

방향차분법을 적용한 시간종속 복사 열전달 계산

노태완*

홍익대학교 기초과학부 응용수학과
(2006년 5월 19일 접수, 2006년 11월 30일 채택)

Application of Discrete-Ordinate Method to the Time Dependent Radiative Heat Transfer Calculations

Taewan Noh*

Applied Mathematics, Hongik University, Seoul, Korea
(Received 19 May 2006, Accepted 30 November 2006)

요 약

원자력 분야에서 중성자 수송계산을 위해 개발되어 널리 사용되는 방향차분법을 시간 종속 복사 열전달식의 해를 구하는데 적용하였다. 광자의 방향별 밀도를 자체수반형 2계 편미분방정식으로 나타내어 해의 안정성을 높였고 매질의 온도방정식의 비선형성은 다단계 선형화법을 사용하여 근사하였다. 본 연구에서 개발된 해법을 전형적인 Marshak wave 문제에 적용하였고 계산 결과를 기존의 Monte Carlo의 계산결과와 비교하여 그 우월성을 보였다.

주요어 : 중성자 수송, 복사 열전달, 방향차분, 자체수반형

Abstract — In this study, the discrete ordinates method which has been widely used in the solution of neutron transport equation is applied to the solution of the 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 multi-step 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.

Key words : Neutron transport, Radiative heat transfer, Discrete ordinate, Self-adjoint

1. 서 론

원자력계에서는 20세기 중반의 전세계적인 원자력 연구 프로그램의 활성화로 일찍부터 중성자를 비롯한 여러 입자의 거동에 관한 계산이 수행되어 왔다. 중성자 거동은 위치, 방향, 중성자 에너지 및 시간을 변수로 하는 Boltzmann 중성자 수송방정식(neutron transport equation)^[1]으로 기술된다. 이러한 입자의 방향성을 방향차분법(discrete ordinates or S_N method)을 비롯한 여러

가지 방법으로 해결하여 왔다. 복사 열전달(radiative heat transfer)은 매질을 이루는 입자의 운동 에너지의 전달에 의한 전도(conduction)와는 달리 직접적인 광자 수송에 의해 열이 전달되는 현상이다^[2]. 이러한 복사 열전달은 핵분열에 의한 열 생성 시 초기 열전달을 주도하는 것으로 알려져 있어 이에 관한 많은 연구가 집중되고 있으나 계산의 간편성 때문에 확산(diffusion) 모델에 의해 광자의 방향성이 무시되어 계산되어 지는 것이 보통이다. 복사수송은 광자의 방향별 밀도(photon or radiation intensity)와 비선형으로 나타나는 매질의 온도(material temperature)에 대한 연립 미분 방정식으로 나타난다. 본 연구에서는 최근에 중성자 수송방정식에 적용되어 효율성을 인정받고 있는 SAAF법(Self-Adjoint Angular Flux

*To whom correspondence should be addressed.
Applied Mathematics, Hongik University, Seoul, Korea
Tel: 02-320-1628
E-mail: twnoh@hongik.ac.kr

Method)^[3]을 기존의 방향차분법과 함께 복사 열전달 방정식의 해에 적용한다. 따라서, 본래 1계 미분방정식으로 표현되는 광자 강도식에 대해 2계의 자체수반형(self-adjoint) 차분식을 유도하여 사용함으로써 해의 수치적 안정성을 높였고, 매질의 온도 방정식의 비선형성을 해결하는 선형기법(linearization method)을 개발하여 사용하였다. 개발된 해법을 이용하여 실제 Marshak wave 문제^[4]를 풀어 기존 Monte Carlo법에 의한 해와 함께 비교하였다.

2. 복사 열전달(radiative heat transfer)

2-1. 복사 열전달 방정식

시간종속, 복사 열전달 방정식은 광자의 방향밀도(photon or radiation angular intensity) $\psi(\vec{r}, t, \hat{\Omega}, \nu)$ 와 매질의 온도(material temperature) $T(\vec{r}, t)$ 가 연계되어

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

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

와 같이 나타난다^[5]. 여기서, c 는 빛(광자)의 속도, C_v 는 매질의 비열(specific heat), ν 는 광자의 진동수(frequency), \vec{r} 과 $\hat{\Omega}$ 는 각각 위치 및 방향변수를 나타낸다. 또한 $\sigma_s(\vec{r}, \nu)$ 와 $\sigma_a(\vec{r}, \nu)$ 는 산란(scattering)과 흡수(absorption) 상수이며 $\sigma(\vec{r}, \nu)$ 는 산란과 흡수를 포함한 소멸상수(extinction coefficient)이다. $\phi(\vec{r}, t, \nu)$ 는 방향으로 적분된 광자밀도(angle integrated photon intensity)로

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

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. 식(1)은 중성자 수송방정식과 유사한 형태로 광자의 방향밀도를 미지함수로 갖고, 시간과 위치에 대해 1계 편미분방정식으로 나타난다.

