

수송 경계조건의 확산 근사에 대한 평가
- 반사 및 진공 조건 -

Evaluation of Diffusion Approximation to Transport Boundary Conditions
- Reflective and Vacuum Conditions -

노 태 완

홍익대학교

서울 마포구 상수동 72-1

요 약

중성자 거동을 확산방정식으로 정확하게 기술하기 위해서는 정확한 경계조건을 적용하여야 한다. 본 연구에서는 수송이론의 반사 및 진공경계조건에 대하여 현재 확산계산에서 사용되는 영 중성자류 조건, Marshak 및 Mark 조건, Albedo 조건 등에 대하여 수송이론의 관점에서 유도 분석하여 각 조건의 수학적, 물리적 의미를 이해하고 서로의 상관관계를 보였다. 구체적 경계조건을 갖는 대상 문제를 서로 다른 확산경계 근사식을 사용하여 풀어 결과를 비교하여 이들이 수송 경계조건을 비교적 정확히 기술함을 보였다.

Abstract

To correctly predict neutron behavior by diffusion calculations, it is required that the transport boundary conditions are also precisely formulated by the diffusion approximation. Currently, zero net current condition, Marshak and Mark conditions, Albedo conditions, etc, have been used in diffusion theory to approximate the reflective and vacuum conditions in transport phenomena. In this study we derived and analyzed those conditions in the view point of transport theory to show the mathematical validity and to understand the physical meanings and relationship of the conditions. To get specific idea we solved the sample problem using these diffusion boundary conditions. Comparing the results with the transport calculation assured that the diffusion approximation armed with well formulated diffusion boundary conditions describes the neutron behavior very accurately.

1. 서론

매질에서의 중성자 거동은 시간, 위치, 방향, 에너지 등의 함수로 나타나며 수송방정식(transport equation)으로 정확히 기술된다. 하지만 수송방정식의 방향변수 처리의 어려움으로 노심 해석과 같은 대규모 계산에는 방향변수를 제거하여 수송방정식을 근사하는 확산방정식(diffusion equation)이 사용되고 있다. 이에 따라 수송이론에서의 경계조건(boundary conditions)도 확산이론에 적합한 방향변수를 포함하지 않는 경계조건으로 바뀌어야 하는데, 본 논문에서는 현재 확산이론에 사용되는 여러 경계조건을 수송이론의 관점에서 분석하여 각각의 경계조건에 대한 물리적, 수학적 의미를 구체화하고, 실제 전산 프로그램을 사용하여 그 차이를 정량적으로 보인다.

2. 수송방정식과 경계조건

2.1 수송방정식

1차원, 시간 비종속(time independent) 문제에 대한 Boltzmann 수송방정식은

$$\mu \frac{d\varphi}{dx} + \sigma(x, E)\varphi(x, \mu, E) = \int dE' \int d\mu' \sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu, E' \rightarrow E)\varphi(x, \mu', E') + Q(x, \mu, E) \quad (1)$$

이다. 여기서, φ 는 방향중성자속(angular flux)이고, x 와 E 는 각각 위치와 에너지 변수, μ 는 그림 1에서와 같이 중성자의 운동방향으로 x 축과 이루는 각의 cosine 값(direction cosine = $\cos\theta$)이며, σ 와 σ_s 는 각각 거시총단면적(macroscopic total cross section)과 거시산란단면적(macroscopic scattering cross section)을 나타내고, Q 는 중성자원(source)이다. 논의를 단순하게 하기 위하여, 내에너지군(within energy group), 등방산란(isotropic scattering) 및 등방원(isotropic source)으로 한정하면 식(1)은

$$\mu \frac{d\varphi}{dx} + \sigma(x)\varphi(x, \mu) = \sigma_s(x)\phi(x) + Q(x) \quad (2)$$

로 단순해지며, 여기서 ϕ 는 중성자속(scalar flux)으로 방향중성자속에 대해

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \varphi(x, \mu) \quad (3)$$

로 정의된다. 위에서는 1차원의 모든 방향을 $\int_{-1}^1 d\mu = 2$ 로 정규화하였다.

2.2 수송 경계조건

여기에서는 수송방정식의 경계조건으로 진공경계조건(vacuum boundary conditions)과 반사경계조건(reflective boundary conditions)을 다룬다. 중성자 거동을 기술하는데 편리하게 사용되는 기타 경계조건도 유사한 방법으로 해석할 수 있다.

