

HANARO에서의 불확실도 해석을 위한
Response Surface Method를 이용한 회귀모형 개발

Development of Regression Model for Uncertainty Analysis
by Response Surface Method in HANARO

조동건, 김명현

경희대학교
경기도 용인시 기흥읍 서천리

요 약

Fission Mo 생산에 대한 불확실도 해석을 위해 사용되는 MCNP/ORIGEN2 체계를 대체하기 위하여 반응표면기법(Response Surface Method)을 이용한 회귀모형을 개발하여 원자로심해석 모델에 대해 단순모델을 이용한 불확실도 해석 가능성을 검토하였다. 원자로심 모델에 대해서도 연소도 인자를 도입하면 회귀모형의 개발이 가능함을 확인하였으며, 회귀모형의 계수로부터 출력변수의 불확실도에 가장 크게 영향을 미치는 변수를 도출한 결과, 핵연료의 두께로 평가되어 각 입력변수에 대한 Crude Monte Carlo Method의 해석결과와 일치하였다. 또한 개발된 대체모형의 적합도를 평가한 결과, 결정계수 값이 0.99로 나타나 개발된 모형은 출력변수를 잘 설명하여 타당함을 확인하였다.

Abstract

The feasibility of uncertainty analysis with regression model in reactor physics problem was investigated. Regression model as a alternative model for a MCNP/ORIGEN2 code system which is uncertainty analysis tool of fission-produced molybdenum production was developed using Response Surface Method. It was shown that the development of regression model in the reactor physics problem was possible by introducing the burnup parameter. The most important parameter affecting the uncertainty of ^{99}Mo yield ratio was fuel thickness in the regression model. This results agree well with those of Crude Monte Carlo Method for each parameter. The regression model developed in this research was shown to be suitable as a alternative model, because coefficient of determination was 0.99.

1. 서론

Fission Mo 생산에 대한 불확실도 해석을 위해서는 원자로심 전체를 대상으로 해석해야 하므로 통계처리를 위한 반복 계산 시 매우 많은 시간이 소요된다. 특히, Fission Mo 표적과 같이 연구용 원자로의 조사물과 관련한 문제는 전산체계로서 MCNP와 같은 몬테카를로 방법을 사용하는 전산코드의 적용이 필수적이므로 이런 문제에 대해 '컴퓨터모델(computer model)'을 그대로 적용하여 불확실도 해석을 수행하면 상당한 시간이 소요된다. 이러한 문제는 몬테카를로 방법론을 해석 전산체계로서 사용하는 경우 뿐 아니라, RELAP 코드를 이용한 시스템 해석과 같이 계산시간이 오래 걸리는 문제에서는 항상 직면하게 된다.

불확실도 해석 방법론의 일종인 Monte Carlo Method는 각각의 입력변수의 분포로부터 임의의 표본추출(random sampling)을 수행하고 이를 모두 조합하여 입력변수의 셀(set)을 구성한 후, 이를 '컴퓨터모델(computer model)'에 적용하여 출력변수의 셀(set)을 구하는 방법을 반복적으로 수행함으로써 출력변수의 분포를 구한다. 이 방법론은 '컴퓨터모델(computer model)'을 대신하는 근사모델 없이 불확실도 해석을 수행할 수 있으므로 적용이 매우 쉽다는 장점이 있으나, 출력변수의 불확실도가 정량적으로 산출되었을 때 불확실도가 어느 입력변수로부터 기인했는지 알 수가 없다. 따라서 불확실도 분포가 산출되었다 할지라도 공정관리(quality control) 측면에서 불확실도를 줄이 기위한 방안을 세우기 위해서는 각각의 입력변수에 대한 불확실도 해석을 독립적으로 수행하여 입력변수의 출력변수에 대한 영향도 및 중요도를 산출해야 하는 단점이 있다. 또한, 한 개의 입력변수의 분포가 바뀌게 되면 불확실도 해석을 처음부터 새로이 수행해야 하는 단점이 있다. 이와 같은 Monte Carlo Method의 단점을 보완하고자 입력 값의 함수로서 출력 값의 변화를 나타내는 회귀모형을 개발하고 이를 복잡한 '컴퓨터모델'의 대체모델로서 적용하여 불확실도 해석을 수행하는 'Response Surface Method'가 제기되고 있다[1,2]. 그러나, 이 모델이 Fission Mo 표적과 관련한 불확실도 해석과 같이 원자로심모델(reactor physics model)에 적용된 예가 없어 원자로심모델에 이를 적용할 경우 문제가 야기될 수도 있다.

