

Self-Adjoint형 S_N 복사수송 계산

Self-Adjoint Form of S_N Radiative Transfer Calculation

노 태 완
홍익대학교
서울 마포구 상수동 72-1

요 약

본 연구에서는 시간 종속형 복사수송식에 대해 중성자 수송계산 분야에서 광범위하게 사용되어 온 방향차분법(S_N ; discrete ordinates method)을 적용한 수치해법을 개발하였다. 복사수송식을 이루는 광자 강도식(radiation intensity equation)을 시간 비종속형의 자기수반형(self-adjoint form)으로 변환하여 계산 안정성을 증가시키고, 비선형인 매질의 온도방정식(material temperature equation)을 선형화하는 새로운 다단계 기법을 개발하였다. 개발된 새로운 방법을 잘 알려진 Marshak 파동 문제에 적용하고 기존의 Monte-Carlo 계산법과 비교하여 계산의 정확성과 효율성을 입증하였다.

Abstract

In this study, the discrete ordinates method which has been widely used in the solution of neutron transport phenomena is applied to the solution of time-dependent radiative transfer equation. The self-adjoint form of the second order radiation intensity equation is used to enhance the stability of the solution, and a new linearization method is developed to avoid the nonlinearity in the material temperature equation. This new solution method is applied to the well known Marshak wave problem, and the numerical result is compared with that of the conventional Monte-Carlo method.

1. 서 론

복사수송(radiative transfer)은 매질을 이루는 입자에 의한 운동 에너지 전달에 의한 전도(conduction)와는 달리 직접적인 광자 수송에 의해 열이 전달되는 현상이다. 기존의 복사수송 계산은 계산의 간편성을 이유로 주로 확산(diffusion) 모델에 의해 광자의 방향성이 무시되어 계산되어 왔다. 원자력계에서는 20세기 중반의 전세계적인 원자력 연구 프로그램의 활성화로 일찍부터 중성자를 비롯한 여러 입자의 거동에 관한 계산이 수행되어 왔으며 이러한 입자의 방향 계산을 방향차분법(discrete ordinates or S_N method)을 비롯한 여러 가지 방법으로 해결하여 왔다. 복사수송은 광자강도(radiation intensity)와 비선형인 매질의 온도(material temperature)에 대한 연립 미분 방정식으로 나타난다. 본 연구에서는 최근에 중성자 수송방정식에 적용되어 효율성을 인정받고 있는 SAAF법(Self-Adjoint Angular Flux Method)을 기존의 방향차분법과 함께 복사수송 방정식의 해에 적용한다. 따라서, 본래 1계 미분방정식으로 표현되는 광자 강도식에 대해 2계의 자기수반형(self-adjoint) 차분식을 유도하여 사용함으로써 해의 수치적 안

정성을 높였고, 매질의 온도 방정식의 비선형성을 해결하는 다단계 선형기법을 사용하였다. 개발된 해법을 이용하여 실제 Marshak Wave 문제를 풀어 기존 Monte Carlo법에 의한 해와 함께 비교하였다.

2. 복사수송(radiative transfer)과 차분법(differencing)

2.1 복사수송식(radiative transfer equation)

시간종속, 복사수송 방정식은 광자강도와 매질의 온도가 연계되어 다음과 같이 나타난다.

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \widehat{\Omega} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi = \sigma_s \phi + \sigma_a B \quad (1)$$

$$C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \int_0^\infty \sigma_a (\phi - B) d\nu \quad (2)$$

여기서, c 는 빛(광자)의 속도, C_v 는 매질의 비열(specific heat), ν 는 광자의 진동수(frequency), $\widehat{\Omega}$ 는 방향변수, $\sigma(\vec{r}, \nu)$ 는 산란(scattering)과 흡수(absorption)를 포함한 소멸상수(extinction coefficient), $\sigma_s(\vec{r}, \nu)$ 와 $\sigma_a(\vec{r}, \nu)$ 는 각각 산란과 흡수상수이다. $\phi(\vec{r}, t, \widehat{\Omega}, \nu)$ 는 광자의 방향강도(angular intensity)로 [energy/area-time-frequency-steradian]의 단위를 갖는다. T 는 매질의 온도이며 $\phi(\vec{r}, t, \nu)$ 는 방향에 대해 적분한 광자강도(angle integrated photon intensity)로

$$\phi = \int \phi d\widehat{\Omega} \quad (3)$$

와 같이 나타나고, B 는 Planck 함수로

$$B(T, \nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2} [\exp(h\nu/kT) - 1]^{-1} \quad (4)$$

로 주어진다. 여기서, h 는 Planck 상수이고, k 는 Boltzmann 상수이다. 여기서, 식(1)은 중성자 수송방정식과 유사한 형태로 광자강도를 미지함수로 갖고, 시간과 위치에 대해 1계 편미분방정식으로 나타난다.