반사경계조건은 대칭면에서의 거울반사(mirror reflection)를 나타내며, 그림 1의 왼쪽 경계에 적용하면

$$\varphi(a, \mu) = \varphi(a, \mu') \quad (4)$$

로 기술된다. 여기서, μ 는 중성자의 입사방향(incidence angle), μ' 은 중성자의 반사방향(reflection angle)이다. 반사경계조건은 문제의 대칭성을 이용하여 계산 영역을 줄이는데 유용하게 사용된다. 때로

식(4)를

$$\varphi(a, \mu) = \alpha \varphi(a, -\mu)$$

로 나타내고, 이를 수송방정식의 Albedo 조건이라고도 하는데 $\alpha = 1.0$ 일 때 반사조건을 나타낸다.

진공경계조건은 자유표면조건(free surface condition)이라고도 불리는데 중성자가 매질의 외부(예를 들어, 진공)에서 유입될 수 없음을 나타낸다. 따라서, 그림 1의 오른쪽 경계에서의 진공조건은

$$\varphi(b, \mu) = 0 \quad (-1 \leq \mu \leq 0) \quad (5)$$

로 표시된다. 대상 매질의 외부에서 유입되는 방향중성자속을 알고 있을 때는

$$\varphi(b, \mu) = f_\mu$$

로도 나타내며 이를 **기지유입조건**(known incoming condition) 또는 **비영조건**(inhomogeneous condition)이라 한다. 물론 $f_\mu = 0$ 일 때 진공조건이 된다.

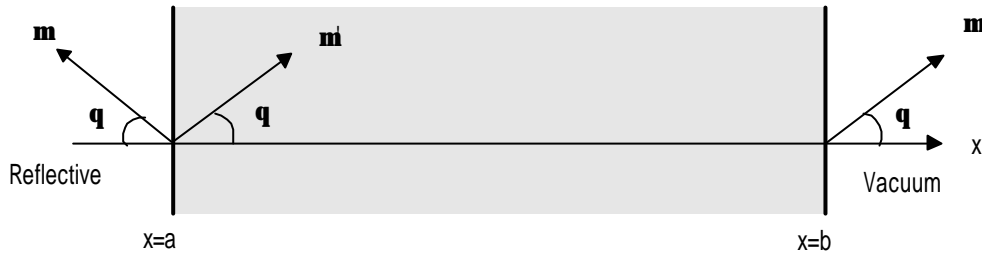


그림 1 반사 및 진공 경계조건

3. 확산방정식 및 경계조건

3.1 확산방정식

수송방정식(식(2))에서 방향중성자속 φ 를 방향변수에 대해 Legendre 다항식 $P_n(\mu)$ 로 둘째 항까지 전개하면(P_1 -근사)

$$\varphi(x, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \phi_n(x) P_n(\mu) \approx \phi_0(x) + 3\mu\phi_1(x) \quad (6)$$

이다. Legendre 다항식의 직교성(orthogonality)

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu P_n(\mu) P_m(\mu) = \begin{cases} \frac{1}{2n+1}, & n = m \\ 0, & n \neq m \end{cases} \quad (7)$$

을 이용하면, 전개계수 $\phi_n(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu P_n(\mu) \varphi(x, \mu)$ 에서

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \varphi(x, \mu) \equiv \phi(x) \quad (8)$$

$$\phi_1(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \mu \varphi(x, \mu) \equiv J(x) \quad (9)$$

로 각각 중성자속 ϕ 와 중성자류(neutron current) J 가 된다. 따라서, 식(6)은

$$\varphi(x, \mu) \approx \phi(x) + 3\mu J(x) \quad (10)$$

로 쓸 수 있다. 식(10)을 식(2)의 수송방정식에 대입하고 $-1 \leq \mu \leq 1$ 로 적분하면

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \mu \frac{d}{dx} [\phi(x) + 3\mu J(x)] + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \sigma(x) [\phi(x) + 3\mu J(x)] = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \sigma_s(x) \phi(x) + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu Q(x)$$

또는

$$\frac{dJ(x)}{dx} + \sigma_a(x) \phi(x) = Q(x) \quad (11)$$

가 된다. 식(11)에서 $\sigma_a = \sigma - \sigma_s$ 는 거시흡수단면적(macroscopic absorption cross section)이다. 이번에는 식(2)에 μ 를 곱하여 $-1 \leq \mu \leq 1$ 로 적분하면

