

복잡한 시뮬레이션에서 입력 파라미터의 통계적 추정 문제*

박정수¹⁾

요약

시뮬레이션 실행 시간이 매우 오래 걸려서 보통 이용하는 비선형최소제곱법으로는 시뮬레이션의 입력 파라미터(또는 절대 상수)를 추정하기 힘든 경우의 추정 문제를 통계적인 메타모델을 이용하여 해결하는 방법에 대하여 기술하였다. 미리 답을 알고 있는 장난감 모형을 이용하여 절대 상수를 추정하기 위해 사용되는 세가지 통계적 메타모델들(전통적 회귀모형, 공간적 선형모형 그리고 projection pursuit 회귀모형)의 성능을 비교하였다. 그 결과 일양 크리깅(universal Kriging)에 의한 공간적 모형이 가장 우수하였고, 이를 실제 핵융합 시뮬레이션 자료에 적용하여 절대 상수를 추정하였다.

1. 배경 및 동기

오늘날 고성능 컴퓨터의 발달과 더불어 많은 과학적인 연구에서 컴퓨터 시뮬레이션 프로그램을 이용하고 있다. 그 이유는 실제의 '물리적 실험'이 예를 들어 핵반응 실험처럼 위험하고 비용이 많이 들거나, 또는 기상변화의 모델링처럼 매우 어려운 경우가 많기 때문이다. 이러한 종류의 시뮬레이션 프로그램은 입력으로 사용되는 변수 수가 매우 많고 그 수행시간이 상당히 오래 걸리는 경우가 대부분이다.

이러한 시뮬레이션 프로그램이 과연 실제 현상을 정말 잘 기술하고 있는지 그 타당도를 검사하기 위하여 보통 실제 관측된 자료와 시뮬레이션 출력을 비교한다. 이 비교를 위해서 시뮬레이션의 입력 변수 값과 실제 실험 인자의 수준을 같게하여 비교하는데, 실제 실험에는 제어할 수 없는 인자이나 시뮬레이션에서는 제어할 수 있는 입력 변수가 있다. 이러한 입력 변수를 입력 파라미터라고 부르는데, 이 입력 파라미터는 대부분 시뮬레이션에 사용되는 수학적 모형의 절대 상수들이다. 이것은 실제 자료 또는 시뮬레이션 자료 어느 하나 만으로는 추정하기 힘들며, 두 자료를 잘 비교하여 그 오차가 최소가 되도록 하는 점에서 추정이 가능할 것이다.

본 연구는 핵융합 장치(tokamak)의 시뮬레이션 모델(Baldur라고 불림)에서의 입력 파라미터의 추정 문제로부터 시작되었다. Baldur 내에는 핵 물리학의 이론으로부터 형성되는 4개의 모르는 절대 상수가 들어 있는데, 이 시뮬레이션 프로그램이 가장 타당한 형태로 되기 위해서는 이들 상수들을 잘 결정해 주어야 한다. 실제 실험의 자료가 있지만(74개의 자료 수) 그 자료 만으로는 상수들을 제대로 추정할 수 없다고 한다(Singer, et.al., 1988).

* 본 연구는 SERI 슈퍼컴퓨터센터를 통해 1997년도 CRAY R&D Grant 프로그램의 재정적인 지원을 받아 수행되었다(과제번호:971-0100-001-2).

1) (500-757) 광주광역시 북구 용봉동 300, 전남대학교 기초과학연구소 및 자연과학대학 통계학과, 교수

원칙적으로 절대상수의 추정은 비선형 최소제곱법으로 해결할 수 있다. 즉, $Y(x)$ 를 시뮬레이션의 출력이라고 하고 $z(x)$ 를 실제 실험 자료라고 하고, 실험 자료의 수를 $m(=74)$ 이라고 하면,

$$RSS = \sum_{i=1}^m (z(x_i) - Y(c^*, x_i))^2 \quad (1.1)$$

를 최소로 하는 c^* 를 선택함으로써 가능하다. 그런데 문제는 이 Baldur가 한 번 실행되는데 슈퍼컴퓨터에서 CPU 시간만 약 5분 정도 걸린다고 한다. 따라서 Baldur를 충분히 많이 실행시킬 수 없는 제한점을 가지게 되고 이 점 때문에, 수치적인 비선형 최적화 기법에 의한 (1.1)의 최소화는 시간상의 문제가 생기며, 따라서 절대 상수의 추정이 현실적으로 어려워진다.

