

# Development of User-friendly Modeling Interface for Process-based Total System Performance Assessment Framework (APro) for Geological Disposal System of High-level Radioactive Waste

## 고준위폐기물 심층처분시스템에 대한 프로세스 기반 종합성능평가 체계(APro)의 사용자 친화적 모델링 인터페이스 개발

Jung-Woo Kim\*, Jaewon Lee, and Dong-Keun Cho

Korea Atomic Energy Research Institute, 111, Daedeok-daero 989beon-gil, Yuseong-gu, Daejeon, Republic of Korea

김정우\*, 이재원, 조동건

한국원자력연구원, 대전광역시 유성구 대덕대로989번길 111

(Received March 18, 2019 / Revised May 17, 2019 / Approved May 17, 2019)

---

A user-friendly modeling interface is developed for a process-based total system performance assessment framework (APro) specialized for a generic geological disposal system for high-level radioactive waste. The APro modeling interface is constructed using MATLAB, and the operator splitting scheme is used to combine COMSOL for simulation of multiphysics and PHREEQC for the calculation of geochemical reactions. As APro limits the modeling domain to the generic disposal system, the degree of freedom of the model is low. In contrast, the user-friendliness of the model is improved. Thermal, hydraulic, mechanical and chemical processes considered in the disposal system are modularized, and users can select one of multiple modules: “Default process” and multi “Alternative process”. APro mainly consists of an input data part and calculation execution part. The input data are prepared in a single EXCEL file with a given format, and the calculation part is coded using MATLAB. The final results of the calculation are created as an independent COMSOL file for further analysis.

Keywords: Radioactive waste, Geological disposal, Total system performance assessment (TSPA), Process-based, Modeling interface

---

\* Corresponding Author.

Jung-Woo Kim, Korea Atomic Energy Research Institute, E-mail: [jw\\_kim@kaeri.re.kr](mailto:jw_kim@kaeri.re.kr), Tel: +82-42-868-2547

### ORCID

Jung-Woo Kim

<http://orcid.org/0000-0001-6896-471X>

Jaewon Lee

<http://orcid.org/0000-0002-8418-0760>

Dong-Keun Cho

<http://orcid.org/0000-0003-4152-8605>

국내 고준위 방사성폐기물 심층처분시스템에 대한 프로세스 기반의 종합성능평가체계(APro) 개발을 위하여 사용자 편의성이 향상된 모델링 인터페이스를 구축하였다. APro의 모델링 인터페이스는 프로그래밍 언어인 MATLAB을 이용하여 구축되었고, 다중물리현상 모사가 가능한 COMSOL과 지하화학반응 계산이 가능한 PHREEQC를 계산 엔진으로 활용하여 연산자분리 방식을 적용하였다. APro는 모델링 영역을 기존의 정형화된 처분시스템으로 제한함으로써 모델의 자유도는 낮지만, 사용자 편의성을 향상시켰다. 처분시스템에서 고려되는 주요 현상들을 모듈화하였고, 이를 “Default process”와 다수의 “Alternative process”로 구분하여 사용자가 선택할 수 있도록 함으로써 모델의 유연성을 높였다. APro는 크게 입력자료 부분과 계산실행 부분으로 구성된다. 기본 입력자료는 하나의 EXCEL 파일에 일정한 포맷으로 정리되고, 계산실행 부분은 MATLAB을 이용하여 코딩되었다. 최종적인 전체 계산 결과는 독립적인 COMSOL 파일 형태로 생성되도록 하여 COMSOL을 이용한 계산 결과의 후처리가 가능하도록 하였다.

중심단어: 방사성폐기물, 심층처분, 종합성능평가, 현상기반, 모델링 인터페이스

## 1. 서론

처분시스템 안전성평가 도구 개발 측면에서 그동안의 연구는 처분시스템에서 발생하는 다양한 현상들을 시스템 수준에서 보수적이고 집약적으로 모사하는 방법들이 주를 이루었다. 한국원자력연구원에서 개발된 GoldSim [1] 기반의 GSTSPA [2]와 K-PAM [3, 4] 등이 그 예가 될 것이다. 시스템 수준의 안전성평가 모델은 보수적이고 함축적인 방법을 적용하여 계산 시간이 짧기 때문에, 심층처분시스템이 지표상의 인간 생활권에 미치는 영향을 사용자에게 간략하고 빠르게 제시할 수 있다는 장점을 가지고 있다. 원자력안전위원회 “고준위방사성폐기물 심층처분시설에 관한 일반기준” 고시[5]에서도 처분장 폐쇄후 1만년 이내의 위험도(risk)와 피폭선량(dose)을 주요 안전목표의 기준 인자로 지정하고 있기 때문에, 시스템 수준의 안전성평가 모델만으로도 그 안전성을 확인할 수 있을 것으로 판단되어 왔다.