따라서, 본 논문에서는 Fission Mo 생산에 대한 불확실도 해석을 위해 사용되는 복잡한 MCNP/ORIGEN2 체계를 대체하는 회귀모형(regression model)의 개발 가능성을 검토해 보고, 이를 바탕으로 반응표면기법(Response Surface Method)[3]를 이용한 회귀모형을 개발하여 단순모델을 이용한 불확실도 해석의 가능 여부를 검토하고자 하였다.

2. Response Surface Methodology

Fission Mo 표적에 대한 불확실도 해석시 임의의 한 경우에 대한 계산시간은 분산 감소 기법을 적용함에도 불구하고 약 4시간 정도가 소요된다. 이는 본 연구만이 아니라 시스템해석의 경우 수 시간의 계산 시간이 걸리는 경우가 많다. 이런 경우에 Monte Carlo Method의 적용은 시간의 제약을 많이 받는다.

불확실도 해석 방법론의 일종인 'Response Surface Method'는 몬테카를로 방법론이 갖는 단점을 극복하기 위해 고안된 방안으로서 매우 복잡한 'Computer Model'의 출력변수 평가 함수인 식 (3.1)를 'Response Surface'라 불리는 근사모델인 식 (3.2)와 같이 바꾼다.

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_k) \quad (3.1)$$

식 (3.1)에서 Y는 입력변수 셀에 대한 출력변수 값을 나타내며, X_1, X_2, \dots, X_k 는 수치적 컴

퓨터 모델(computer model)에 대한 각각의 입력변수 값을 나타낸다.

$$\bar{Y} = R(X_1, X_2, \dots, X_k) \quad (3.2)$$

식 (3.2)에서 함수 \bar{Y} 는 근사모델에 의해 평가되는 'response'가 된다.

대부분의 경우 함수 R 은 일차식의 선형 조합에 의해 구성되며, 함수 R 을 이루고 있는 각각의 계수들은 최소제곱법에 의해 결정된다.

선형조합에 의한 선형 반응 표면(linear response surface)은 cross term을 고려할 경우, 식 (3.3)과 같이 나타낸다.

$$\bar{Y} = a_0 + \sum_{j=1}^k a_j X_j + \sum_{j=1}^k \sum_{i=j+1}^k a_{ji} X_j X_i \quad (3.3)$$

그러나, 미국의 Nuclear Regulatory Commission에서는 전체 노심의 경수로에 대한 RELAP4 모델 적용시 불확실도를 평가하기 위해 RELAP4 모델의 결과치 거동을 살펴본 결과, 입력 변수 셀(set)에 대한 출력변수의 거동은 선형이 아닌 비 선형인 것으로 나타났다. 이와 같이, 예측모델인 반응 표면이 선형적 거동을 갖지 않을 때는 즉, 반응표면이 일차식으로 구성될 수 없을 때에는 식 (3.4)과 같이 이차항을 포함하여 이차 다항식의 반응 표면식을 구성한다.

$$\bar{Y} = a_0 + \sum_{j=1}^k a_j X_j + \sum_{j=1}^k \sum_{i=j+1}^k a_{ji} X_j X_i + \sum_{j=1}^k a_{jj} X_j^2 \quad (3.4)$$