그래서 시간이 오래 걸리는 시뮬레이션을 잘 근사하면서도 짧은 시간에 실행되는 에뮬레이터가 필요하게 된다. 이를 시뮬레이션 메타모델(simulation metamodel) 이라고 부르는데, 통계적 모형으로는 전통적인 회귀모형이 사용되어 왔다(Friedman, 1995). 따라서 잘 선택된 실험점들에서 얻은 자료를 바탕으로 통계적 메타모델을 세우고 이를 원 시뮬레이션 프로그램 대신으로 사용하여, 실제 자료에 대한 최소자승법을 이용하여 절대 상수를 추정할 수 있다. 즉, 우리의 새로운 c^* 추정의 기준은, $\hat{Y}(x)$ 를 메타모델에 의한 $Y(x)$ 의 예측치라고 할 때,

$$RSS_p = \sum_{i=1}^m (z(x_i) - \hat{Y}(c^*, x_i))^2 \quad (1.2)$$

를 최소로 하는 것이다. 여기서 \hat{Y} 는 (1.1) 에서의 Y 와 달리 매우 빠른 시간에 구해지는 값이므로 (1.1)이 갖는 시간상 어려움을 극복하게 된다.

이와 유사한 문제들이 Miller and Franklach (1983)에 의해서 연구되었는데, 그들은 반응표면 실험계획과 전통적인 회귀모형을 이용하였다. 본 연구에서는 메타모델로서 공간적 모형을 이용하는데, 절대 상수를 추정함에 있어 공간적 모형(특히 일양 크리깅)의 이용이 전통적 회귀모형 또는 최근의 비모수적 회귀모형의 이용보다 더 좋다는 것을, 미리 답을 알고 있는 장난감 모형을 이용한 실험을 통하여, 예시하였다. 또한 메타모델로서 일양 크리깅 모형을 실제 핵융합 시뮬레이션 자료에 적용하여 절대 상수를 통계적으로 추정하였다.

2. 시뮬레이션 메타모델

본 연구에서 시뮬레이션 메타모델로는 전통적 회귀모형, 공간적 (spatial) 모형 그리고 projection pursuit 회귀모형 세가지를 사용하였다. 메타모델의 수립은 시뮬레이션 출력 자료에 대해서 통계적 모형을 수립함으로써 세워진다. 이 출력 자료의 수집을 위한 실험계획법 또한 중요한데, 대개 라틴하이퍼큐브 (Latin-hypercube) 실험계획이나 이용될 메타모델의 형태를 감안한 최적계획이 사용된다. 구체적 내용은 Sacks, Welch, Mitchell and Wynn(1989) 및 심정욱, 박정수, 배중성(1994)을 참고하기 바란다.

먼저 전통적 회귀모형은 모든 1차 항, 2차 항과 교호작용 항까지를 고려한 모형들 중에서 C_p 를 이용하여 최적 모형을 선택하여, 이를 메타모델로 사용하였다.