하지만, 공학적방벽과 천연방벽으로 구성되는 처분시스템 내에는 핵종이동과 직·간접적으로 관련된 다양한 현상들이 복합적으로 연계되어 있다[6]. 특히, 폐쇄후 초기에는 폐기물로부터 발생하는 붕괴열과 처분장 주변의 수리적, 역학적, 지하학적 교란에 의하여 다양한 복합현상들이 발생할 것이다. 그리고, 고시에서 설정한 폐쇄후 1만년 이내만 고려하더라도, 이러한 복합현상들은 지속적으로 변화할 것이다. 하지만, 시스템 수준의 안전성평가 모델은 이러한 처분시스템의 시간에 따른 진화(evolution) 특성을 고려하기에 많은 제약이 따랐다.

방사성폐기물 심층처분시스템에 대한 연구는 지속적으로 진보되고 축적되어 오고 있다[7]. 하지만, 기존의 시스템 수준의 안전성평가에서는 모델이 세분화되어 있지 않기 때문에 그동안 축적된 양질의 연구결과 또는 처분기술들을 반영하는데 한계가 있었다. 단지, 이러한 연구결과들은 safety case라는 큰 틀에서 처분시스템의 안전성을 정성적으로 확인하는 자료로 활용되고 있다. 따라서, 최근 선진국에서는 단위현상에 대한 결과를 세부적으로 검토할 수 있고, 시스템 수준의 종합성능평가모델에 대한 교차분석이 가능하도록, 처분시스템의 시간에 따른 진화를 반영하고 다양한 복합현상을 해석할 수 있는 프로세스 기반의 종합성능평가체계 개발이 진행되고 있다. 이러한 새로운 접근법은 컴퓨터 성능 및 프로세스 연계 기술의 지속적인 향상 덕분인 것으로 판단된다.

미국은 Yucca 산 지역의 고준위 방사성폐기물 심층처분 시설 건설 인허가 신청을 위하여 GoldSim 기반의 단순화된 안전성평가 모델을 개발하였으나, 평가 도구의 투명성 및 대중 설득력이 낮고 보수성이 지나치게 커 효율성이 낮은 단점을 보완하기 위하여 최근에는 고성능 컴퓨팅 시스템을 이용한 프로세스 기반의 성능평가 모델인 PFLOTRAN [8]을 개발하였고, 현재 여러 가지 새로운 기능들을 추가하면서 모델을 지속적으로 개선해 오고 있다. PFLOTRAN은 병렬계산이 가능한 PETSc 체계 기반의 지하수 유동 및 오염물 이동 계산 코드이다. PFLOTRAN은 오픈 소스로서 개인용 컴퓨터에서부터 고성능 슈퍼컴퓨터에 이르기까지 모든 컴퓨터에서 실행이 가능하다는 장점을 가지고 있다. 그동안 PFLOTRAN은

불균질 공극 매질에서의 단순한 1차원 오염물 이동에서부터 복잡한 3차원 다상 유체 이동 및 생지화학반응에 이르기까지 다양하고 복잡한 현상들을 모사하기 위하여 다양한 사용자들에 의해 사용되어왔다(예, [9, 10]).

유럽에서는 스페인의 Amphos21을 중심으로 다중물리현상과 지화학반응 등의 복합현상들을 해석할 수 있는 통합 프로그래밍 시스템인 iCP [11]를 COMSOL (다중물리현상 모사를 위한 유한요소법(Finite Element Method; FEM) 기반의 범용 소프트웨어)[12]과 PHREEQC (지화학반응 계산을 위한 소프트웨어)[13]를 접목하여 개발하였으며, 유럽 여러 국가에서 방사성폐기물 처분시스템의 안전성평가에 활용되고 있다. iCP는 두 개의 독립 소프트웨어인 COMSOL과 PHREEQC를 순차적 비반복법(sequential non-iterative approach)의 연산자 분리(operator splitting) 방법을 사용하여 연계함으로써 지화학반응을 포함한 다양한 다중물리현상들을 동시에 모사할 수 있다. iCP 자체는 일반적인 반응이동 모델이 아니기 때문에, 대부분의 계산 능력은 iCP를 구성하는 두 개의 독립적인 해석 엔진(COMSOL과 PHREEQC)에 의해 좌우된다.