식 (3.3) 및 (3.4)에서 $X_i = \frac{x_i - x_i^0}{\Delta x_i}$: 정규화된 값, x_i = 실제값, x_i^0 = 표준(평균)값, Δx_i 표준편차를 나타낸다. 또한, \bar{Y} 는 'response surface equation'에 의한 출력변수의 예측치이며, a_0, a_j, a_{ji}, a_{jj} 최소제곱법에 의해 산출된 계수 값을 나타낸다. 이 계수 값은 식 (3.5)를 만족하도록 산출되며, 식 (3.5)에서 Y_i 는 식 (3.2)에 의해 산출된 i 번째 입력변수 셀(set)에 의해 산출된 출력변수 값을 의미한다.

$$\sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y}_i)^2 = \min. \quad (3.5)$$

이 방법론의 특징은 반응 표면식(response surface equation)의 계수 값이 출력변수에 대한 불확실도의 민감도계수가 된다는 것이다. 즉, 산출된 반응표면식에서 입력변수 X_i 에 대한 계수 a_i 의 계수 값이 크면 클수록 출력변수의 불확실도에 미치는 영향도가 크다는 것이다. 따라서, 반응 표면식만 보면 각 입력변수에 대한 불확실도 해석을 따로 수행하지 않더라도 불확실도가 어느 입력변수에서 가장 크게 유발되었는지를 알 수 있다. 또한, 입력변수의 분포가 바뀌었을 경우 이 모델에 변화된 입력변수 분포만을 적용하면 되므로 입력변수의 분포가 바뀌었을 경우 처음부터 불확실도 해석을 다시 수행해야하는 Monte Carlo Method의 단점을 극복하기에 충분하다.

3. 불확실도 평가를 위한 표적 설계안 및 입력변수 분포 산정

본 논문에서 개발하고자 하는 회귀모형의 불확실도 해석 대상은 LEU 표적 설계안이며, 이 설계안은 본 학회에서 동시에 발표되는 논문에 상세히 기재[4]되어 있으므로 본 논문에서는 생략하기로 한다. 본 연구에서의 불확실도 해석이란 입력변수의 변화에 의한 출력변수의 변화 정도를 평가하는 것인데, 여기서 입력변수란 표적 기하학적 공차, 원자로 조건, 표적 원료 물질 공차, 화학처리 공차 등을 의미하며, 출력변수란 이들의 변화에 의한 Mo-99 생성수율(Ci ⁹⁹Mo/gU)을 의미한다.

각 입력변수의 선정 및 분포 또한, 본 학회에서 동시에 발표되는 논문에 상세히 기재[4]되어 있으므로 여기서는 간략히 설명하고자 한다. 우선 고려된 입력변수에 대해 언급하면 로물리 변수로서 WIMS/VENTURE의 출력분포, 표적내 핵분열성 물질의 감쇄, 원자로 출력준위 등이며, 표적의 기하학적 공차로는 표적연료의 두께 및 길이변화 등이다. 표적에 사용되는 물질의 조성비 편차로는 표적 연료의 농축도이다.

로물리변수중의 WIMS/VENTURE의 출력분포는 MCNP 코드에서 중성자 선원 발생시 WIMS/VENTURE 계산 값의 불확실성으로 인해 식 (3.7)에서 P_i 값에 오차가 존재할 수 있으므로 고려되는 입력변수이며, 원자로 출력준위는 원자로 운전조건을 30MWt로 정확히 맞추지 못하는 데서 기인하는 입력변수이며, 표적의 기하학적 공차는 표적을 설계안의 제원대로 정확히 만들지 못하는 데서 기인하는 입력변수이며, 표적 물질의 조성비 편차는 표적 연료의 농축도를 정확히 표적 설계안대로 만들지 못함으로써 고려해야할 불확실도 대상 입력변수이다. 이 입력변수는 민감도 분석에 의해 타당하게 선별된 변수들이다[4].

$$S_{ig} = \chi_{ig} C_i P_i \tag{3.6}$$

$$= \chi_{ig} (\nu/E_r) P_i$$

여기서, i = fuel pin index,

g = certain energy interval index,

χ_{ig} = fission source spectrum,

P_i = node power,

$C_i(\nu/E_r)$ = power-to-source conversion factor, C factor,

E_r = recoverable energy를 나타낸다.