본 논문에서 메타모델로서 사용될 공간적 모형으로는 Sacks, Welch, Mitchell and Wynn (1989)에 의해서 전산 실험에 적용된 다음과 같은 모형이다.

$$Y(x) = \sum_{j=1}^k \beta_j f_j(x) + Z(x) + e. \quad (2.1)$$

여기서 $Z(x)$ 는 평균이 0 이고, 두 개의 입력값 $\mathbf{t} = (t_1, t_2, \dots, t_d)$ 와 $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_d)$ 사이의 공분산이

$$R(\mathbf{t}, \mathbf{u}) = \sigma_Z^2 \exp\{-\theta \sum_{j=1}^d |t_j - u_j|^2\}, \theta > 0 \quad (2.2)$$

인 가우시안 확률과정이다. 또한 e 는 $Z(x)$ 와 독립이며, 평균이 0 이고 분산이 σ_e^2 인 정규 분포를 따르는 오차 항이다.

이 모형의 장점은 σ_e^2 이 0 이면 이 모형이 출력 자료 Y 를 내삽(interpolate)하고, σ_e^2 가 양수이면 이 모형이 출력 자료 Y 를 완만하게 회귀한다는 점이다. 따라서 관측 오차가 없는 전산 실험의 자료 뿐만 아니라 관측 오차를 가지는 경우에도 유용하게 사용될 수 있다. 모형 (2.1)을 이용하여 실행되지 않은 입력 공간에서의 Y 를 예측하는 방법을 일양 크리깅(universal Kriging) 이라고 부른다. 한편 모형 (2.1)의 선형모형 항에서 β_0 만을 이용하여 예측하는 방법을 보통 크리깅(ordinary Kriging) 이라고 하는데, 본 논문에서는 보통 크리깅과 일양 크리깅 모두를 고려하였다.

모형에 쓰이는 모수들은 시뮬레이션 자료로부터 최우추정법에 의해서 추정되고, 크리깅에는 이 추정된 모수가 이용된다. 먼저 n 을 시뮬레이션 실험 자료의 수라고 하자. 일단 추정된 모수를 이용하여 $Y(x)$ 를 예측하기 위하여 다음과 같은 $n \times n$ 행렬 V 를 정의한다.

$$V = [R(s_i, s_j)]_{\substack{1 \leq i \leq n \\ 1 \leq j \leq n}} + \gamma^2 I. \quad (2.3)$$

여기서 $\gamma^2 = \sigma_Z^2/\sigma_e^2$ 이고 (s_1, \dots, s_n) 는 실험점 들이다. 예측점 x 에 대하여, $n \times 1$ 벡터 \underline{v}_x 와 $k \times 1$ 벡터 \underline{f}_x 를 다음과 같이 잡아 주자.

$$\underline{v}'_x = [R(s_1, x), \dots, R(s_n, x)], \underline{f}'_x = [f_1(x), \dots, f_k(x)].$$

그러면 $Y(x)$ 의 최적 선형불편 예측(BLUP)은 관측치 \underline{y} 를 이용하여 (Ripley, 1981, pp. 44-58)

$$\begin{aligned} \hat{Y}(x) &= [\underline{v}'_x, \underline{f}'_x] \begin{bmatrix} V & F \\ F' & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \underline{y} \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \underline{f}'_x \hat{\beta} + \underline{v}'_x V^{-1}(\underline{y} - F \hat{\beta}) \end{aligned} \quad (2.4)$$

이다. 여기서 $n \times k$ 행렬 F 는 계획행렬이며 $\hat{\beta} = (F'V^{-1}F)^{-1}F'V^{-1}\underline{y}$ 는 β 의 일반화 최소자승 추정치이다. 모형 (2.1) 및 크리깅 (2.4)의 구체적 성질과 전산실험의 계획 및 분석에로의 적용 등에 대해서는 심정욱, 박정수, 배종성(1994) 및 Cressie(1991)에 자세히 기술되어 있으므로 거기를 참고하기 바란다.