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \mu^2 \frac{d}{dx} [\phi(x) + 3\mu J(x)] + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \mu \sigma(x) [\phi(x) + 3\mu J(x)] \\ = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \mu \sigma_s(x) \phi(x) + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\mu \mu Q(x) \end{aligned}$$

또는

$$\frac{1}{3} \frac{d\phi}{dx} + \sigma(x) J(x) = 0. \quad (12)$$

를 얻는다. 식(12)를 J 에 대해 풀면

$$J(x) = -D(x) \frac{d\phi}{dx} \quad (13)$$

이고, 여기서 매질의 확산계수는 $D(x) = 1/3\sigma(x)$ 로 정의된다. 식(13)을 식(11)에 대입하여 **확산방정식**

$$-\frac{d}{dx} D(x) \frac{d\phi}{dx} + \sigma_a(x) \phi(x) = Q(x) \quad (14)$$

을 얻는데, 이는 방향변수가 제거된 중성자속 ϕ 에 관한 식이다.

3.2 경계조건

수송방정식에서 식(4)와 (5)로 나타나는 반사경계조건과 진공경계조건은 중성자의 운동방향 μ 로 기술되므로, 이를 방향변수를 고려하지 않는 확산모형에 적용하기 위해서는 이들 조건을 방향변수가 제거된 새로운 형태로 나타내어야 한다. 각 경계조건에 대해 이러한 과정을 다음에서 보인다.

3.2.1 반사경계조건

수송이론에서의 반사조건인 식(4)에 대해 확산방정식의 유도에 사용한 P_1 -근사를 적용하면

$$\phi(a) + 3\mu J(a) = \phi(a) + 3\mu' J(a)$$

이고, 1차원 반사의 경우 $\mu' = -\mu$ 이므로

$$J(a) = -D \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x=a} = 0 \quad (15)$$

와 같은 간단한 결과를 얻는다. 확산이론에서는 식(15)를 **영 순중성자류조건(zero net current condition)**이라 부른다.

3.2.2 진공경계조건

진공조건에 대한 확산근사는 방법에 따라 여러 가지가 있을 수 있으며 여기에서는 확산계산에 자주 사용되는 Marshak 조건과 Mark 조건에 대해 기술한다.

(1) Marshak 경계조건

그림 1의 오른쪽 경계에 적용된 진공조건은 외부에서 대상 매질로 유입되는 모든 방향중성자속이 0이라는 의미로 확산모형에서는 왼쪽 방향으로 유입되는 중성자류가 0이 된다고 근사할 수 있다. 즉, x 축의 양의 방향을 '+', 음의 방향을 '-'로 할 때, 식(9)에서

$$J^- = \frac{1}{2} \int_0^{-1} d\mu \mu \phi(b, \mu) = 0$$

이다. 앞서서와 같이 ϕ 에 대해 P_1 -근사를 하면

$$J^- = \frac{1}{2} \int_0^{-1} d\mu \mu [\phi(b) + 3\mu J(b)] = \frac{1}{4} \phi(b) - \frac{1}{2} J(b) = 0 \quad (16)$$

이고, 따라서 **Marshak 경계조건**

$$J(b) = -D \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x=b} = \frac{1}{2} \phi(b) \quad (17)$$

을 얻을 수 있다.

(2) Mark 경계조건

수송이론의 진공조건에 대해 Marshak 조건은 방향중성자속을 유입 방향에 대해 적분한 중성자류가 0이 된다고 근사한 것에 비하여, Mark 조건은 유입 방향을 차분방향(discrete ordinates)으로 직접 나타내어 기술한다. 즉, 식(5)에 대해 P_1 -근사를 하면 $-1 \leq \mu \leq 0$ 에서

$$\phi(b) + 3\mu J(b) = 0$$

이다. 위 식에서 μ 대신에 수송방정식의 방향변수 처리법의 하나인 방향차분법(S_M : discrete ordinates method)에서 사용하는 S_2 방향구적집합(quadrature set)의 $\mu = -1/\sqrt{3}$ 을 사용하면 ($-1 \leq \mu \leq 0$ 이므로 음의 값을 택함.)

$$\phi(b) - \sqrt{3}J(b) = 0$$

즉, Mark 경계조건

$$J(b) = -D \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x=b} = \frac{1}{\sqrt{3}} \phi(b) \quad (18)$$

을 얻는다. 실제로 식(17)의 Marshak 조건과 식(18)의 Mark 조건은 $\sqrt{3} = 1.732 \approx 2$ 로 매우 유사하다.