식 (3.6)의 P_i 의 불확실성에 의한 불확실도 평가를 위한 입력변수 분포는 **하나로 안전성 분석보고서**의 자료로부터 **하나로**의 노심설계 전산코드로 계산한 핵연료집합체의 출력인자는 약 4.5%(1 σ)의 불확실도를 적용하였으며, 출력인자의 분포는 정규분포를 갖는다고 가정하였다. 표 1 및 2에는 기하학적 공차 및 표적 연료에 대한 입력변수 분포가 기재되어 있다. 이들의 분포는 실제 데이터를 근거로 산출되었으며, 정보이론에 의거한 최대엔트로피법칙(maximum entropy principle)으로부터 불확실도 분포를 보수적으로 평가하도록 만드는 균일분포(uniform distribution)를 가정하였다.

표 1 기하학적 공차를 갖는 입력변수 분포

		LEU		
		Min.	Max.	Median
Fuel	Thickness(μ m)	80	120	100
	Axial Length(cm)	9.5	10.5	10
분 포		균일 분포		

표 2 표적 연료의 물질 구성비 입력변수 분포

Material	Concentration[w/o]					
	U-235			U-238		
	Min.	Max.	Median	Min.	Max.	Median
HEU	92.75	93.25	93.0	8.75	9.25	9.0
분 포	균일 분포			균일 분포		

4. Response Surface Method를 이용한 회귀모형 개발

4.1 Crude Monte Carlo Method

앞서 언급된 입력변수를 대상으로 Response Surface Method의 비교값을 산출하기 위해 Crude Monte Carlo Method를 이용해 출력변수에 대한 불확실도 정량적 평가를 수행하였다. 이 방법은 그림 1에서 보는 바와 같이 각각의 입력변수에 대해 구간의 나눔이 없이 임의대로 임의추출(random sampling)하여 입력변수 셀(set)을 구성하고 이를 복잡한 수치적 모델에 직접 적용함으로써 출력변수의 분포를 구한다. 이 방법은 수많은 회수를 반복하면 비교적 정확한 출력변수의 분포를 얻을 수 있는 장점이 있으므로 검증계산 시 참값으로 사용되기도 한다.