본 연구에서는 계산 편의상 1차원, 산란이 없는 순수 흡수($\sigma_s=0$, 즉, $\sigma_t=\sigma_a$), Grey 근사에 국한하는데, Grey 근사에서는 매질의 온도에 의해 진동수의 함수로 방출되는 식(4)의 Planck 함수를 단순히 온도의 함수로만 근사하여 (즉, 진동수 영역을 단일 그룹으로 근사함.)

$$B(T) = acT^4 \quad (5)$$

로 나타낸다. 여기서, a 는 복사상수(radiation constant)이다. 순수 흡수와 Grey 근사를 사용하고, 연속적인 방향변수에 대해 방향차분법(discrete ordinates or S_N method)을 적용하여 식(1)과 식(2)의 복사수송식을 1차원 형태로 나타내면

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \phi_m}{\partial t} + \mu_m \frac{\partial \phi_m}{\partial x} + \sigma_a \phi_m = \sigma_a acT^4 \quad (6)$$

$$C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \sigma_a (\phi - acT^4) \quad (7)$$

이 된다. 여기서 $m=1, 2, \dots, M$ 은 각각의 차분화된 방향이다.

2.2 시간 차분(temporal differencing)

식(6)과 식(7)로 나타나는 복사강도식과 매질의 온도식에는 위치변수에 대한 미분(spatial derivative)과 시간에 대한 미분(time derivative)이 복합적으로 나타나는데 먼저, 시간 미분에 대한 근사로 후진차분법(backward-differencing)을 적용하면 식(6)과 식(7)은

$$-\frac{1}{c\Delta t}(\phi_m^{n+1} - \phi_m^n) + \mu_m \frac{\partial \phi_m^{n+1}}{\partial x} + \sigma_a \phi_m^{n+1} = \sigma_a ac(T^{n+1})^4 \quad (8)$$

$$\frac{C_v}{\Delta t}(T^{n+1} - T^n) = \sigma_a[\phi^{n+1} - ac(T^{n+1})^4] \quad (9)$$

로 나타난다. 후진차분법에서는 미지함수의 시간 미분항이 시간단계(time step) $n+1$ 과 n 에서의 차로 나타나고, 이를 제외한 모든 미지 함수는 시간 단계 $n+1$ 로 나타남에 주의한다. 식(8)과 식(9)는

$$\mu_m \frac{\partial \phi_m^{n+1}}{\partial x} + \bar{\sigma}_a \phi_m^{n+1} = \sigma_a ac(T^{n+1})^4 + Q_m^n \quad (10)$$

$$\bar{C}_v(T^{n+1} - T^n) = \sigma_a[\phi^{n+1} - ac(T^{n+1})^4] \quad (11)$$

로 단순화 되는데, 여기서, $\Delta t = t^{n+1} - t^n$, $\bar{\sigma}_a = \sigma_a + 1/c\Delta t$, $\bar{C}_v = C_v/\Delta t$, $Q_m^n = \phi_m^n/c\Delta t$ 이다. 식(10)은 ϕ_m^{n+1} 를 미지함수로 가지는 x 에 대한 1계 미분방정식의 차분형태이고 식(11)은 T^{n+1} 에 관한 4차 대수방정식으로 선형이 아님을 알 수 있다.

2.3 위치 차분(spatial differencing)

위치차분을 위한 격자(cell) 구조를 x 의 정수 표시 x_i 는 각 격자의 중심(center)을 나타내고 x 의 반정수 표시 $x_{i+1/2}$ 는 각 격자의 끝점(vertex or edge)을 나타내도록 그림 1과 같이 정한다. 식(10)과 식(11)에서 물질의 속성인 σ_a , $\bar{\sigma}_a$ 는 격자의 내부에서 일정한 값으로 정의되고 미지함수인 ϕ_m^{n+1} , ϕ^{n+1} 과 T^{n+1} 은 격자의 중앙과 끝점에서 모두 정의된다.

