값이 유사하게 나타났다. 하지만, 히터와 가까운 곳에 설치된 Rh3에서는 계산된 상대습도 변화가 조금 빠르게 나타나고 있는 것으로 나타났다.

4.3 응력

벤토나이트 완충재는 물을 만나게 되면 크게 팽윤을 하는 특성이 있기 때문에 물 주입 이후 시험 장치에서 수직방향으로의 응력이 변하는 것으로 나타났다(Fig. 12). 실험실 시험에서 계측된 응력은 물 주입 이후 급격하게 증가한 후 서서히 증가하여 시험이 시작된 20,000 시간 이후 약 1.45 MPa로 계측되었다. 반면, 수치해석에서는 계산된 수직방향으로의 응력은 상대적으로 서서히 증가하는 것으로 계산되었으며 20,000 시간이 경과한 시점에서의 1.32 MPa로 계산되었다. 물 주입 이후 수직방향 응력이 증가하는 경향은 비슷한 것으로 계산되었지만, 물 주입 이후 급격하게 증가하는 수리-역학적 거동을 본 연구에서 사용한 탄성모델과 식 (8)의 비선형 팽윤 모델로 잘 재현할 수 없었다. 컬럼 시험에서 계측된 수리-역학적 복합거동을 좀 더 현실적으로 재현하기 위해서는 다양한 모델을 이용하여 적절한 모델을 도출할 필요가 있을 것으로 판단된다. 특히, 벤토나이트 완충재의 역학적 거동을 잘 모사하는 것으로 알려진 Barcelona Basic Model (BBM) (Alonso et al., 1990)과 같은 모델을 사용해 볼 필요가 있을 것으로 판단된다. 본 연구에서 사용된 탄성모델은 포화도 혹은 흡입력(suction pressure)의 변화에 따른 체적변형계수(bulk modulus, K)의 변화가 없지만 BBM에서는 체적변형계수가 흡입력의 함수로 나타나며(Rutqvist et al., 2011, Lee et al., 2019, Lee et al., 2020), 흡입력 변화에 따른 체적 변형률과 그에 따른 팽윤압의 변화가 현실적으로 모사되기 때문에(Alonso et al., 1990, Gens, 1995) 시간에 따른 축방향 응력변화가 조금 더 현실적으로 재현될 수 있을 것으로 판단된다.

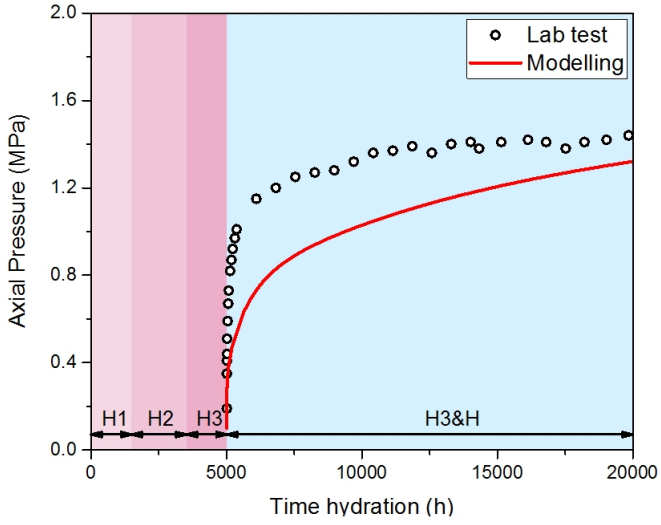

Fig. 12. Measured and calculated pressure during the heating phases (pink area) and hydration phase (light blue area)