시뮬레이션 메타모델로서 전통적 회귀모형과 공간적 모형 외에 비모수적 회귀모형을 사용할 수 있다. 본 논문에서는 그 중에서 projection pursuit 회귀모형(ppreg)을 이용하였다. 컴퓨터를 집중적으로 사용하는 비모수적 회귀분석 방법인 ppreg 는

$$Y(\mathbf{x}) \approx \bar{Y} + \sum_{j=1}^M \beta_j \phi_j(\mathbf{a}_j^t \mathbf{x}) \quad (2.5)$$

을 만족하는 회귀계수 β_j , 비선형 변환 함수 ϕ_j 과 방향 벡터인 \mathbf{a}_j 를 찾아준다. 실제로 (2.5)에서의 모수들 β_j , ϕ_j , \mathbf{a}_j , $j = 1, 2, \dots, M$ 는 평균제곱오차

$$E[Y(\mathbf{x}) - \mu_Y - \sum_{j=1}^M \beta_j \phi_j(\mathbf{a}_j^t \mathbf{x})]^2 \quad (2.6)$$

를 최소로 하는 값들로서 구해진다. 이 때 함수 항의 수를 의미하는 M 은 과도한 적합(overfitting) 과 부족한 적합 사이에서 적절한 값으로 결정된다(S-Plus, 1993 참조). Ppreg 에 관한 구체적 내용은 Friedman 과 Stuetzle (1981)을 보기 바란다.

위 모형 (2.5)의 장점은 독립변수들 사이의 교호작용을 충분히 고려한 회귀모형을 세울 수 있다는 점이다. 또한 특별한 경우에 가법모형 (additive model) 과 보통의 선형모형을 포함하고 있어서 매우 일반화된 회귀모형으로서 유용하다고 하겠다. 모형 (2.1)과 비교해볼 때, 가우시안 과정 및 (2.2)와 같은 특별한 공분산을 가정하지 않고 있다는 장점이 있다. 그럼에도 불구하고 많은 예에서 공간적 모형이 비모수 회귀모형보다 더 좋게 나타나고 있다. 이들의 비교에 관한 구체적 내용은 Laslett(1994) 를 보기 바란다.

3. 메타모델의 성능 비교 실험

성능 실험은 다음과 같은 다섯 단계를 거쳐 이루어졌다. 여기에 사용되는 ‘이미 알고 있는 간단한 수학적 공식’을 우리는 장난감 모형이라고 부른다.

단계1: 이미 알고 있는 간단한 수학적 공식에서 어떤 상수를 모른다고 가정하고 적당한 실험계획점들에 대해 공식을 실행시켜 시뮬레이션 관측 값들 \underline{y} 를 얻는다.

단계2: 장난감 모형에서 절대 상수의 참 값을 대입한 상태에서 적당한 실험계획점들에 대해 공식을 실행시켜 실제 (물리적) 실험의 관측 값 \underline{z} 를 얻는다.

단계3: 앞에서 고려한 메타모델에 대해 시뮬레이션 관측 값을 적용해 모수를 추정하고 최적의 모델(즉 \hat{Y} 를 구하는 공식)을 세운다.

단계4: 앞 단계에서 만들어진 메타모델을 이용하여 추정 기준인 RSS_p (식 1.2) 를 최소로 하는 c^* 구한다.

단계5: 이렇게 구해진 c^* 가 (참 값과 추정 값과의 유클리디안 거리를 이용하여) 참 값과 얼마나 유사한가를 봄으로서 그 메타모델의 성능을 평가한다.

표 3.1: 장난감 모형1의 성능 평가 실험 결과(참값 : $C_1^* = 1.0, C_2^* = 1.0$)

메타모델	C^* 추정치	RSS_p 값	참값과 추정값의 거리
전통적 회귀모형	$C_1^* = 1.393$	6.13e-4	0.403
	$C_2^* = 1.089$		
보통 크리깅	$C_1^* = 1.140$	8.43e-4	0.242
	$C_2^* = 1.198$		
일양 크리깅	$C_1^* = 1.114$	1.41e-3	0.153
	$C_2^* = 1.105$		
ppreg	$C_1^* = 1.067$	8.03e-3	0.179
	$C_2^* = 0.833$		

단계4에서 RSS_p 를 최소화할 때 절대상수의 초기치로는 주어진 범위내에서의 난수를 사용하였다. 또한 국소적 최소(local minimum) 문제를 고려하여 5번의 난수 초기치를 이용하여 최소화를 실시한 다음 그 중 가장 최소인 경우를 최적해(global minimum)로 간주하였다. 최적화 알고리즘은 Quasi-Newton 방법(IMSL 의 DBCONF 서브루틴)을 적용하였다.

