

## 적응 기각 추출을 기반으로 하는 난수 생성기의 성능 비교<sup>†</sup>

김효태<sup>1</sup> · 조성일<sup>2</sup> · 최태련<sup>3</sup>

<sup>123</sup>고려대학교 통계학과

접수 2015년 2월 24일, 수정 2015년 3월 12일, 게재확정 2015년 4월 9일

### 요약

적응 기각 추출 (adaptive rejection sampling) 방법은 특정한 형태의 확률분포로부터 확률표본을 추출하기 위한 대표적인 난수생성기 (random number generator)로서, 추출된 표본으로부터 제안분포 (proposal distribution)가 개선이 되는 장점을 가지고 있다. 그러나, 기존에 제안된 적응기각 추출 방법은 확률분포의 형태가 로그-오목 함수 (log-concave function)인 경우에만 사용이 가능하기 때문에 적용범위가 제한적이다. 최근의 연구결과에서는, 이러한 단점을 보완하기 위해 다양한 형태의 적응기각추출이 진행되고 있으며, 이에 본 논문에서는 기존의 적응기각추출 방법을 포함한 총 5가지의 난수 생성 방법에 대해서 고찰하고, 아울러 모의실험을 통해 각 방법들간의 성능에 대하여, 적합성과 효율성의 관점에서 실증적으로 비교 분석하도록 한다.

주요용어: 난수 생성기, 다봉성 함수, 로그-오목함수, 모의 실험, 적응 기각 추출.

### 1. 서론

컴퓨터의 성능이 향상됨에 따라 통계학 분야에서 특정 분포를 따르는 표본을 생성하고, 이를 통해 실험자의 가설을 입증하려는 컴퓨터 모의 실험은 보편화되었다. 일례로 베이지안 통계학에서는 마코프 체인 몬테 카를로 (Markov chain Monte Carlo; MCMC) 기법을 통해 사후확률분포에 대한 추론을 실시하고, 이를 이용하여 모의 실험을 진행하는 연구를 쉽게 찾아볼 수 있다 (예: Sohn 등, 1996; Choi 등, 2011). 이러한 컴퓨터 모의 실험을 위해 사용되는 확률표본을 만들기 위해 다양한 난수생성기 (random number generator)가 개발 되었으며, 그 비교 연구 또한 진행되고 있다 (Park 등, 1998; Mo와 Park, 2013; Choi와 Ko, 2014). 본 논문에서는 이러한 난수 생성기 중 대표적으로 사용되는 적응 기각 추출 방법론 (adaptive rejection sampling method; ARS)에 기반한 다양한 난수생성기에 대해 살펴보고 그 성능을 실증적으로 비교 분석해 보고자 한다.

적응 기각 추출은 기존의 기각 추출 (rejection sampling) 방법론의 단점을 개선하기 위해 Gilks와 Wild (1992)에 의해 제안된 방법론으로서, 로그변환된 목표 확률밀도함수 (target probability density function)에 접선 (tangent line)을 연결하여 만든 제안 분포 (proposal distribution)를 통해 표본을 생성하고, 이를 이용하여 제안후보를 개선함으로써 보다 나은 확률표본을 생성하는 방식이다. 그러나 적

<sup>†</sup> 이 논문은 2013년도 정부 (교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 기초연구사업임 (No. 2013R1A1A2074463).

<sup>1</sup> (163-701) 서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 통계학과, 석사과정.

<sup>2</sup> (163-701) 서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 통계학과, 연구교수.

<sup>3</sup> 교신저자: (163-701) 서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 통계학과, 부교수.

E-mail: trchoi@korea.ac.kr

용 기각 추출 방법은 로그-오목 (log concave) 함수에 한하여 적용이 가능하기 때문에 사용이 제한적으로 알려져 왔으며, 이를 개선하기 위한 다양한 방법들이 제안되어 왔다.

이러한 방법들 중 가장 대표적인 방법으로서 Gilks 등 (1995)에 의해 소개된 적응기각 메트로폴리스-헤이스팅스 추출 (adaptive rejection Metropolis sampling; ARMS)은 기존의 적응 기각 추출에 메트로폴리스-헤이스팅스 알고리즘 (Metropolis-Hastings algorithm)을 결합하여, 여러 개의 최빈값 (mode)을 갖는 목표 분포와 같이 로그-오목성이 만족되지 않는 경우에도 적용이 가능한 방법이다. 그러나, 메트로폴리스-헤이스팅스 알고리즘의 사용으로 표본 간의 종속성 (dependency)이 생기는 단점을 가지고 있기 때문에, 적응 기각 메트로폴리스-헤이스팅스 추출을 통해 얻은 표본은 특정 분포를 따르며 독립된 원소들로 이루어진 완전한 표본이라 보기 어렵다는 단점이 있다. 이 외에 다양한 대안적인 적응 기각추출 방법이 제안되어 왔으며, 본 논문에서는 이러한 대안적인 방법들 중 세 가지 방식, 주어진 목표 확률밀도함수를 변곡점 (inflection point)에 따라 오목 (concave)함수와 볼록 (convex)함수로 분해하는 Evans와 Swartz (1998)의 방식, 이러한 분해방식을 목표 확률밀도함수의 정의역 전 구간에서 고려하는 Görür와 Teh (2011)의 방식, 다봉성 (multi-mode) 형태를 갖는 목표 함수를 고려할 수 있는 Martino와 Miguez (2011)의 방식에 대해서 추가적으로 살펴보도록 한다.