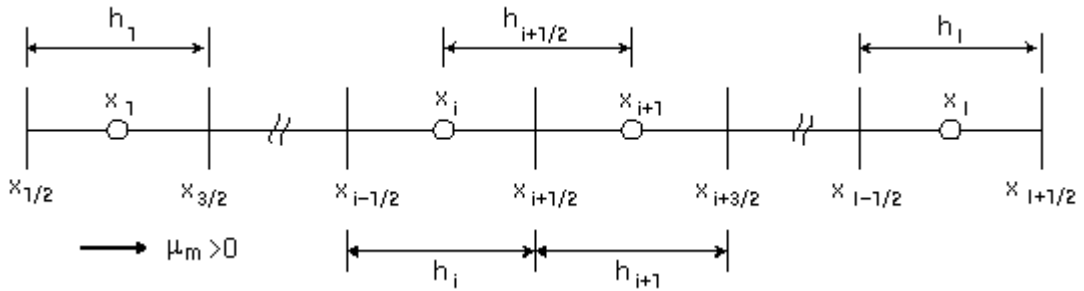


그림 1 격자(cell) 구조

먼저, 식(10)을 구간 $[x_i, x_{i+1}]$ 에 대해 적분하면

$$\mu_m(\phi_{m,i+1}^{n+1} - \phi_{m,i}^{n+1}) + \bar{\sigma}_{a,i+1/2} h_{i+1/2} \phi_{m,i+1/2}^{n+1} = \sigma_{a,i+1/2} h_{i+1/2} ac(T_{i+1/2}^{n+1})^4 + Q_{m,i+1/2}^n h_{i+1/2} \quad (12)$$

이고, 식(10)을 다시 구간 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 에 대해 적분하면

$$\mu_m(\phi_{m,i+1/2}^{n+1} - \phi_{m,i-1/2}^{n+1}) + \bar{\sigma}_{a,i} h_i \phi_{m,i}^{n+1} = \sigma_{a,i} h_i ac(T_i^{n+1})^4 + Q_{m,i}^n h_i \quad (13)$$

이다. 여기서

$$\begin{aligned} h_{i+1/2} &= \frac{h_i + h_{i+1}}{2}, & \sigma_{a,i+1/2} &= \frac{\sigma_{a,i} h_i + \sigma_{a,i+1} h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}}, \\ \bar{\sigma}_{a,i+1/2} &= \frac{\bar{\sigma}_{a,i} h_i + \bar{\sigma}_{a,i+1} h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}}, & Q_{m,i+1/2}^n &= \frac{Q_{m,i}^n h_i + Q_{m,i+1}^n h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}} \end{aligned}$$

이다. 식(13)을 $\phi_{m,i}^{n+1}$ 에 대해 풀면

$$\phi_{m,i}^{n+1} = -\frac{\mu_m}{\sigma_{a,i} h_i} (\phi_{m,i+1/2}^{n+1} - \phi_{m,i-1/2}^{n+1}) + \frac{1}{\sigma_{a,i}} [\sigma_{a,i} ac(T_i^{n+1})^4 + Q_{m,i}^n] \quad (14)$$

이고, 식(14)를 식(12)의 $\phi_{m,i}^{n+1}$, $\phi_{m,i+1}^{n+1}$ 에 대입하면

$$\begin{aligned} & -\frac{\mu_m^2}{\sigma_{a,i+1} h_{i+1}} (\phi_{m,i+3/2}^{n+1} - \phi_{m,i+1/2}^{n+1}) + \frac{\mu_m^2}{\sigma_{a,i} h_i} (\phi_{m,i+1/2}^{n+1} - \phi_{m,i-1/2}^{n+1}) \\ & + \bar{\sigma}_{a,i+1/2} h_{i+1/2} \phi_{m,i+1/2}^{n+1} = \sigma_{a,i+1/2} h_{i+1/2} ac(T_{i+1/2}^{n+1})^4 + Q_{m,i+1/2}^n h_{i+1/2} \\ & - \frac{\mu_m}{\sigma_{a,i+1}} [\sigma_{a,i+1} ac(T_{i+1}^{n+1})^4 + Q_{m,i+1}^n] + \frac{\mu_m}{\sigma_{a,i}} [\sigma_{a,i} ac(T_i^{n+1})^4 + Q_{m,i}^n] \end{aligned} \quad (15)$$