본 연구에서는 계산 편의상 1차원을 가정하고, 산란이 없는 순수 흡수($\sigma_s=0$, 즉, $\sigma_a=\sigma_s$)와 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 복사 열전달 방정식을 1차원 형태로 나타내면

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

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

이 된다. 여기서 $m=1, 2, \dots, M$ 은 차분화된 방향을 나타내는 지표이다.

2-2. 시간 차분(temporal differencing)

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

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

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

이 된다. 후진차분법에서는 미지함수의 시간 미분항이 시간단계(time step) $n+1$ 과 n 에서의 차이로 나타나고, 이를 제외한 나머지 모든 미지 함수는 시간단계 $n+1$ 에서의 값으로 표시됨에 주의해야 한다. 식(8)과 식(9)는

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

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

로 단순화 되는데, 여기서, $\Delta t = t^{n+1} - t^n$, $\bar{\sigma}_a = \sigma_a + 1/c\Delta t$, $\bar{C}_v = C_v/\Delta t$, $Q_m^n = \psi_m^n/c\Delta t$ 이다. 식(10)은 ψ_m^{n+1} 를 미지함수로 가지는 위치에 대한 1계 편미분방정식의 차분형태이고 식(11)은 T^{n+1} 에 관한 4차 대수방정식으로 그 형태가 비선형이다.

2-3. 위치 차분(spatial differencing)

위치 차분을 위해 격자(cell) 구조를 정수 표시 $x_i (i=1, 2, \dots, I)$ 는 각 격자의 중심(center)을 나타내고 반정수 표시 $x_{i+1/2}$ 는 각 격자의 끝점(vertex or edge)을 나타내도록 Fig. 1과 같이 정한다. 식(10)과 식(11)에서 물질의

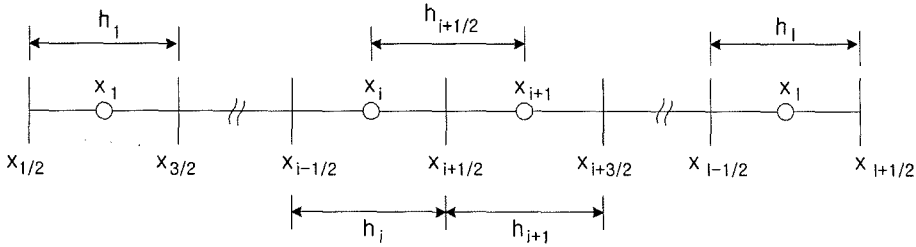


Fig. 1. Cell structure.

속성인 $\sigma_a, \bar{\sigma}_a, C_v, \bar{C}_v$ 등은 격자의 내부에서 일정한 값으로 정의되고 미지함수인 $\psi_m^{n+1}, \sigma^{n+1}$ 과 T^{n+1} 은 격자의 중앙과 끝점에서 모두 정의된다.

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

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

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

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

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 $\Psi_{m,i}^{n+1}$ 에 대해 풀면

$$\begin{aligned} \Psi_{m,i}^{n+1} &= \frac{\mu_m}{\bar{\sigma}_{a,i} h_i} (\Psi_{m,i+1/2}^{n+1} - \Psi_{m,i-1/2}^{n+1}) \\ &+ \frac{1}{\bar{\sigma}_{a,i}} [\sigma_{a,i} ac(T_i^{n+1})^4 + Q_{m,i}^n] \end{aligned} \quad (14)$$

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

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

이 된다. 식(15)는 2계 차체수반형 차분식으로 중성자 수송분야의 SAAF(Self-Adjoint Angular Flux) 중성자 수

송방정식에 해당하는 식으로 여기에서는 미지함수 ψ 가 중성자 방향속(neutron angular flux)이 아니고 광자의 방향밀도(photon angular intensity)이므로 SAAI(Self-Adjoint Angular Intensity) 수송방정식으로 부르기로 하겠다. 식(15)를 보면 격자 양단에 위치하는 시간단계 n+1에서의 방향 광자강도가 미지함수이고 이들이 격자 양단과 중앙에 위치한 시간단계 n+1에서의 온도 $T_i^{n+1}, T_{i+1/2}^{n+1}$ 과 시간단계 n에서의 방향 광자강도 $Q_{m,i}^n, Q_{m,i+1/2}^n$ 들에 의해 표시됨을 알 수 있다.