BBM을 이용하여 스위스 Grimsel Test Site(GTS)에서 수행된 실규모 현장 THM 시험(Full-scale Engineered Barriers EXperiment, FEBEX)에 대한 수치해석을 수행한 결과를 살펴보면, 지하수 유입에 따른 함수율(water content) 변화뿐만 아니라, 완충재의 건조밀도 변화까지 잘 모사되고 있다(Fig. 13). 암반으로부터의 지하수 유입으로 벤토나이트 완충재는 팽윤을 하게 되어 암반 주변 완충재의 건조밀도는 감소하게 되고, 암반 주변에서 팽윤된 벤토나이트 완충재로 인해 히터부근의 완충재는 압밀되어 건조밀도가 증가하는 것으로 나타났다. 벤토나이트 완충재의 열적, 수리적, 그리고 역학적 물성은 건조밀도에 큰 영향을 받기 때문에(ENRESA, 2000), 완충재의 열-수리-역학적 복합거동을 잘 재현하기 위해서는 완충재의 건조밀도 변화를 예측할 수 있어야 하고, 건조밀도 변화에 따른 물성변화를 반영해 주어야 할 것으로 판단된다.

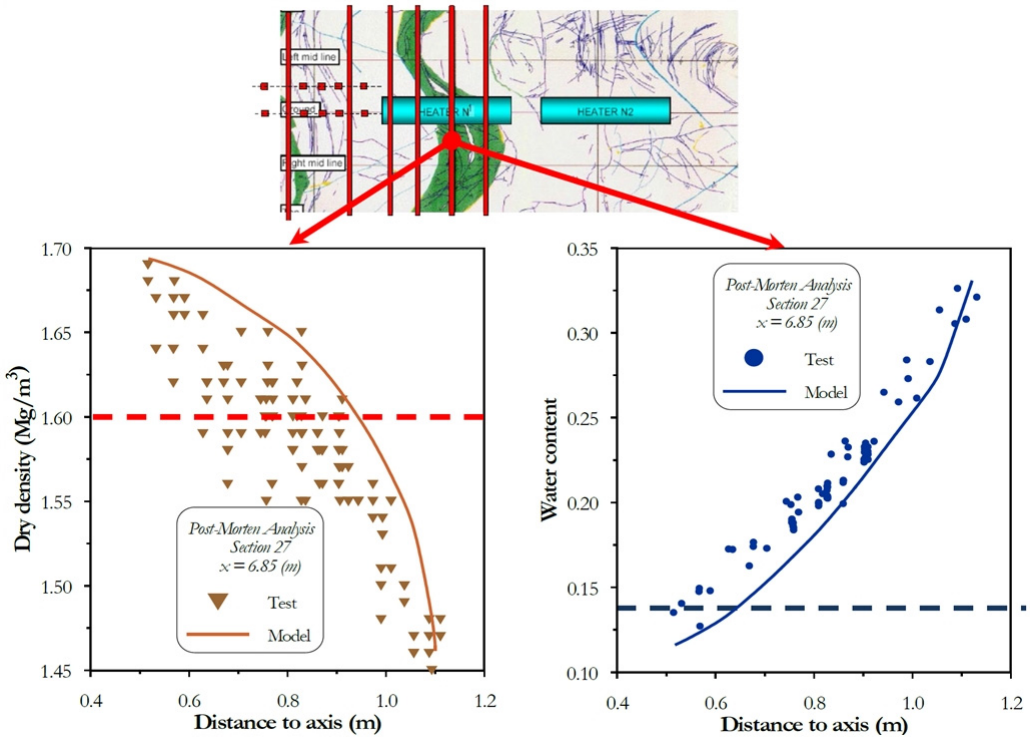

Fig. 13. Values of dry density and water content in hot section: observations and computed results using Barcelona Basic Model (Papafotiou et al., 2017)

FEBEX에서 관찰된 열-수리-역학적 복합거동과 유사하게 컬럼 시험에서도 히터 주변 완충재 건조밀도가 물 주입이 이루어진 상부의 완충재 건조밀도보다 상대적으로 높았을 것으로 보인다. 일반적으로 완충재의 건조밀도는 완충재의 수리전도도와 큰 상관성을 갖기 때문에(Fig. 14), 건조밀도에 따른 수리전도도의 변화를 컬럼 시험 수치해석에서 반영한다면 물 주입 이후의 건조밀도 변화로 인해 히터 주변 완충재의 건조밀도가 증가하여 투수계수는 작아지게 되어 상부로부터의 물 주입이 상대적으로 더 느려져 히터