여기에서는 모두 세 개의 장난감 모형에 대해서 네가지의 메타모델(전통적 회귀모형, 보통 크리깅 모형, 일양 크리깅 모형, ppreg)을 적용하여 비교하였다.

3.1. 장난감 모형1

시뮬레이션 자료(n=30):

$$Y(c_1, c_2, x_1) = c_1 \exp(-c_2 x_1) + \epsilon,$$

$$0 \leq c_1, c_2, x_1 \leq 3, \epsilon \sim N(0, (.01)^2).$$

물리적 실험 자료(m=30):

$$c_1^* = c_2^* = 1.0, \epsilon \sim N(0, .01).$$

성능 평가 결과: 참값과 추정값의 유클리디안 거리에 기초하여 볼 때, 일양 크리깅이 가장 좋은 추정을 하였고, 다음 ppreg, 보통 크리깅, 전통적 회귀모형 순이었다 (표 3.1 참조).

3.2. 장난감 모형2

시뮬레이션 자료(n=20):

$$Y(c, x) = \frac{x_1}{c_1} \left[\sqrt{c_3 + (x_2 + x_3^2)c_2 x_4 / x_1^2 - c_3} \right] + x_1 + 3x_4 + \epsilon,$$

$$1 \leq c_1, c_2 \leq 5, 0 \leq c_3 \leq 2, \epsilon \sim N(0, .5),$$

표 3.2: 장난감 모형2의 성능 평가 실험 결과(참값 : $C_1^* = 2.0$, $C_2^* = 4.0$, $C_3^* = 1.0$)

메타모델	C^* 추정치	RSS_p 값	참값과 추정값의 거리
전통적 회귀모형	$C_1^* = 2.366$ $C_2^* = 2.727$ $C_3^* = 0.988$	1.785	1.323
보통 크리깅	$C_1^* = 2.529$ $C_2^* = 5.379$ $C_3^* = 1.943$	1.005	1.752
일양 크리깅	$C_1^* = 2.434$ $C_2^* = 3.992$ $C_3^* = 1.318$	0.731	0.538
ppreg	$C_1^* = 1.000$ $C_2^* = 1.178$ $C_3^* = 0.689$	0.739	1.062

$$x_1 \sim U(2, 4), x_2 \sim U(2, 15), x_3 \sim U(-5, 1), x_4 \sim U(.5, 1).$$

물리적 실험 자료(m=20):

$$c_1^* = 2.0, c_2^* = c_3^* = 1.0, \epsilon \sim N(0, 1.0).$$

성능 평가 결과: 일양 크리깅이 가장 좋은 추정을 하였고, 다음 ppreg, 전통적 회귀모형, 보통 크리깅 순이었다 (표 3.2 참조).

3.3. 장난감 모형3

시뮬레이션 자료(n=60):

$$Y(c, x) = c_1 \exp(|x_1 + x_2|) + c_2(x_4 + 1.2x_5 + 1)/2.5 + c_3(c_2 + 2x_3 + x_4) +$$

$$c_4 \exp(x_1 + x_3 - x_5 - x_6) + 3 \cos[6(x_2 + x_3 + x_4)] + \epsilon,$$

$$c_1 \sim U(0, 3), c_2 \sim U(0, 6), c_3 \sim U(0, 5), c_4 \sim U(0, 5),$$

$$x_i \sim U(-6, 6), i = 1, 2, \dots, 6, \epsilon \sim N(0, 4).$$

물리적 실험 자료(m=70):

$$c^* = (2.0, 1.0, 4.0, 4.0), \epsilon \sim N(0, 6).$$

성능 평가 결과: 일양 크리깅이 가장 좋은 추정을 하였고, 다음 ppreg, 전통적 회귀모형, 보통 크리깅 순이었다 (표 3.3 참조).