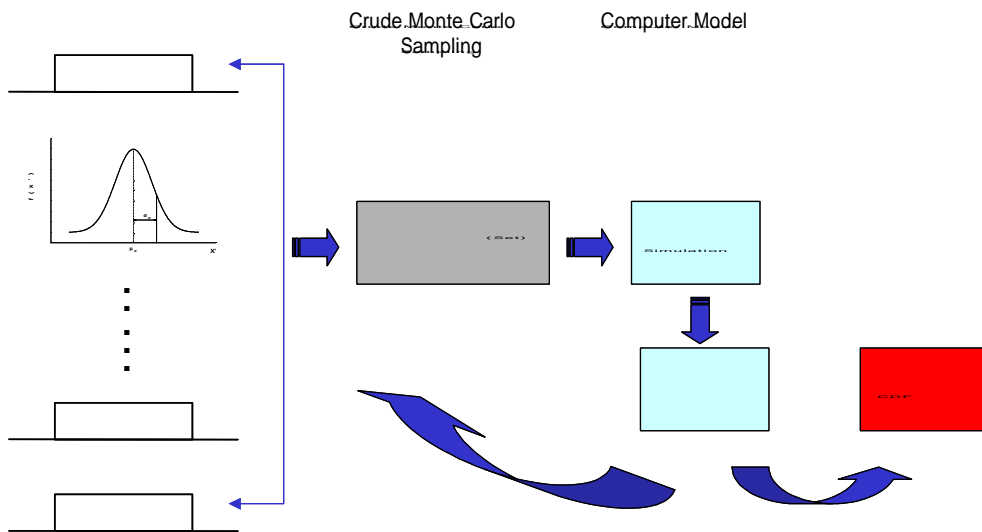


그림 1 Crude Monte Carlo Method

본 논문에서 입력변수 셀 구성시 WIMS/VENTURE의 첨두 출력치의 표본추출은 표 3의 Permission/Rejection Method를 사용하였다. 이 방법은 각각의 집합체 출력인자가 1σ 수준에서 4.5%의 불확실도를 지니고 있으므로 이 분포로부터 각 집합체의 첨두 출력치 값을 산출한 후 이를 각 집합체에 적용하여 선출력 밀도를 노심 평균 선출력 밀도로 만드는 분포만을 허용(permission)하여 입력변수 셀에 적용하는 것이다. 이 이론에 의하면 표 3에서 Case 2는 허용되지 않 Case 1 및 3는 거절(rejection)된다.

이와 같은 방법을 통해 입력변수에 의한 출력변수 값이 산출되면, 각 입력변수는 통계적 오차

를 갖는다. 각 출력변수의 신뢰구간은 통계적 오차를 가중하여 식 (3.7)에 의해 처리하였다.

$$\bar{C} - T_{95,95} S_c \leq X \leq \bar{C} + T_{95,95} S_c \quad (3.7)$$

$$\text{여기서, } \bar{C} = \frac{\sum_{i=0}^n \frac{C_i}{S_{C_i}^2}}{\sum_{i=0}^n \frac{1}{S_{C_i}^2}}, \quad S_c = \frac{n}{n-1} \left(\frac{\sum_{i=0}^n \left(\frac{C_i}{S_{C_i}} \right)^2}{\sum_{i=0}^n \frac{1}{S_{C_i}^2}} - \bar{C}^2 \right)^{1/2}$$

$T_{95,95}$ 는 Two-Sided Tolerance Limit Factor[5]를 나타낸다.

표 3 Permission/Rejection Sampling Chart

Variable Sampling Set	X ₁	X ₂	X ₃	~	X _k	$\frac{1}{k} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^k X_{ij}$
#1	X ₁₁	X ₂₁	X ₃₁	-	X _{kn}	$1.015 \times \bar{P}$
#2	X ₁₂	X ₂₂	X ₃₂	-	X _{k4}	$1.000 \times \bar{P}$
#3	X ₁₃	X ₂₃	X ₃₃	-	X _{k3}	$0.998 \times \bar{P}$
~	-	-	-	-	-	~
#n	X _{1n}	X _{2n}	X _{3n}	-	X _{k2}	$0.996 \times \bar{P}$

Crude Monte Carlo Method가 각 입력변수에 대한 불확실도의 중요도를 산출할 수 없으므로 총 불확실도 산출에 앞서 각 인자에 대한 불확실도 해석을 수행하였다.

LEU 및 HEU 표적에 대해 각 입력변수에 대한 불확실도 해석으로부터 얻어진 결과를 언급하면, Mo-99 생성수율의 불확실도 근원이 대부분 표적 연료 두께인 것으로 나타났다. 표 4에는 HEU 및 LEU에 대한 모든 입력변수에 의한 불확실도 평가 결과가 기재되어 있는데, Mo-99의 수율의 95% 신뢰구간은 6.15~7.78(Ci⁹⁹Mo/gU)으로 평가되었다.

표 4 모든 입력변수에 의한 불확실도 해석 결과

표적	출력변수	평균	표준편차	2.5% 값	97.5% 값	Relative Error (2σ level, %)
LEU	¹⁴⁹ Mo-99 (Ci/gU)	6.9661	0.3413	6.1531	7.7790	9.79

^c: 화학처리시점의 출력변수 산출치

4.2 반응표면법을 이용한 단순모형 개발

앞의 Crude Monte Carlo Method 계산에 사용된 50개의 입·출력변수 셀을 대상으로 대체모델로서 반응표면식의 적용 가능성을 평가하였다. 평가는 cross term이 없는 1차 회귀식, cross term이 있는 1차 회귀식, 2차 회귀식을 대상으로 회귀모델을 개발하고자 하였다.