이러한 연구동향에 맞춰, 본 연구에서는 국내 고준위 방사성폐기물 심층처분시스템에 대한 프로세스 기반의 종합성능평가체계 개발을 위하여 사용자 편의성이 향상된 모델링 인터페이스를 개발하였다. PFLOTTRAN과 iCP는 일반적인 목적으로 개발된 모델로서 처분시스템 종합성능평가 전용의 프로그램이 아니기 때문에 입력파일의 구성이 매우 복잡하다. 따라서, 모델 개발에 경험이 없는 일반 사용자들이 이들을 처분시스템에 적용하기 위해서는 전문적인 학습이 추가적으로 필요하다. 특히, iCP는 입력파일의 구성과 함께 COMSOL과 PHREEQC에 대한 배경지식이 추가적으로 필요하다는 단점을 가지고 있다. 이러한 단점을 보완하고 실용성을 증가시키기 위하여, 본 연구의 모델링 인터페이스 개발에서는 전형적인 심층처분시스템의 종합성능평가에 특화시키고, 주요 현상들의 모듈화와 입력자료의 단순화를 통한 개발자 및 사용자의 편의성 향상에 중점을 두었다.

## 2. 본론

국내 고준위 방사성폐기물 심층처분시스템의 안전성평가를 위하여 본 연구에서 개발하고자하는 프로세스 기반의

종합성능평가체계는 APro (Advanced Process-based total system performance assessment framework for a geological disposal system)이다. APro의 모델링 인터페이스는 프로그래밍 언어인 MATLAB [14]을 이용하여 구축되었다. 그리고, 스페인의 iCP와 유사하게, FEM 기반으로 다중물리현상 모사가 가능한 COMSOL과 지화학반응 계산이 가능한 PHREEQC를 계산 엔진으로 활용하였다. 즉, MATLAB workspace에서 계산에 필요한 전처리와 함께, 순차적 비반복법의 연산자 분리 방법을 적용하여 각 계산 엔진들이 효율적으로 조정된다. 여기서, 지화학반응을 제외한 다중물리현상의 연계를 위해서 COMSOL 내의 segregated solution approach 기능이 기본적으로 활용되었다.

다양한 다중물리현상을 모사하고, 미시 규모의 지화학반응을 고려하기 위해서는 많은 양의 계산이 필요하며, 이에 따른 계산 시간의 증가가 필연적이다. 따라서, APro의 모든 계산은 병렬계산이 가능하도록 구성되었고, 이는 개인용 컴퓨터 뿐만 아니라 컴퓨터 클러스터와 같은 고성능 컴퓨팅 시스템에도 적용가능할 것이다. 특히, 실제 처분장 규모의 모델링 영역에 대한 평가에서는 이러한 계산 시간 단축에 대한 노력이 필수적으로 고려되어야 할 것이다.

## 2.1 APro의 특징

### 2.1.1 모델링 영역의 유연성

APro는 모델링 영역(domain)을 기존의 정형화된 처분시스템으로 제한함으로써 모델의 자유도는 낮지만, 사용자 편의성을 향상시켜 관련 종사자들이 쉽게 사용할 수 있도록 설계되었다. 여기서, 정형화된 처분시스템으로는 폐기물, 처분용기, 처분공 완충재(벤토나이트), 처분터널 뒷채움재로 구성되는 KBS-3 형태의 수직 및 수평형 처분시스템이 고려되었다. 이렇게 공학적방벽의 구성이나 형태는 제한을 두었지만, 처분공 내 폐기물의 개수 및 크기, 완충재의 크기, 처분공의 개수 및 간격, 처분터널의 개수, 크기, 간격 및 위치, 처분방식(수평형/수직형) 등은 사용자가 조절할 수 있도록 하여, 실제 처분 프로그램에 따라 필요한 모델링 영역을 자유롭게 구성할 수 있도록 하였다. 또한, 전체 처분시스템을 대상으로 하는 종합성능평가뿐만 아니라, 특정 구성요소에서의 부분적인 물리현상 모사도 가능하도록 처분시스템 구성요소를 사용자가 선택적으로 지정하도록 하였다.