이 된다. 식(15)는 2계 자기수반형 차분식으로 중성자 수송론에서 SAAF(Self-Adjoint Angular Flux) 중성자 수송식에 해당하는 식으로 여기에서는 광자의 방향강도(angular intensity) ϕ 가 미지함수이므로 SAAI(Self-Adjoint Angular Intensity) 수송식으로 부른다. 식(15)를 보면 격자 양단에 위치하는 $n+1$ 시간단계에서의 방향 광자강도가 미지함수이고 이들이 격자 양단과 중앙에 위치한 $n+1$ 시간단계에서의 온도 T_i^{n+1} , $T_{i+1/2}^{n+1}$ 과 n 시간단계에서의 방향 광자강도 $Q_{m,i}^n$, $Q_{m,i+1/2}^n$ 들에 의해 표시됨을 알 수 있다.

식(11)의 온도식 또한 차별화되어야 하는데 이는 대수 방정식으로 특별한 차별과정이 요구되지는 않고 격자의 중앙과 양단에서의 $n+1$ 시간단계에서의 온도 T_i^{n+1} 과 $T_{i+1/2}^{n+1}$ 를 구하는데 사용된다. 하지만 식(11)은 비선형 방정식이므로 적절한 선형화 기법이 요구되며 다단계 선형화법(multi-step linearization)

$$B^{n+1,l} = B^{n+1,l-1} + \frac{\partial B}{\partial T} \Big|^{n+1,l-1} (T^{n+1,l} - T^{n+1,l-1}) \quad (16)$$

을 사용하였을 때의 결과는 Grey 근사 $B(T) = acT^4$ 를 사용하면 격자 중앙과 격자 끝점에서 각각

$$ac(T_i^{n+1,l})^4 = \nu_i^{n+1,l-1} \phi_i^{n+1} + \tau_i^{n+1,l-1} \quad (17)$$

$$ac(T_{i+1/2}^{n+1,l})^4 = \nu_{i+1/2}^{n+1,l-1} \phi_{i+1/2}^{n+1} + \tau_{i+1/2}^{n+1,l-1} \quad (18)$$

이 된다. 여기서,

$$\begin{aligned} \nu_i^{n+1,l-1} &= \frac{\sigma_{a,i} ac(T_i^{n+1,l-1})^3}{C_{v,i} + \sigma_{a,i} ac(T_i^{n+1,l-1})^3}, \\ \nu_{i+1/2}^{n+1,l-1} &= \frac{\sigma_{a,i+1/2} ac(T_{i+1/2}^{n+1,l-1})^3}{C_{v,i+1/2} + \sigma_{a,i+1/2} ac(T_{i+1/2}^{n+1,l-1})^3}, \end{aligned}$$

$$\tau_{i+1/2}^{n+1, l-1} = \frac{\overline{C}_{v, i+1/2} ac(T_{i+1/2}^{n+1, l-1})^3 (4T_{i+1/2}^n - 3T_{i+1/2}^{n+1, l-1})}{\overline{C}_{v, i+1/2} + \sigma_a ac(T_{i+1/2}^{n+1, l-1})^3},$$

$$\tau_i^{n+1, l-1} = \frac{\overline{C}_{v, i} ac(T_i^{n+1, l-1})^3 (4T_i^n - 3T_i^{n+1, l-1})}{\overline{C}_{v, i} + \sigma_a ac(T_i^{n+1, l-1})^3}$$

이다.

3. 수치결과

최종적으로 광자의 열복사 현상은 각 시간 단계에서 식(14), 식(15)로부터 광자 강도를 구하고 식(17), 식(18)로부터 매질의 온도를 구하는 절차로 계산된다. 이러한 식들을 프로그램하여 Marshak Wave 문제에 적용한 결과가 그림 2에 나타난다. 이 문제를 통해 0.001 keV의 초기온도를 갖는 매질에 1 keV의 에너지를 갖는 광자가 입사될 때의 거동을 알 수 있다. 여기서 산란계수는 0 ($\sigma_s=0$)이고 흡수계수로 $\sigma_a = 300/T^3$ 을 적용하였으며 전체 격자수는 100 이고 $\Delta t = 1.25 \times 10^{-14}$ sec 이다. 그림 2의 그래프는 매질의 온도를 나타내며 Monte Carlo법(T-MC)와 본 연구의 결과(T-SAAI)를 비교하였다. 계산시간이 과도하게 소모되는 Monte-Carlo법에 비해 계산 시간이 작게 소모되는 S_N법의 결과가 거의 동일하게 나타남을 알 수 있다.