3.2.3 Albedo 경계조건

확산계산에서는 실제로 Albedo 경계조건이 자주 사용된다. 원자로 이론에서 Albedo 값 α 는 어떤 경계에서 중성자류의 유입과 유출의 비, 즉

$$\alpha = \frac{J^-}{J^+} \quad (19)$$

로 정의한다. 식(16)과 또 이와 유사한 식에서 $J^{\pm} = \frac{1}{4} \phi \pm \frac{1}{2} J$ 이므로 이를 식(19)에 대입하면

$$J = \frac{1}{2} \left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha} \right) \phi \quad (20)$$

이다. 따라서, $\alpha=0$ 이면 $J=\phi/2$ 로 Marshak 조건을 나타내고, $\alpha=1$ 이면 $J=0$ 로 반사조건 또는 영 중성자자유조건을 나타낸다. $\alpha=-0.072$ 일 때는 $J=\phi/\sqrt{3}$ 이 되어 Mark 조건을 나타내지만 이는 음의 Albedo 값으로 물리적 의미는 없다. 때로 상용 확산코드에서는 Albedo 조건을

$$J = \beta \phi \quad (21)$$

로 기술하기도 하는데, 이 경우에는 $\beta=0$ 일 때 반사조건, $\beta=0.5$ 일 때, Marshak 조건, $\beta=1/\sqrt{3}=0.57735$ 일 때 Mark 조건, $\beta=\infty$ 일 때 $\phi=0$ 인 영 중성자속조건(zero flux condition)을 나타낸다.

4. 수치계산 및 결과

앞에서 언급한 수송 경계조건의 확산근사 모형을 실제적인 문제에 대해 적용하여 계산결과를 확인하였다. 대상 문제는 그림 2에 나타나는데 전체 길이는 15 cm이고, 중성자원을 갖는 매질, 산란이 큰 매질, 흡수효과가 큰 매질의 서로 다른 세 가지 매질이 혼합되어 있다. 각 물질에 대한 거시단면적을 표 1에 수록하였다. 매질의 왼쪽 경계에는 반사조건을 오른쪽 경계에는 진공조건을 적용하였다. 반사조건은 확산모형의 영 중성자자유조건으로 근사하였고 진공조건은 영 중성자속조건, Marshak 조건, Mark 조건으로 근사하였다. 확산계산은 유한차분법(finite difference method)을 사용하였고 S_{16} 의 다이아몬드 차분법(diamond difference method)을 사용하는 수송계산을 기준계산으로 하였다. 격자크기 차이에서 나타나는 오차를 줄이기 위해 수송계산과 확산계산 모두에 대해 격자크기는 0.25 cm로 하여 총 60개의 격자를 사용하는 미세격자 계산을 수행하였다.