이 연구에서 얻어진 결과는 1차 회귀식으로는 반응표면식을 구성할 수 없었으며, 2차 식을 이

용한 결과, 반응 표면식의 구성이 가능함을 구성하였다. 단, 반응 표면식 구성에 있어서 원자로의 연소도가 변함에 따른 제어봉의 움직임에 발생하게 되고, 이에 의한 중성자속 변화를 고려하는 인자(parameter)를 반드시 추가해야만 함을 확인하였다.

제어봉 위치 변화에 의한 출력변수의 변화를 고려하는 인자의 값은 다음과 같은 방법으로 적용하였다. 우선 각 원자로 시점에 대해 P_i 에 의한 출력변수의 변화를 산출하고 이에 대한 평균과 표준편차를 산출한 후 각 원자로 연소시점에 대해 식 (3.8)을 이용하여 X_i 값을 산출한 후 이를 연소도 인자 값으로 적용하였다.

$$X_i = \frac{x_{burnup}^i - x_{cycle}^0}{\Delta x_{cycle}} \quad (3.8)$$

따라서, 원자로모델에 대해 회귀모형을 개발하기 위해서는 기존의 반응표면(Response Surface Method) 방법만으로는 회귀모형을 개발할 수 없으며, 그림 2에서 보는 바와 같이 연소도 인자를 산출하기 위한 표본의 구성 및 해석의 단계가 추가되어야 함을 알 수 있었다.

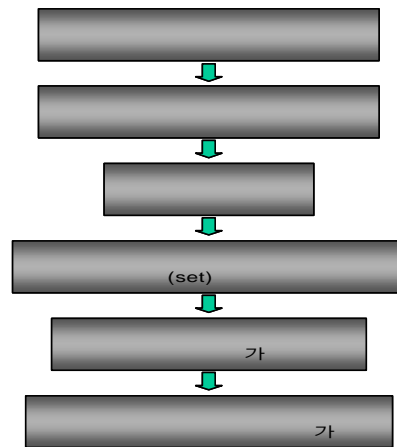


그림 2 원자로모델의 회귀모형 개발 절차

이와 같은 방법을 통해 산출된 Mo-99의 생성량을 나타내는 회귀모형(regression model)은 (3.9)와 같다. 각 입력변수에 대한 수학적 기호는 표 5에 기재되어 있다. 산출된 2차 회귀식의 적합도를 나타내는 결정계수(R^2 : coefficient of determination)의 값은 0.99로서 반응표면식은 출력변수의 값을 잘 나타내주고 있다. 평가된 반응 표면식을 분석해 보면, Mo-99의 생성수율의 불확실도에 가장 영향을 많이 미치는 변수는, 즉 반응 표면식에서 민감도 계수 값이 가장 큰 변수는 표적 연료두께(X_4)로서 앞서 Crude Monte Carlo Method에서 산출된 경향과 같은 결과를 나타내 반응 표면식은 적절하게 산출되었음을 알 수 있다.

$$\begin{aligned} \bar{Y} = & 7.127 + 0.083X_2 + 0.050X_3 - 0.357X_4 - 0.073X_5 + 0.158X_7 + 0.169X_8 - 0.057X_1^2 - 0.091X_1X_3 \\ & - 0.046X_1X_4 - 0.044X_1X_5 - 0.063X_1X_6 - 0.064X_1X_8 - 0.060X_2X_4 - 0.039X_2X_5 + 0.063X_2X_7 \\ & + 0.068X_3X_4 + 0.094X_3X_7 + 0.067X_4X_5 - 0.053X_4X_6 - 0.049X_4X_7 - 0.052X_4X_8 - 0.051X_5X_6 \\ & - 0.080X_5X_7 - 0.055X_7X_8 - 0.071X_8^2 \end{aligned} \quad (3.9)$$