표 3.3: 장난감 모형3의 성능 평가 실험 결과 (참값 : $C_1^* = 2.0$, $C_2^* = 1.0$, $C_3^* = 4.0$, $C_4^* = 4.0$)

메타모델	C^* 추정치	RSS_p 값	참값과 추정값의 거리
전통적 회귀모형	$C_1^* = 1.887$ $C_2^* = 0.919$ $C_3^* = 3.927$ $C_4^* = 2.583$	16.098	1.430
보통 크리깅	$C_1^* = 0.000$ $C_2^* = 0.590$ $C_3^* = 5.278$ $C_4^* = 3.458$	14.246	2.469
일양 크리깅	$C_1^* = 1.550$ $C_2^* = 1.199$ $C_3^* = 3.354$ $C_4^* = 3.769$	14.166	0.902
ppreg	$C_1^* = 1.500$ $C_2^* = 1.012$ $C_3^* = 4.167$ $C_4^* = 5.000$	19.955	1.131

이상 세 개의 장난감 모형을 이용한 성능 실험의 결과를 살펴볼 때, 고려된 메타모델 중에서 일양 크리깅 모형이 절대 상수를 가장 잘 추정하였다는 결론을 얻게 된다. 따라서 다음 절에서의 실제 문제로의 적용에서는 일양 크리깅을 메타모델로 사용하여 절대 상수를 추정할 것이다.

4. 핵융합 시뮬레이션으로의 적용

본 절에서는 앞에서의 결과에 바탕하여 메타모델로서 일양 크리깅을 이용하여 핵융합 시뮬레이션에서의 절대 상수의 추정 방법을 다룬다.

핵융합 반응 실험에서 중요한 요소는 에너지 국한 시간 (energy confinement time) τ_E 이라고 한다. 이론에 기초한 모델은

$$\tau_X = f(c^*, a, R, P, I, N, B) \tag{4.1}$$

로 쓰여지는데(Singer, et.al, 1988), 여기서 f 는 보통 복잡한 미분방정식 등에 의해서 계산되는 함수이고, a 및 R 는 각각 타원형의 핵융합 반응기의 주반지름(major radius)과 부반지름(minor radius)이라고 한다. 또한 P 는 총 입력 전압이며 I 는 플라스마 전류이고, N 은 전

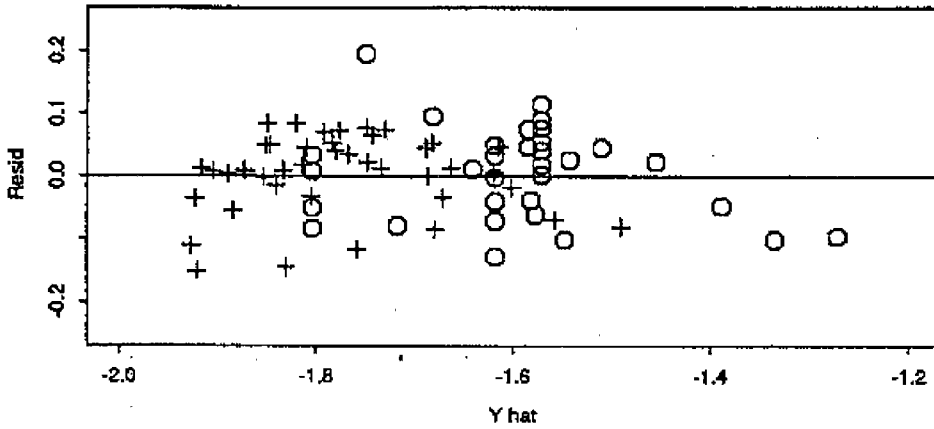


그림 4.1: 일양 크리깅 예측치 \hat{Y} 대 잔차의 그림. O : ASDEX 자료, + : PDX 자료.