식(11)의 온도 방정식 또한 차분되어야 하는데 이는 대수 방정식으로 특별한 차분과정이 요구되지는 않고 다만 격자의 중앙과 양단에서 시간단계 n+1에서의 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)

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

을 Grey 근사 $B(T) = acT^4$ 와 함께 사용하면 격자 중앙과 격자 끝점에서 각각

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

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

이 된다. 여기서,

$$v_i^{n+1,l-1} = \frac{\sigma_{a,i} 4ac(T_i^{n+1,l-1})^3}{\bar{C}_{v,i} + \sigma_{a,i} 4ac(T_i^{n+1,l-1})^3}$$

$$v_{i+1/2}^{n+1,l-1} = \frac{\sigma_{a,i+1/2} 4ac(T_{i+1/2}^{n+1,l-1})^3}{\bar{C}_{v,i+1/2} + \sigma_{a,i+1/2} 4ac(T_{i+1/2}^{n+1,l-1})^3}$$

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

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

이다.

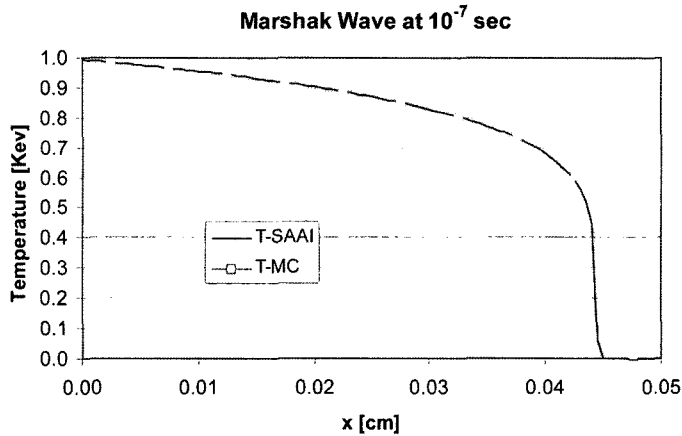


Fig. 2. Solution of Marshak wave problem.

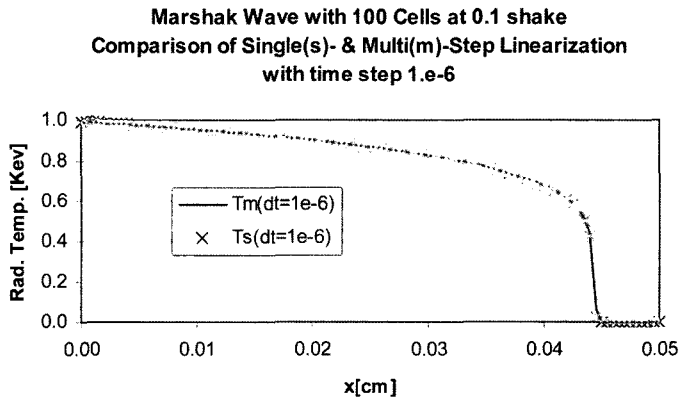


Fig. 3. Comparison of single and multi step linearization (1).

3. 수치결과

최종적으로 광자의 복사 열전달 현상은 각 시간 단계에서 식(14), 식(15)로부터 광자의 방향밀도를 구하고 식(17), 식(18)로부터 매질의 온도를 구하는 절차로 계산된다. 이러한 식들을 프로그래밍하여 Marshak wave 문제에 적용한 결과가 Fig. 2에 나타난다. Marshak wave 문제는 일정한 온도를 갖는 매질에 광자가 입사되었을 때 시간에 대한 매질의 온도변화를 계산하는 전형적인 복사 열전달 문제로, 여기에서는 0.001 Kev의 초기온도를 갖는 매질에 1 Kev의 에너지를 갖는 광자가 입사될 때의 온도변화를 계산하였다. 여기서 산란계수는 $0(\sigma_s=0)$ 이고 온도 중속 흡수계수로 $\sigma_a=300/T^3$ 을 적용하였으며 전체 격자수는 100, $\Delta t=1.25 \times 10^{-14}$ sec이다. Fig. 2는 광자 입사 후의 매질의 온도를 보이는데 기존의 Monte Carlo법(T-MC)과 본 연구의 결과(T-SAAI)를 비교하였다.

계산 시간이 시간 단위로 과도하게 소모되는 Monte-Carlo 법에 비해 계산 시간이 초단위로 적게 소모되는 S_N SAAI 법의 결과가 거의 동일하게 나타남을 알 수 있다.

Fig. 3에서 Fig. 5까지는 동일한 Marshak wave 문제에 대해 각각 다른 시간간격을 사용하였을 때의 일단계 선형화(single-step linearization)와 다단계 선형화(multi-step linearization)의 결과를 보여주고 있다. 여기서 m은 다단계 선형화, s는 일단계 선형화 계산을 나타내며 시간 단위 1 shake는 10^{-8} sec를 의미한다. 시간간격이 작을 때는 일단계 선형화의 결과와 다단계 선형화의 결과에 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 유리하다.