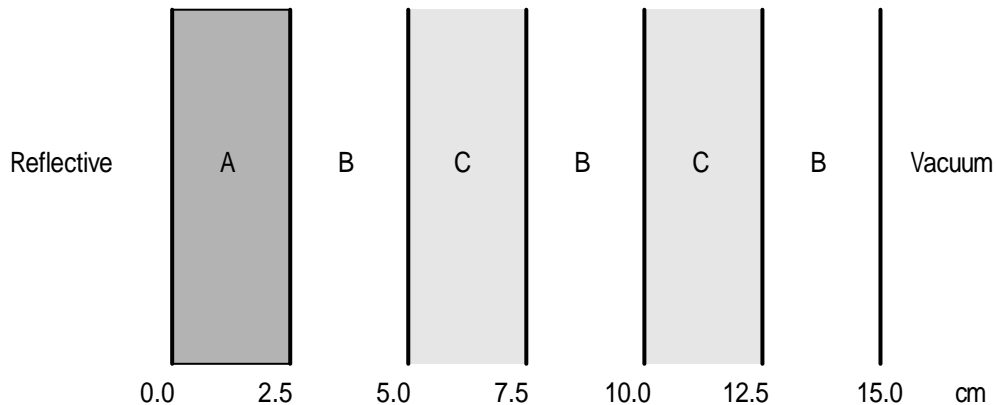


그림 2 Sample Problem

Region	σ	σ_s	Q
A	1.0	0.9	1.0
B	1.0	0.0	0.0
C	1.0	0.9	0.0

표 1 macroscopic cross sections of material

계산결과는 그림 3에 나타나는데 흡수효과가 큰 물질의 주변과 진공경계의 주변에서 수송계산과 확산계산의 결과가 차이가 있음을 보여준다. 수송 경계조건중 반사조건은 확산계산의 영 순중성자류조건으로 정확히 기술되고, 진공조건을 기술하는 확산모형 중에서는 Mark 조건과 Marshak 조건은 차이를 보이지 않으나 영 중성자속 조건은 세 가지의 모형 중 가장 부정확하였다. 그림 3의 그래프에서 y축이 로그 스케일임을 감안하면 대상 문제에 대한 전체적인 확산근사는 비교적 정확한 결과를 보이는데 이는 표2에 수록된 x로 적분한 중성자속 값과 이의 오차를 통하여 알 수 있다.

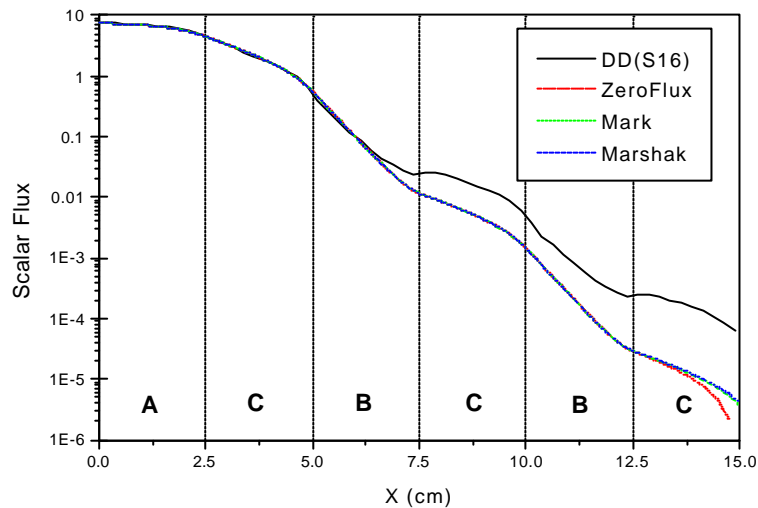


그림 3 Scalar Flux Distribution for the Sample Problem

	DD(S16)	Zero Flux	Mark	Marshak
x-integrated Scalar Flux	22,1985	22,0258	22,0258	22,0258
Relative Error		0,7%		

표 2 x-integrated Scalar Flux and Relative Error for the Sample Problem

5. 결과 및 논의

본 논문에서는 수송방정식으로부터 확산방정식을 유도하는데 사용하는 P_1 -근사를 수송 경계조건에 대하여도 동일하게 적용하여 1차원 확산 경계조건을 유도하였다. 결과는 새로운 것이 아니지만 이러한 과정을 통하여 현재 사용되는 확산 경계조건의 타당성을 수학적, 물리적 관점에서 보일 수 있었다. 다차원 문제에 대해서도 복잡하지만 유사한 방법으로 분석할 수 있으며 기타의 주기조건(periodic condition), 백색조건(white condition)에 대해서도 적용할 수 있을 것이다. 경계조건에 대한 확산근사 모형은 수송계산 결과와는 미세한 차이를 보이거나 전체적인 크기에 있어서는 매우 정확한 결과를 보였다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단 핵심연구지원과제인 '단순화된 우성형 중성자 수송방정식을 이용한 방향차분 노달 수송해법 개발'에 관한 연구의 일환으로 수행되었음.

참고문헌

1. J.J Duderstadt and W.R. Martin, *Transport Theory*, John Wiley & Sons, 1979
2. J.J Duderstadt and L.J. Hamilton, *Nuclear Reactor Analysis*, John Wiley & Sons, 1976
3. E.E.Lewis and W.F. Miller, Jr., *Computational Methods of Neutron Transport*, John Wiley & Sons, 1984
4. Rudi J.J. Stamm'ler and M.J. Abbate, *Method of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design*, Academic Press Inc., 1983