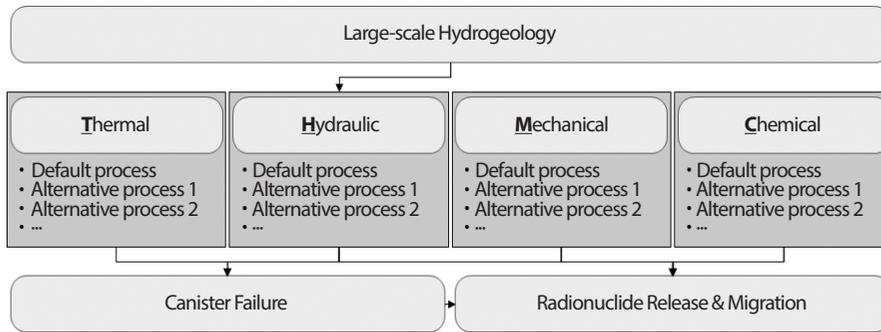


Fig. 1. Multi-physical processes considered in APro.

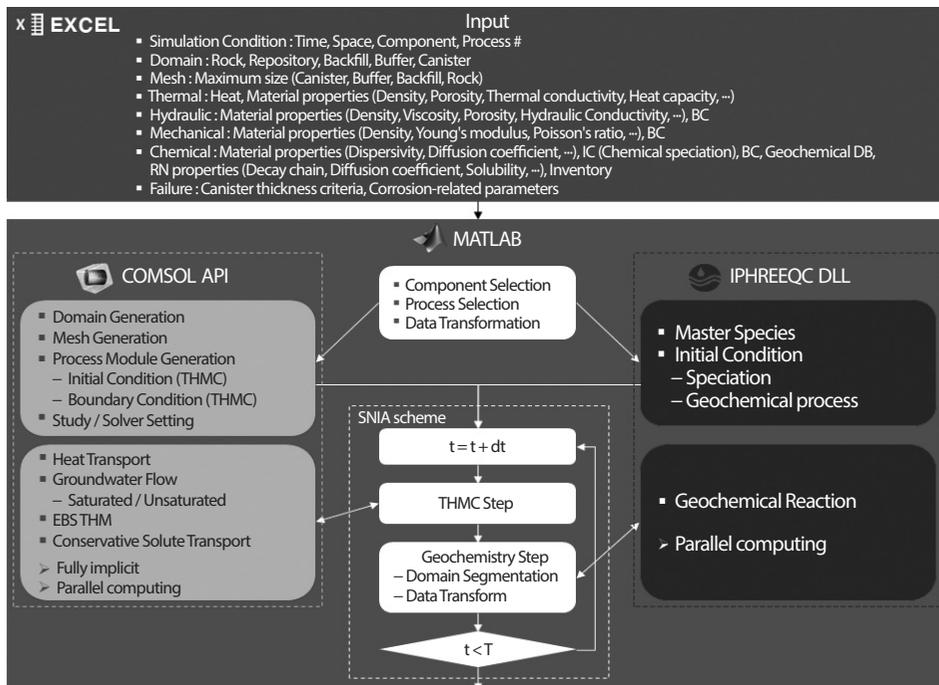


Fig. 2. Components and flowchart of APro.

### 2.1.2 다중물리현상의 모듈화

APro에서 고려되는 물리현상들은 Fig. 1과 같다. 기본적으로, 폐기물에서 발생하는 붕괴열이 공학적방벽과 근계 암반을 통해 전달되는 열적(Thermal) 현상 변화, 근계 암반의 지하수가 불포화 상태의 공학적방벽으로 이동하는 수리적(Hydraulic) 현상 변화, 처분 구조물 및 열-수리 현상 등에 의한 역학적(Mechanical) 현상 변화, 근계 암반 및 완충재/뒷채움재 내 공극수의 화학적(Chemical) 조성의 변화 등이