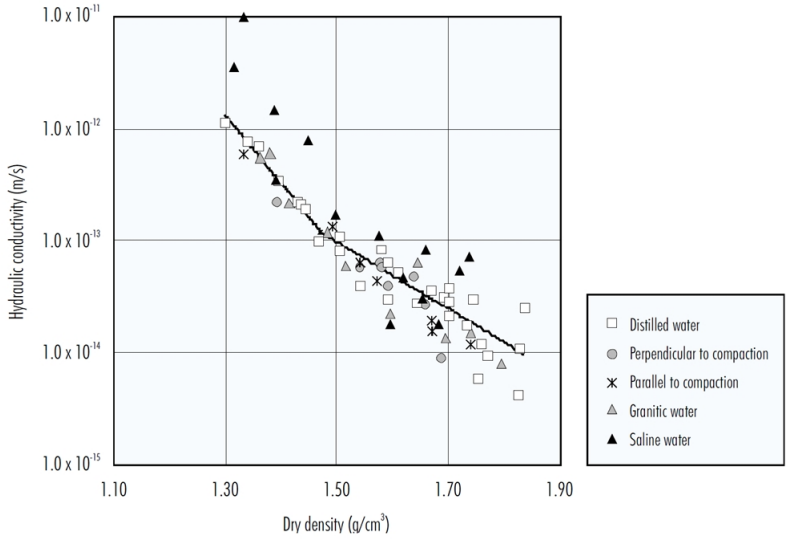

Fig. 14. Saturated hydraulic conductivity of FEBEX bentonite as a function of dry density (ENRESA, 2000)

부근의 Rh1의 상대습도 변화를 조금 더 현실적으로 재현할 수 있을 것으로 보인다. 반면에 물 주입이 이루어진 상부는 상대적으로 건조밀도가 낮고 수리전도도가 커지게 되어 물의 유입이 더욱더 쉽게 일어날 수 있게 되어 팽윤압의 변화가 더욱더 빠르게 나타날 수 있을 것으로 판단된다. 따라서, BBM을 이용하고 건조밀도 변화에 따른 완충재의 열적 그리고 수리적 물성 변화를 반영하여 수치해석을 수행한다면 시험에서 계측된 수리-역학적 복합거동을 조금 더 현실적으로 재현할 수 있을 것으로 판단된다.