자 밀도 (electron density)이고, B 는 toroidal 자장이라고 한다. 그리고 $c^* = (c_1, c_2, c_3, c_4)$ 는 추정되어야 할 이론상의 상수로서 각각 drift wave, rippling, resistance ballooning 상수 및 n_i 의 유의값이라고 한다(Kaye and Goldston, 1985). 핵융합 시뮬레이터인 Baldur 의 결과는 위 (4.1)의 실행 결과인데, 시뮬레이션에서는 c^* 과 네가지 실험변수 (P, I, N, B) 에 어떤 값을 주고 실행하지만, 실제 물리적인 실험에서는 c^* 에는 어떤 값을 줄 수 없고 단지 실험변수 (P, I, N, B) 에만 어떤 값을 주고 실험을 한다.

실제 물리적인 실험의 자료는 S. Kaye 로부터 C. Singer 교수를 통하여 얻었는데, 이것은 ASDEX 라는 독일의 장치로부터 32개의 자료와 PDX 라는 미국의 장치로부터 42개의 자료로 구성되어 있다. 여기서 a 와 R 은 미리 주어진 어떤 고정된 값으로서 변수로 취급하지 않았다. 이 자료에 대한 사전의 통계적 분석에 따라서 우리는 실험변수 (P, I, N, B) 와 반응변수 τ_E 에 Log_{10} 을 취하여 이용하였다.

복잡한 시뮬레이션이어서 실행 시간이 오래 걸리는 Baldur 의 실행을 위한 실행점의 선택은 통계학적인 실험계획법의 문제가 된다. 우리는 (2.1) 에 기초하여 실제 자료를 참조한 축차적 최적 실험계획법을 이용했는데, 구체적 과정은 박정수(1994) 에 자세히 기록되었으므로 관심있는 독자는 그곳을 참고하기 바란다.

c^* 의 추정을 위하여 우리는 ASDEX 에 관련된 Baldur 를 66회 실행하고 PDX 에 관련된 Baldur 를 64회 실행하였다. 그리고 각각에 대해 일양 크리깅 모형을 적합시킨 다음, $RSS_p = RSS_p(\text{ASDEX}) + RSS_p(\text{PDX})$ 를 최소로 하는 c^* 를 구했다. 이 최소화 과정은 Quasi-Newton 방법이라는 수치적 최적화 수법을 이용하였다. 이렇게 해서 구한 추정치는

$$c_1^* = 0.140(.21), c_2^* = 2.282(.81), c_3^* = 2.397(.63), c_4^* = 0.546(.16)$$

이다. 괄호 안의 값은 정규분포를 가정하고 핏서의 정보행렬을 이용하여 구한 추정치에 대한 표준오차이다(Bates and Watts, 1988 참조). 이 추정치를 메타모델에 대입하여 실제 물

리적인 실험 자료와 비교하여 얻은 잔차 그림이 그림 4.1 에 나와 있다. \hat{Y} 값이 큰 경우에 과소 예측(under prediction)하는 경향을 보이고 있지만 전체적으로 무난한 잔차 그림을 보인다고 할 수 있겠다.

5. 요약 및 논의

시뮬레이션 실행 시간이 매우 오래 걸려서 현실적으로 해결하기 힘든 절대 상수(또는 입력 파라미터)의 추정 문제를 통계적인 메타모델을 이용하여 해결하는 방법에 대하여 기술하였다. 특히 최소제곱법에 의해서 절대 상수를 추정하는 문제에서는 소규모의 실험 결과이긴 하지만 일양 크리깅 모형이 일을 잘하고 있다고 보여 진다.