고려된다. 여기서, 근계영역의 수리적 현상 변화는 원계영역의 광역적 수리지질 현상 변화들에 의해서 영향을 받게 된다. 그리고, 안전성평가의 핵심이 되는 현상으로서 처분용기의 성능상실로부터 시작되는 누출된 핵종의 반응이동 현상이 APro에서 고려되는 주요 현상으로 포함되었다. 이러한 각 현상들은 다시 “Default process”와 다수의 “Alternative process”로 구분하여 사용자가 선택할 수 있도록 함으로써 모델의 유연성을 높였다. 여기서, 각 현상별 “Default

process”는 각 현상을 가장 간단하게 묘사한 개념이 되고, “Alternative process”는 “Default process”를 대체해서 사용자가 좀 더 관심 있게 확인하고자 하는 현상이 될 것이다. 즉, 개발자 입장에서는 별도로 고려하고자 하는 현상들을 모듈 형태로 개발하여 “Alternative process”에 쉽게 추가할 수 있게 되고, 사용자 입장에서는 일부 현상들은 생략하고 특정 현상들을 좀 더 깊이 있게 고려함으로써 사용자 목적에 맞게 모델을 구성할 수 있게 된다. 본 연구의 목적인 모델링 인터페이스 개발 차원에서는 각 물리현상별로 “Default process”들이 적용되었다.

### 2.1.3 계산결과의 통합

COMSOL 내에 특정 현상에 대한 수치해석이 아닌 결과 저장만을 위한 ‘Study’ 또는 ‘Data set’를 별도로 생성시켜, 매 단위시간별로 계산된 결과들이 자동으로 COMSOL 파일 내에 축적이 되도록 하였다. 즉, 최종적인 전체 계산결과는 독립적인 COMSOL 파일 형태로 생성이 된다. 이를 통해, 결과의 후처리 기능이 우수한 COMSOL을 이용하여 사용자 목적에 맞는 결과의 후처리가 가능하도록 하였다.

## 2.2 APro의 구성체계

APro는 크게 입력자료 부분과 계산실행 부분으로 구성된다. 기본 입력자료는 하나의 EXCEL 파일에 일정한 포맷으로 정리되고, 계산실행 부분은 MATLAB 프로그래밍 언어를 이용하여 코딩되었다. APro의 전체적인 구성체계는 Fig. 2와 같다.

사용자 입장에서는, 입력자료인 EXCEL 파일을 작성하고, MATLAB 실행파일을 실행하면 모든 계산결과가 COMSOL 파일 형태로 생성되는 구조이다. 그리고, COMSOL의 GUI 하에서 계산된 결과들을 이용하여 추가적인 후처리 작업을 수행할 수도 있다. 이러한 구조는 사용자가 컴퓨터 프로그래밍에 대한 전문성이 없더라도, 간단하게 실행할 수 있도록 사용자 편의성이 향상된 구조라 할 수 있다.

### 2.2.1 APro의 입력자료 부분

기본 입력자료인 EXCEL 파일은 다음과 같이 구성된다.

Simulation Condition에서는 계산에 필요한 시간 정보(총 평가 기간, 계산 단위시간(time step)), 공간 정보(2차원

또는 3차원), 고려하고자 하는 구성요소(처분용기, 완충재, 뒷채움재, 모암), 고려하고자 하는 현상(열적 현상, 수리적 현상, 역학적 현상, 화학적 현상, 용기 성능 상실 현상) 등을 지정할 수 있다. 여기서, 고려하고자 하는 구성요소는 on/off 방식으로 지정되고, 고려하고자 하는 현상은 각 물리현상별 번호로 지정된다.

Domain에서는 전체 모암의 위치 및 크기, 처분방식(수직 또는 수평), 처분장의 위치, 처분터널의 개수 및 간격, 처분공의 개수 및 간격, 뒷채움재의 크기, 완충재의 크기, 처분용기의 개수 및 크기 등이 각 처분장 별로 지정된다. 여기서, 폐기물 및 공학적방벽 물성이 같은 처분공들을 그룹화하여 하나의 처분장으로 모델 영역을 생성시킬 수 있으며, 물성이 다른 처분공들은 EXCEL의 열(column)을 추가하여 각각의 정보를 제공함으로써 사용자가 원하는 만큼 별개의 처분장으로 설정하여 다양한 형태의 모델 영역을 생성시킬 수 있다.

Mesh에서는 각 구성요소별(처분용기, 완충재, 뒷채움재, 모암)로 FEM 수치해석에 필요한 격자(mesh)의 최대 크기가 지정된다.