5. 결 론

열-수리 해석 코드인 TOUGH2와 역학 해석 코드인 FLAC3D를 연동하여 계산하는 TOUGH2-FLAC3D 시뮬레이터를 이용하여 벤토나이트 펠렛에서의 THM 복합거동 특성을 수치해석적인 접근 방법으로 파악하고자 하였다. 사용된 열적, 수리적, 그리고 역학적 모델의 적합성을 살펴보고자 국제공동연구 DECOVALEX-2015 Task B1의 일환으로 수행된 스페인 CIEMAT의 컬럼 시험을 선정하였다. TH 모델이 벤토나이트 펠렛에 적용하기에 적합한지 판단하기 위해 가열과 물 주입에 의한 벤토나이트에서의 온도 변화와 상대습도의 변화를 시간 경과에 따라 잘 예측할 수 있는지를 살펴보았다. 히터의 온도 및 계측지점에서의 온도에 대한 실측치와 계산값이 유사한 경향을 보이는 것으로 볼 때, 사용된 열전도도 모델은 타당한 것으로 판단된다. 하지만 물 주입부에서의 온도가 상대적으로 낮게 나타났기 때문에 시험장비의 열전도도에 대한 교정은 필요할 것으로 판단된다. 계측된 상대습도와 계산된 상대습도 변화 역시 유사한 경향을 보였기 때문에 사용된 투수계수, 수분보유곡선, Klinkenberg parameter 그리고 상대 투수계수 함수는 적절한 것으로 판단된다. 하지만, 물 주입 이후의 계산된 응력변화가 상대적으로 작으면서 느리게 계산된 점과 히터 주변에서의 상대습도 변화가 계측값에 비해 조금 빠르게 변화하는 점으로 보아 사용된 탄성모델과 스웰링 모델에 한계점이 있는 것으로 판단되며 사용된 두 모델로는 완충재의 복잡한 THM 복합거동을 현실적으로 재현하기에는 부족한 것으로 판단된다. 본 연구에서 사용한 THM 모델과 TOUGH2-FLAC3D 해석 시뮬레이터를 이용해서 벤토나이트 완충재의 THM 복합거동 변화의 경향성을 예측하기에는 큰 무리가 없어 보이지만, 실험실 시험과 현장시험에서 관찰되는 THM 복합거동 특성을 면밀한 분석하기 위해서는 추후 BBM을 이용할 필요가 있을 것으로 판단된다.

ACKNOWLEDGEMENT

The members of the Task B1 like to express their thanks for the financial supports provided by the Funding Organizations of the DECOVALEX-2015 project, and measured data of experiments supplied by National Cooperative for the Disposal of Radioactive Waste (NAGRA), Switzerland. ANDRA led the HE-D experiment and is gratefully acknowledged for the quality of the measurements provided during this experiment. And this research was supported by the Nuclear Research and Development Program of the National Research Foundation of Korea (NRF-2017M2A8A5014857) funded by the Minister of Science and ICT.

REFERENCES

Alonso E.E., A. Gens and A. Josa, 1990, A constitutive model for partially saturated soils. Geotechnique, 40(3), 405-430.

Birkholzer, J.T., C.-F. Tsang, A.E. Bond, J.A. Hudson, L. Lanru and O. Stephansson, 2019, 25 years of DECOVALEX - Scientific advances and lessons learned from an international research collaboration in coupled subsurface process, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 122, 103995.

CODE BRIGHT, 2004, A 3D program for thermo-hydro-mechanical analysis in geological media manual. Barcelona: UPC.

ENRESA, 2000, FEBEX project. Full-scale engineered barriers experiment for a deep geological repository for high level radioactive waste in crystalline host rock. Final report. ENRESA, Madrid.

Gaus, I., B. Garitte, R. Senger, A. Gens, R. Vasconcelos, J.-L. Garcia-Sineriz, T. Trick, K. Wieczorek, O. Czaikowski, K. Schuster, J. C. Mayor, M. Velasco, U. Kuhlmann and M. V. Villar. 2014, The HE-E Experiment: Lay-out, Interpretation and THM Modelling, Nagra Arbeitsbericht NAB 14-53.

Gens, A., 1995, Constitutive laws. In: Gens, A., Jouanna, P., Schrefler, B.A. (Eds.), Modern Issues in Non-saturated Soils, Springer-Verlag, New York, 129-158.

Itasca, 2009. FLAC3D, Fast Lagrangian Analysis of Continua in 3 Dimensions, Version 4.0. Minneapolis, Minnesota, Itasca Consulting Group.

Jacinto, A.C., M.V. Villar, R. Gomez-Espina and A. Ledesma, 2009, Adaptation of the van Genuchten expression to the effects of temperature and density for compacted bentonites, Applied Clay Science, 42, 575-582.

Kwon, S., C. Lee, S. Jeon and H.-J. Choi, 2013, Thermo-mechanical coupling analysis of APSE using submodels and neural networks, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering, 5, 32-43.

Lee, C., J. Lee, M. Kim and G.Y. Kim, 2020, Implementation of Barcelona Basic Model into TOUGH2-MP/FLAC3D, Tunnel and Underground Space, Vol. 30(1), pp. 39-62.