표 5 평가된 입력변수 인자

입력변수 인자		
R01 집합체 출력인자(X_1) R31 집합체 출력인자(X_2) 원자로출력준위(X_3) 연소도 인자(X_8) 핵연료의 소모(X_7)	표적의 두께(X_4) 표적의 길이(X_5)	농축도(X_6)

따라서, 원자로심 모델에 대해서도 반응 표면식의 적용이 가능함을 확인하였으며, 개발된 식은 불확실도 해석시 컴퓨터 대체 모델로 적용될 수 있다. 그러나, 앞서 선행된 Crude Monte Carlo Method에서의 표본의 수가 적어 참값으로 인정하기가 어렵다. 따라서, Crude Monte Carlo Method에 표본의 수를 늘여 참값을 산출하고 이를 반응표면식과 비교함으로써 노심모델에의 회귀모형의 적용 가능성을 정밀히 판단하여야 할 것이다.

5. 결론

Fission Mo 생산에 대한 불확실도 해석을 위해 사용되는 MCNP/ORIGEN2 체계를 대체하기 위하여 회귀모형(regression model)의 개발 가능성을 검토하고, 반응표면기법(Response Surface Method)을 이용한 회귀모형을 개발하여 노심해석 모델에 대해 단순모델을 이용한 불확실도 해석의 가능성을 검토하였다. 우선 회귀모형의 검증을 위해 Crude Monte Carlo Method를 이용하여 ^{99}Mo 생성수율의 불확실도 분포를 구한 결과, ^{99}Mo 의 불확실도에 가장 영향을 미치는 변수는 표적 연료두께인 것으로 나타났다. '컴퓨터모델'의 대체모델로서 회귀모형 개발 연구를 수행한 결과, 원자로심 모델에 대해서도 연소도 인자를 도입하면 회귀모형의 개발이 가능함을 확인하였으며, 회귀모형의 계수로부터 출력변수의 불확실도에 가장 크게 영향을 미치는 변수를 도출한 결과, 연료두께로 나타나 각 입력변수에 대한 Crude Monte Carlo Method의 해석결과와 일치하였다. 또한 개발된 대체모형의 적합도를 평가한 결과, 결정계수 값이 0.99로 나타나 개발된 모형은 출력변수를 잘 설명하여 매우 타당함을 확인하였다. 그러나, 참값으로 비교된 Crude Monte Carlo Method의 해석 결과가 표본수가 적은 상태에서 산출되었으므로 이를 늘여 해석함으로써 노심모델에 단순 모형을 이용한 불확실도해석이 가능한 지를 정밀히 판단하여야 할 것이다.

Acknowledgements

본 연구는 '2002년도 한국원자력연구소 위탁연구과제'로 수행되었음을 밝히며, 자료를 제공해주신 박진호 박사님과 이 병철 과제책임자님의 도움에 깊은 감사를 드립니다.

REFERENCE

1. Moon-Hyun Chun, et al, "A Combined Procedure of RSM and LHS for Uncertainty Analyses in Source Term Quantifications Using MAAP3.0B," *Ann. Nucl. Energy*, Vol. 23, pp. 1337-1349, 1996.
2. Neil D. Cox, "Comparison of Two Uncertainty Analysis," *Nucl. Sci. Eng.*, Vol. 64, pp. 258-265, 1977.
3. Reymond H. Myers, et al, "Response Surface Methodology," John Wiley & Sons, Inc, 1995.
4. 조동건 외, "HANARO에서의 Fission Mo 생산에 대한 불확실도 해석," 2002 춘계학술발표회논문집, 2002.
5. Robert E. Odeh, "Tables for Normal Tolerance Limits, Sampling Plans, and Screening," Marcel Dekker, Inc, 1980.