Thermal, Hydraulic, Mechanical, Chemical에서는 각 물리현상 해석에 필요한 구성요소별 물성 자료들이 포함된다. 물성값들은 하나의 상수(constant)로 지정되거나 특정 인자에 대한 함수식으로도 표현될 수 있다. 이 때는, 물성값을 고유의 변수명으로 지정하고, 각 변수에 대한 함수식을 별도로 정의해 줄 필요가 있다. 특히, 해당 평가지역의 수리지질 모델이 존재하여 별도의 데이터 파일을 이용하고자 한다면, 수리적 물성 중 수리전도도(hydraulic conductivity)는 그 데이터 파일명으로 지정할 수 있다. 그리고, 열적 현상 입력자료에는 폐기물 별 시간에 따른 붕괴열 함수가 추가되고, 수리적, 역학적 및 화학적 현상 입력자료에는 경계조건이 추가된다. 화학적 현상 입력자료에는 열역학 자료를 포함하고 있는 PHREEQC database 파일명이 지정되고, 각 구성요소별 초기 화학적 조성은 별도의 PHREEQC 파일 형태로 저장하여, EXCEL 파일에는 그 파일명만이 지정된다. 고려되는 화학종 및 핵종의 물성들과 함께 폐기물 내 핵종 재고량도 여기서 지정된다.

Failure에서는 처분용기의 성능상실 조건을 설정하기 위한 입력자료들이 지정된다. 물리현상과 관련된 입력자료들은 Simulation Condition에서 지정된 물리현상 번호에 따라 선택적으로 계산에 활용된다.

## 2.2.2 APro의 계산실행 부분

APro의 계산실행 부분은 크게 전처리 부분과 반복계산 부분으로 구분된다(Fig. 2).

전처리 부분에서는 먼저 기본 입력자료인 EXCEL 파일로부터 시뮬레이션 조건, 모델 영역, 모델 격자, 물리현상 등과 관련된 입력자료들을 읽고, 그 형태를 COMSOL과 PHREEQC에서 호환 가능하도록 변환한다. 여기서, 계산에서 고려되는 모델영역과 물리현상들은 각각 Simulation Condition에서 선택된 것들에 대해서만 설정된다.

모델 영역은 Simulation Condition의 설정에 따라 3차원 또는 2차원의 모델 영역이 COMSOL을 이용하여 생성된다. 폐기물과 처분공은 원기둥(3차원) 또는 직사각형(2차원) 모양으로, 그리고 처분터널은 말굽 모양으로 설정된 개수와 크기에 따라 모델 영역이 생성된다. 생성된 모델 영역들은 처분장별로 ‘처분용기’, ‘완충재’, ‘뒷채움재’, ‘모암’으로 구분하여 그룹화된다. 이를 통해, 물리현상이 적용되는 해당 영역과 그 해석에 필요한 물성에 대한 지정이 용이해졌다. 생성된 모델 영역은 독립된 COMSOL 파일로 저장된다.

모델 격자는 앞단계에서 생성된 모델 영역에 대해서 각 구성요소별(처분용기, 완충재, 뒷채움재, 모암)로 구분하여 설정된 별도의 격자 크기를 이용하여 생성된다. 기본적인 격자의 형태는 3차원인 경우 사면체(tetrahedron)이고, 2차원인 경우는 삼각형(triangle)으로 설정되었다. 생성된 모델 격자는 독립된 COMSOL 파일로 저장된다. 모델 격자는 계산의 수렴성 또는 안정성에 큰 영향을 미친다. 따라서, 효율적인 모델 격자 생성을 위해서는 고려되는 물리현상과 경계조건 등을 고려하여 사용자의 시행착오를 통한 세분화된 모델 격자 생성이 불가피하다. 따라서, APro에서는 저장된 COMSOL 파일을 이용하여 사용자가 자유롭게 모델 격자를 수정할 수 있도록 하였고, 이렇게 수정된 모델 격자를 다음 단계에서 활용할 수 있도록 하였다.