Lee, C., S. Yoon, J. Lee and G.Y. Kim, 2019, Introduction of Barcelona Basic Model for Analysis of the Thermo-Elasto-Plastic Behavior of Unsaturated Soils, Tunnel and Underground Space, Vol. 29(1), pp. 38-51.

Lee, C., T. Kim, J. Lee, J. -W. Park, S. Kwon and J. -S. Kim, 2020, Introduction of International Cooperation Project, DECOVALEX from 2008 to 2019, Tunnel and Underground Space, Vol. 30(4), pp. 271-305.

Papafotiou, A., C. Li and F. Kober, 2017, Pre-dismantling THM modelling of the FEBEX in situ experiment, Nagra Arbeitsbericht NAB 16-22.

Pruess, K., C. Oldenburg and G. Moridis, 1999. TOUGH2 User's Guide, Version 2.0, Report LBNL-43134. Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California.

Rutqvist, J., 2011, Status of the TOUGH-FLAC simulator and recent applications related to coupled fluid flow and crustal deformations. Comput Geosci., 37(6):739-750.

Rutqvist, J., Y. Ijiri and H. Yamamoto, 2011, Implementation of the Barcelona Basic Model into TOUGH-FLAC for simulations of the geomechanical behavior of unsaturated soils, Computer & Geosciences, 37, 751-762.

Rutqvist, J., Y.S. Wu, C.F. Tsang and G. Bodvarsson, 2002, A modeling approach for analysis of coupled multiphase fluid flow, heat transfer, and deformation in fractured porous rock. Int J Rock Mech Min Sci. 39(4), 429-442.

Salas, J., C. Sena and D. Arcos, 2014, Hydrogeochemical evolution of the bentonite buffer in a KBS-3 repository for radioactive waste. Reactive transportmodelling of the LOT A2 experiment, Applied Clay Science, 101, 521-532.

Villar, M.V., P.L. Martín and F.J. Romero, 2014, Long-term THM tests reports: THM cells for the HE-E test: Update of results until February 2014. PEBS Report D2.2-7.3. CIEMAT Technical Report CIEMAT/DMA/2G210/03/2014. Madrid.

Villar, M.V., P.L. Martín, R. Gómez-Espina, F.J. Romero and J.M. Barcala, 2012, THM cells for the HE-E test: setup and first results. PEBS Report D2.2.7a. CIEMAT Technical Report CIEMAT/DMA/2G210/02/2012. Madrid.

Appendix. DECOVALEX phases, tasks, and major publications from 1992 to 2020 (modified after Lee et al., 2020)