그림 3-5는 같은 Marshak wave 문제에 대해 온도 계산을 수행할 때 일단계 선형화와 다단계 선형화의 결과를 각각 다른 시간간격 계산에 대해 보인다. 여기서 m은 다단계(multi step)를 s는 일단계(single step) 선형화 계산을 나타내며 시간 단위 1 shake는 10^{-8} sec를 의미한다. 시간간격이 작을 때는 일단계 선형화의 결과와 다단계 선형화의 결과의 차이가 적으나 시간 간격이 커질수록 다단계 선형화의 결과가 더욱 정확함을 알 수 있다. 계산 시간 측면에서는 일단계 선형화가 경제적이거나 계산의 정확도를 얻기 위해서는 시간 간격의 세분화가 요구되므로 결국 본 연구에서 제안한 다단계 선형화 기법이 최종적인 경제성에서도 유리함을 알 수 있다.

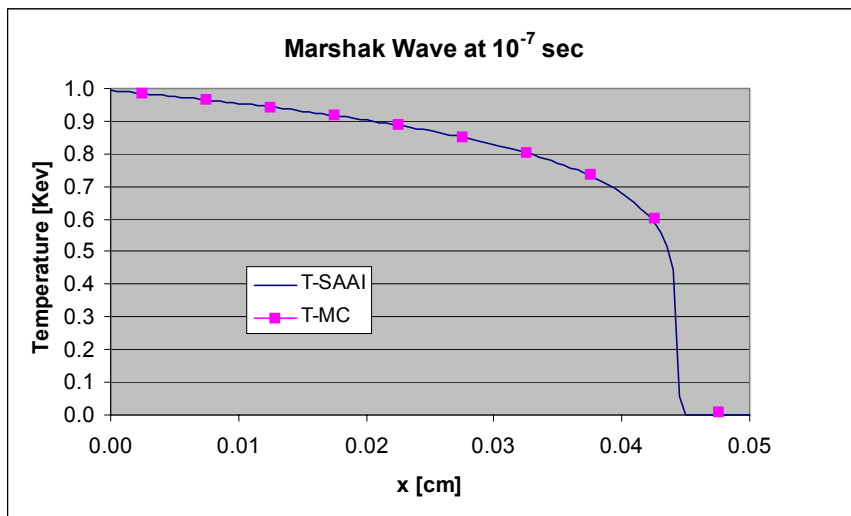


그림 2 Marshak wave 문제

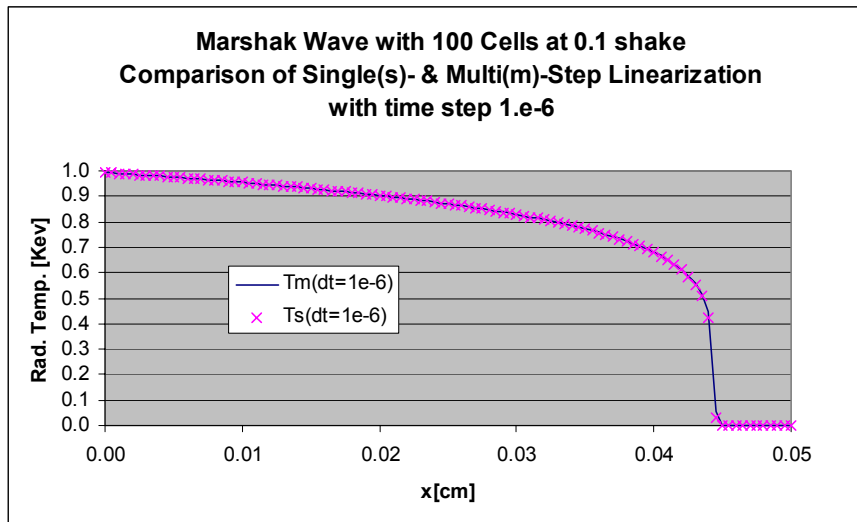


그림 3 일단계와 다단계 선형화 비교(1)