메타모델들의 성능 평가를 세 개의 장난감 모형에 대해서 실시하였는데, 장난감 모형의 수를 늘려서 결론을 얻는다면 더욱 신뢰할만한 성능 평가가 될 것이다. 또한 추정 방법에서도 최소제곱법만이 아니라 어떤 종류의 최우추정법이나 베이지안 방법을 적용할 수도 있을 것이다. 이들 새로운 추정 방법에 대해서도 역시 성능 평가를 하여서 가장 좋은 메타모델과 가장 좋은 추정 방법을 찾아내고 그 추정치의 특성을 알아내는 것이 앞으로의 연구 과제이다.

참고문헌

- [1] 박정수 (1994). Sequential Designs for Complex Experiments with an Application to a Nuclear Fusion Model, <응용통계연구>, 제7권 2호, 183-200.
- [2] 김정옥, 박정수, 배종성 (1994). Design and analysis of computer experiments with an application to quality improvement, <응용통계연구>, 제7권 1호, 83-102.
- [3] Bates, D., and Watts, D. (1988). *Nonlinear Regression Analysis and Its Application*, Wiley, New York.
- [4] Cressie, N. (1991). *Statistics for Spatial Data*, Wiley, New York.
- [5] Friedman, L. (1995). *Simulation Metamodel*, Kluwer Academic Pub., Norwell, MA.
- [6] Friedman, J., and Stuetzle, W. (1981). Projection pursuit regression, *Journal of American Statistical Association*, **76**, 817-823.
- [7] Kaye, S., and Goldston, G. (1985). Global energy confinement scaling for neutral-beam-heated Tokamak, *Nuclear Fusion*, **25**, 65-69.
- [8] Laslett, G. (1994). Kriging and splines: An empirical comparison of their predictive performance in some applications (with discussion), *Journal of American Statistical Association*, **89**, 391-409.

- [9] Miller, D., and Frenklach, M. (1983). Sensitivity analysis and parameter estimation in dynamic modeling of chemical kinetics, *International Journal of Chemical Kinetics*, **15**, 677-696.
- [10] Ripley, B. (1981). *Spatial Statistics*, Wiley, New York.
- [11] Sacks, J., Welch, W., Mitchell, T., and Wynn, H. (1989). Design and analysis of computer experiments (with discussion), *Statistical Science*, **4**, 409-435.
- [12] Singer, C., Post, D., Mikkelsen, D., Redi, M., et.al. (1988). Baldur: a one-dimensional plasma transport code, *Computer Physics Communications*, **49**, 275-398.
- [13] S-Plus (1993). *S-PLUS for Windows User's Manual*, Vol. 2, Statistical Sciences, Inc., Seattle.

[1999년 2월 접수, 1999년 7월 최종수정]

Statistical Estimation of the Input Parameters in Complex Simulation Code*

Jeong-Soo Park¹⁾

ABSTRACT

The unknown (input) parameters of a computer simulation code are usually adjusted by the nonlinear least squares estimation (NLSE) method which minimizes the sum of differences between computer responses and real observations. However, when simulation program is very complex and so take several hours for one execution of the program, the NLSE method may not be computationally feasible. In these cases, one may build a statistical metamodel which approximates an unknown functional relationship that exists between a controllable set of input variables and a simulated response variable. Then this metamodel is used as if it is the true simulation code in the NLSE method, which makes the problem be solved and computationally feasible. This “approximated” NLSE method is described in this paper. We use a Gaussian spatial linear model as a metamodel of complex simulation code. This model is compared with the conventional regression model and projection pursuit regression. A small toy-model study shows that the universal Kriging (spatial model) works well. This methodology is applied to nuclear fusion simulator, and four parameters are estimated.

* The author would like to acknowledge the financial supported from SERI Supercomputer Center through CRAY R&D Grant Program of 1997.

1) Associate Professor, Department of Statistics, and Institute of Basic Sciences, Chonnam National University