물리 현상과 관련하여 열-수리-역학적 현상과 화학종/핵종의 비반응성 이동 현상 해석에 필요한 지배방정식 및 경계조건들이 COMSOL을 이용하여 설정된다. 여기서, 사용되는 지배방정식들은 COMSOL 내에 이미 존재하는 모듈이거나 개발자의 목적에 따라 새롭게 개발될 수도 있다. 화학종/핵종의 반응 현상 해석은 기본적으로 앞단계에서 생성된 모든 모델 격자에 대해서 수행된다. 이를 위하여, 각 구성요소별로 설정된 초기조건을 이용하여 PHREEQC 해석을 하고, 그

결과를 해당 모델 격자에 할당한다. 이를 바탕으로 각 격자 노드별로 화학반응 계산에 필요한 PHREEQC 명령문들[15]이 내부적으로 생성된다.

반복계산 부분에서는 연산자 분리 방법으로 순차적 비반복법을 적용하였다. 연산자 분리 방법은 일반적으로 반복(iterative)법과 비반복(non-iterative)법으로 구분되고, 일반적으로 반복법은 계산 결과의 정확성이 높지만 계산 효율이 매우 낮고 실제 코드에 적용하기가 매우 제한적이라는 특징이 있다[16]. 따라서, 본 연구에서는 대용량 계산의 효율을 높이기 위해 비반복법을 적용하였지만, 향후 연산자 분리에 의한 오차를 파악하고 그 오차를 줄이기 위한 노력들이 추가적으로 이행되어져야 할 것이다. 순차적 비반복법에 따라, 각 단위시간별로 COMSOL 계산 엔진을 이용하여 열-수리-역학적 현상과 비반응성 이동 현상이 먼저 계산된다. 계산 결과 중 온도와 화학종/핵종의 농도를 각 격자 노드별로 PHREEQC와 호환가능하도록 자료형태와 단위 등을 변환한다. 그리고, 기존의 각 격자 노드별 PHREEQC 명령문에 ‘SOLUTION\_MODIFY’를 이용하여 지화학 반응 현상을 병렬로 계산한다. PHREEQC에서 계산된 지화학 반응 관련 결과와 이전 단위시간에서 계산된 지화학 반응 이외의 결과들은 모두 COMSOL 내의 Previous Solution이라는 별도의 ‘Data Set’에 저장되고, 이는 다음 단위시간에서의 COMSOL을 이용한 열-수리-역학적 현상과 비반응성 이동 현상 계산을 위한 초기조건으로 활용된다. 이와 유사하게, 계산 후 후처리 작업을 위하여 각 단위시간별로 계산된 모든 결과들은 COMSOL 내의 Overall Solution이라는 별도의 ‘Data Set’에 지속적으로 축적된다. 이러한 반복 계산은 모사 시간이 Simulation Condition에서 설정한 총 평가 기간에 도달할 때까지 계속된다.

## 3. 결론

본 연구에서는 국내 고준위 방사성폐기물 심층처분시스템에 대한 프로세스 기반의 종합성능평가체계(APro) 개발을 위한 초기단계로서 MATLAB을 이용한 모델링 인터페이스를 구축하였다. 여기서, 다중물리현상 모사가 가능한 COMSOL과 지화학반응 계산이 가능한 PHREEQC를 계산 엔진으로 활용하였다. APro 개발에 있어서 개발자 및 사용자의 편의

성을 향상시키기 위하여, 정형화된 처분시스템을 선정하고 다중물리현상들을 모듈화하여 고려함으로써 모델링 인터페이스를 구축하였다. 향후, 처분시스템에서 고려되는 주요 현상별 세부 모듈에 대한 연구가 별도로 수행될 것이며, 개발된 모듈을 본 연구에서 구축된 모델링 인터페이스에 추가함으로써 APro의 완성도를 지속적으로 향상시킬 것이다.

## 감사의 글

본 연구는 과학기술정보통신부 지원에 의한 원자력기술개발사업 처분시스템 성능평가체계 개발(NRF-2017M2A8A5014856)의 일환으로 수행되었습니다.