Phase (Time period)	BMT, TC and Task	References to the results
DECOVALEX-I (1992-1994)	BMT 1: Fractured rock with two orthogonal sets of persistent fractures and a heat source BMT 2: Fractured rock with four discrete fractures and a finite-length heat source BMT 3: Fractured rock with a realistic fracture network of 6580 fractures from Stripa mine data TC 1: Laboratory shear-flow test on rock core sample with a single joint TC 2: Field experiment in fractured rock at Fanay-Augeres, France TC 3: Large-scale laboratory experiment of engineered buffer material (Big-Ben experiment, Japan) TC 4: Laboratory stress flow tests on rock fractures TC 5: Laboratory shear-flow experiment of a rock block with a single joint TC 6: Field experiment of hydraulic injection test on fractures at 356m depth	Elsevier Book Series Developments in Geotechnical Engineering: Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Processes of Fractured Media: Mathematical and Experimental Studies (Volume 791996) Special Issue, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstract (Volume 32, Number 5, 1995).
DECOVALEX-II (1995-1999)	Task 1: Numerical study of Nirex's Rock Characterization Facility (RCF) shaft excavation at Sellafield, UK Task 2: Numerical study of PNC's in situ THM experiments in Kamaishi Mine, Japan Task 3: Review of the state-of-the-art of the constitutive relations for rock joints Task 4: Current understanding of the coupled THM processes related to design and PA of radioactive waste repositories	Special Issue, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences (Volume 38, Number 1, 2001).
DECOVALEX-III (2000-2003)	Task 1: FEBEX (Full-scale engineered barriers experiment in crystalline host rock) Task 2: The Drift Scale Test (DST) at Yucca Mountain Task 3-BMT 1: Implications of THM coupling on the near-field safety of a nuclear waste repository. Task 3-BMT 2: Upscaling of the THM properties in a fractured rock mass and its significance for large-scale repository PA Task 3-BMT 3: The THM responses to a glacial cycle and their potential implications for deep geological disposal of nuclear fuel waste in a fractured crystalline rock mass Task 4: T-H-M modelling applications in safety and performance assessment of deep geological nuclear waste repositor	Elsevier Geo-Engineering Book Series: Coupled Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Geo-Systems - Fundamentals, Modeling, Experiments and Applications (Volume 2, 2004) Special Issue, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences (Volume 42, Number 5−6, 2005).
DECOVALEX-THMC (2004-2007)	Task A: Influence of near field coupled phenomena on the performance of a spent fuel repository Task B: Understanding and characterizing the excavation damaged zone (EDZ) Task C: Excavation damaged zone (EDZ) in the argillaceous Tournemire Site (France) Task D: Long-term permeability/porosity changes in the EDZ and near field, due to THM and THC processes in volcanic and crystalline-bentonite systems Task E: THM processes associated with long-term climate change: glaciation case study	Special Issue, The DECOVALEX-THMC Project (Safety assessment of nuclear waste repositories), Environmental Geology (Volume 57, Number 6, 2009).
DECOVALEX-2011 (2008-2011)	Task A: HM-C processes in argillaceous rocks Task B: TM modeling of fracture initiation and propagation, and rock spalling in rock openings Task C: Assessment of coupled THMC processes in single fractures and fractured rocks	Special Issue on DECOVALEX 2011 - Part 1 and 2, Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering (Volume 5, Issues 1 and 2, 2013)
DECOVALEX-2015 (2012-2015)	Task A: The SEALEX Experiment - HM processes in bentonite-based sealing structures Task B1: THM processes in bentonite buffers and argillaceous host rocks Task B2: The Horonobe EBS experiment - THMC processes in buffer, backfill and host rock Task C1: THMC processes in single fractures of novaculite (micro-crystalline quartz) and granite Task C2: The Bedrichov Tunnel - hydro-chemical interactions in a fractured crystalline rock	Special Issue, Environmental Earth Sciences. Topical Collection: DECOVALEX 2015 ISSN: 1866−6280 (Print) 1866−6299 (Online)
DECOVALEX-2019 (2016-2019)	Task A: Advective gas flow in low permeability sealing materials Task B: Induced slip of a fault in argillaceous rock Task C: Hydro-mechanical-chemical-biological processes during Groundwater Recovery in Crystalline Rock Task D: Hydro-mechanical (HM) and THM interactions in bentonite engineered barriers Task E: Upscaling of heater test modeling results Task F: Fluid inclusion and movement in tight rock Task G: EDZ Evolution - Reliability, feasibility, and significance of measurements of conductivity and transmissivity of the rock mass	Special Issue, International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences
DECOVALEX-2023 (2020-2023) - Ongoing at the time of writing this paper	Task A: Heat and gas fracturing Task B: Modelling advection of gas in clays Task C: Modelling THM processes at the Full-scale Emplacement (FE) heater experiment Task D: Full-scale Engineered Barrier System Experiment at Horonobe URL Task E: Heated brine availability test in salt Task F: PA/UQ/SA Benchmarking Task Task G: Safety implications of fluid flow, shear, thermal and reaction processes within crystalline rock fracture networks	-