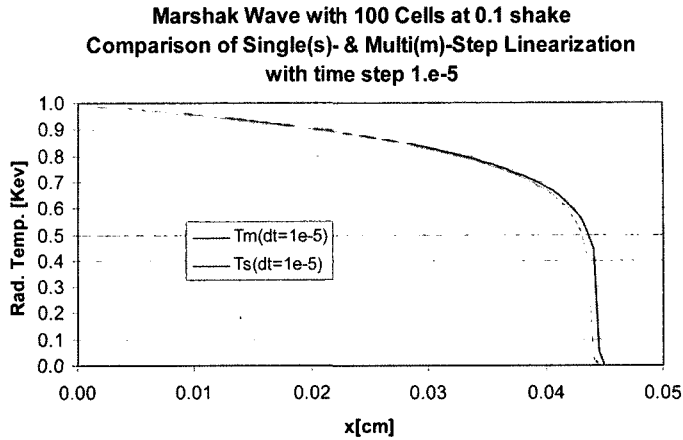


Fig. 4. Comparison of single and multi step linearization (2).

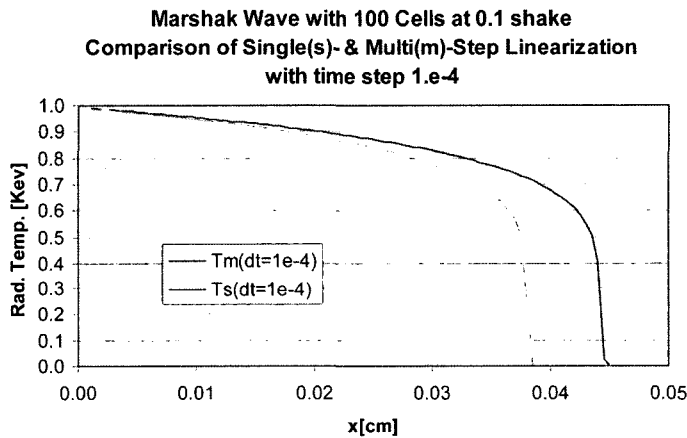


Fig. 5. Comparison of single and multi step linearization (3).

4. 결 론

기존 중성자 수송방정식의 해를 구하는데 광범위하게 사용되는 방향차분법(discrete ordinates method)을 복사 열전달 방정식에 적용하였고, 위치 변수 차분법으로는 1계 미분방정식으로부터 2계의 자체수반형(self-adjoint form) 차분식으로 나타나는 SAAI 방정식을 사용하여 해의 안정성을 높였다. 복사 열전달은 광자의 방향밀도(photon or radiation intensity)와 비선형인 물질의 온도(material temperature)에 대한 연립 편미분 방정식으로 나타나는데 이러한 온도의 비선형성을 해결하는 다단계 선형화 기법이 함께 소개되었다. 개발된 해법을 이용하여 실제 Marshak wave 문제를 풀어 기존 Monte Carlo 법에 의한 해와 함께 비교하여 제안된 방법론의 우수성

을 보였다. 본 연구는 중성자 수송이론에서 계산 효율성을 인정받은 방향차분법을 복사 열전달 계산에 적용함에 있어 주요 방법론 개발이 목적이며 방향차분법의 실효성을 보다 증가시킬 수 있는 가속법(acceleration method) 개발 등의 다양한 보조 연구가 추가적으로 이루어져야 한다. 특히 핵분열에 의해 고온이 생성되었을 때의 초기 열전달 메커니즘이 주로 복사에 의해 이루어짐을 감안한다면 이 분야 연구의 중요성을 인식할 수 있을 것이다.

감사의 글

본 연구는 2003년도 홍익대학교 교내연구비에 의하여 지원되었음.

참고문헌

1. Lewis, E.E.; Miller, Jr. W.F. Computational Methods of Neutron Transport, John Wiley & Sons, 1993.
2. Mihalas, D.; Weibel-Mihalas, B. Foundations of Radiation Hydrodynamics, Dover Publications, Inc., 1999.
3. Morel, J.E.; McGhee, J.M. "A Self-Adjoint Angular Flux Equation", Nuclear Science and Engineering, 1999, 132, 312-325.
4. Morel, J.E.; Wareing, T.A.; Smith, K. "A Linear-Discontinuous Spatial Differencing Scheme for S_N Radiative Transfer Calculations", Journal of Computational Physics, 1996, 128, 445-462.
5. Morel, J.E.; McGhee, J.M.; Adams, B.T.; Noh, T.; Evans, T.; Urbatsch, T. "Spatial Discretizations for Self-Adjoint Forms of the Radiative Transfer Equations", Journal of Computational Physics, 2006, 214, 12-40.