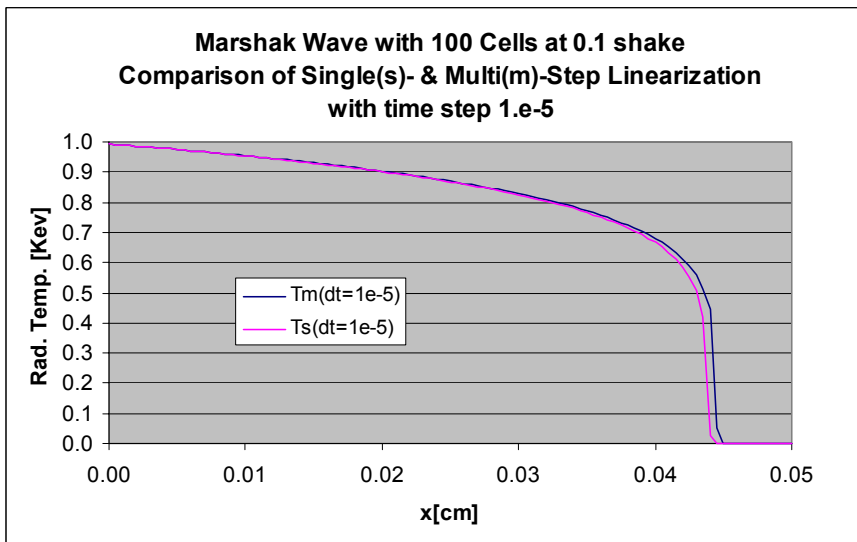


그림 4 일단계와 다단계 선형화 비교(2)

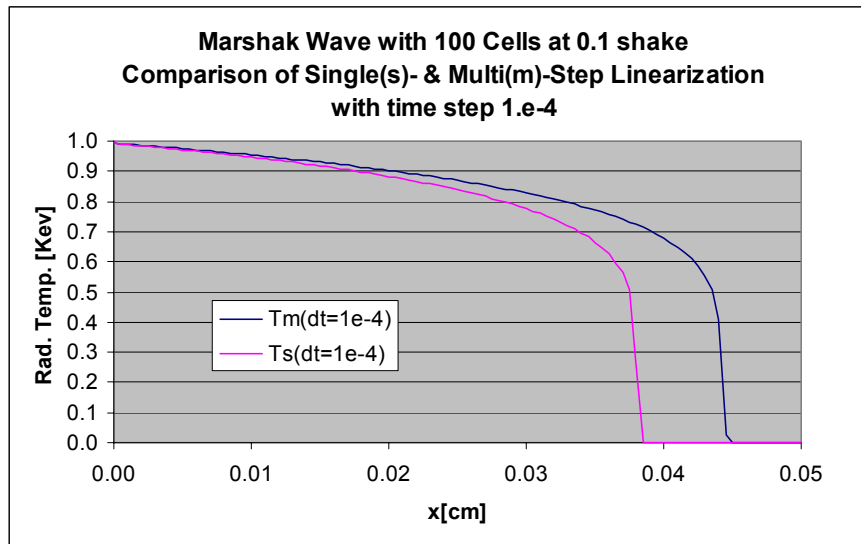


그림 5 일단계와 다단계 선형화 비교(3)

4. 결 론

기존 중성자 수송방정식의 풀이에 광범위하게 사용되는 방향차분법(discrete ordinates method)을 복사수송 방정식의 풀이에 적용하였고, 위치 변수 차분법으로는 1계 미분방정식으로부터 2계의 자기수반형(self-adjoint) 차분식을 사용하여 해의 안정성을 높였다. 복사수송은 광자밀도(photon or radiation intensity)와 비선형인 물질의 온도(material temperature)에 대한 연립 미분 방정식으로 나타나는데 이러한 비선형성을 해결하는 선형기법이 함께 소개되었다. 개발된 해법을 이용하여 실제 Marshak Wave 문제를 풀어 기존 Monte Carlo법에 의한 해와 함께 비교하여 제안된 방법론의 우수성을 보였다.

참고문헌

1. D. Mihalas and B. Weibel-Mihalas, Foundations of Radiation Hydrodynamics, Dover Publications, Inc. (1999)
2. J. E. Morel and J. M. McGhee, "A Self-Adjoint Angular Flux Equation", Nuclear Science and Engineering, 132, 312-325 (1999)
3. J. E. Morel, T. A. Wareing, and K. Smith, "A Linear-Discontinuous Spatial Differencing Scheme for S_N Radiative Transfer Calculations", Journal of Computational Physics, 128, 445-462 (1996)
4. J. E. Morel, J. M. McGhee, B. T. Adams, and Taewan Noh, "Spatial Discretizations for Self-Adjoint Forms of the Radiative Transfer Equationss", submitted for Journal of Computational Physics (2002)