## REFERENCE

- [1] GoldSim Technology Group, GoldSim: Probabilistic Simulation Environment, Ver. 11.1 User's Manual (2014).
- [2] T. Ebashi, Y.S. Hwang, Y.M. Lee, T. Ohi, and S. Koo, "Application of the Comprehensive Sensitivity Analysis Method to a Korean Geological Disposal Concept", *J. Nucl. Sci. Technol.*, 45(11), 1138-1149 (2008).
- [3] J.W. Kim, D.K. Cho, and J. Jeong, "A Methodology for a Risk-Based Approach to Complex Scenarios in a Long-Term Safety Assessment of a Radioactive Waste Repository", *Nucl. Eng. Des.*, 268, 58-63 (2014).
- [4] J.W. Kim, D.K. Cho, N.Y. Ko, J. Jeong, and M.H. Baik, "Model Development for Risk-Based Safety Assessment of a Geological Disposal System of Radioactive Wastes Generated by Pyroprocessing of Pressurized Water Reactor Spent Fuel in Korea", *Nucl. Technol.*, 203(1), 1-16 (2018).
- [5] Nuclear Safety and Security Commission, General Standards for Deep Geological Disposal Facility of High-level Radioactive Waste, NSSC Notice No. 2017-74 (2017).
- [6] D.K. Cho, N.Y. Ko, Y.K. Koh, J.S. Kwon, I.Y. Kim, J.W. Kim, J.H. Ryu, K.W. Park, C.K. Park, T.J. Park, M.H. Baik, S. Yoon, M. Lee, S.Y. Lee, J.K. Lee, J.O. Lee, J. Lee, C. Lee, S. Jung, J. Jeong, and S.H. Ji, A Safety Case of the Conceptual Disposal System for Pyro-processing High-Level Waste Based on the KURT Site (AKRS-16): VI. Models and Data, Korea Atomic Energy Research Institute Technical Report, KAERI/TR-6732/2016 (2016).
- [7] K.S. Kim, C.H. Kang, N.Y. Ko, Y.K. Koh, J.S. Kwon, G.Y. Kim, I.Y. Kim, J.W. Kim, J.S. Kim, J.H. Ryu, K.W. Park, C.K. Park, T.J. Park, D.S. Bae, M.H. Baik, S. Yoon, M. Lee, S.Y. Lee, Y.M. Lee, J.K. Lee, J.O. Lee, J. Lee, J. Lee, C. Lee, S. Jung, J. Jeong, D.K. Cho, W.J. Cho, S.H. Ji, Y.C. Choi, H.J. Choi, and P.S. Hahn, A Safety Case of the Conceptual Disposal System for Pyro-processing High-Level Waste Based on the KURT Site (AKRS-16): Safety Case Synthesis, Korea Atomic Energy Research Institute Technical Report, KAERI/TR-6726/2016 (2016).
- [8] R.T. Mills, C. Lu, P.C. Lichtner, and G.E. Hammond, "Simulating Subsurface Flow and Transport on Ultra-scale Computers using PFLOTRAN", *J. Phys.: Conf. Ser.*, 78, 012051 (2007).
- [9] G.E. Hammond, P.C. Lichtner, and R.T. Mills, "Evaluating the Performance of Parallel Subsurface Simulators: An illustrative example with PFLOTRAN", *Water Resour. Res.*, 50, 208-228 (2014).
- [10] P. Trinchero, I. Puigdomenech, J. Molinero, H. Ebrahimi, B. Gylling, U. Svensson, D. Bosbach, and G. Deissmann, "Continuum-based DFN-consistent Numerical Framework for the Simulation of Oxygen Infiltration into Fractured Crystalline Rocks", *J. Contam. Hydrol.*, 200, 60-69 (2017).
- [11] A. Nardi, A. Idiart, P. Trinchero, L.M. de Vries, and J. Molinero, "Interface COMSOL-PHREEQC (iCP), an Efficient Numerical Framework for the Solution of Coupled Multiphysics and Geochemistry", *Comput. Geosci.*, 69, 10-21 (2014).
- [12] COMSOL, Comsol Multiphysics, Ver. 5.3a Reference Manual (2017).

- [13] D.L. Parkhurst and C.A.J. Appelo, Description of Input and Examples for PHREEQC Version 3 : A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations, U.S. Geol. Surv. Techniques and Methods, book 6, Chap. A43, 497 (2013).
- [14] MathWorks Inc., MATLAB R2015a (2015).
- [15] S.R. Charlton and D.L. Parkhurst, “Modules Based on the Geochemical Model PHREEQC for Use in Scripting and Programming Languages”, *Comput. Geosci.*, 37(10), 1653-1663 (2011).
- [16] J. Carrayrou, R. Mose, and P. Behra, “Operator-splitting Procedures for Reactive Transport and Comparison of Mass Balance Errors”, *J. Contam. Hydrol.*, 68(3-4), 239-268 (2004).