이를 위한 논문의 구성은 다음과 같다. 먼저 2절에서는 앞에서 언급한 5가지 방법론들-적응기각추출 방식, 적응기각 메트로폴리스-헤이스팅스 추출과 최근에 제안된 대안적인 3가지 추출방식-에 대해서 구체적인 알고리즘과 구현방식에 대해서는 고찰하고 각 방법의 장,단점에 대해서도 논의하도록 한다. 3절에서는 각 방법들을 모의실험을 통해 실증적으로 분석하고, 적합성과 효율성을 바탕으로 한 성능 비교를 실시하고, 이에 기반한 상황에 따른 최적의 방법들에 대해 비교 분석하도록 한다. 마지막으로 4절에서는 결론을 제시하고 추가적으로 살펴볼 사항들에 대해서 논의해보도록 한다.

## 2. 적응 기각 추출에 기반한 난수 생성기

### 2.1. 적응 기각 추출

적응 기각 추출 (ARS)은 로그-오목 형태의 목표 확률분포에 적용가능한 난수 생성기로 Gilks와 Wild (1992)에 의해 처음 소개되었다. ARS의 가장 대표적인 장점은 기각추출 방법에서 사용되는 덮개함수 (envelope function)를 로그변환된 확률밀도함수에 접선을 연결하여 만든 조각직선덮개함수 (piecewise linear envelope function)로 사용하고 표본이 추출되는 과정에서 목표 함수에 가깝게 개선한다. 따라서 기대반복수 (the expected number of iterations)가 줄어드는 효과가 있어 기각추출방법 (rejection sampling) 보다 효율적이라는 것이 알려져 있다 (예, Givens와 Hoeting (2013) 등 참조). Gilks와 Wild (1992)에 소개된 구체적인 ARS 알고리즘은 다음과 같다:

먼저 표본을 추출하기 위한 목표확률분포의 현시점의 지지점 집합 (support set)을  $S_k = \{s_i; i = 1, \dots, k, s_{i-1} \leq s_i\}$ 라 하고 목표확률밀도함수  $p_0(x)$ 가 아래와 같이 정의된다고 하자.

$$p_0(x) \propto p(x) = \exp\{f(x)\}. \quad (2.1)$$

먼저, 첫번째 단계로  $(s_i, f(s_i))$ 의 위치에서 접선을 생성하고 두 접선이 만나는 점  $z_i$ 를 아래와 같이 정의한다.

$$z_i = \frac{[f'(s_i)s_i - f'(s_{i+1})s_{i+1}] - [f(s_i) - f(s_{i+1})]}{[f'(s_i) - f'(s_{i+1})]}, \quad i = 1, \dots, k-1, \quad (2.2)$$

여기서 정의역의 양 끝점을  $z_0$ 과  $z_k$ 로 설정하고 덮개함수를 정의하기 위해 접선과  $z_i$ 를 이용한 상위 덮

개,  $g(x)$ 를 아래와 같이 형성하고

$$f(x) \leq g(x) = f(s_i) + (x - s_i)f'(s_i), \quad x \in [z_{i-1}, z_i], \quad i = 1, \dots, k \quad (2.3)$$

인접한 지지점을 잇는 할선 (secant line)을 통해  $f(x)$ 에 대한 하위 덮개  $h(x)$ 를 다음과 같이 정의한다.

$$f(x) \geq h(x) = \begin{cases} \left( \frac{f(s_{j+1}) - f(s_j)}{s_{j+1} - s_j} \right) (x - s_j) + f(s_j), & j = 1, \dots, k-1, \quad s_1 \leq x \leq s_k \\ -\infty, & x < s_1 \text{ 또는 } x > s_k. \end{cases} \quad (2.4)$$

아울러, 하위 덮개는 3절에서 소개할 스퀴즈 테스트 (Squeeze test)를 위해 사용되며, 상대적으로 복잡한  $f(x)$  계산의 빈도를 줄이고 제안 분포의 개선 속도를 증가 시키는데 활용된다. 이러한 두 가지 상,하위 덮개를 바탕으로 다음과 같은 방식으로 ARS 알고리즘을 적용하도록 한다.

- Step 1. 초기 지지점의 갯수  $k$ 와 집합  $S_k = \{s_1, \dots, s_k\}$ 을 설정한다.
- Step 2. 지지점을 이용하여  $f(x)$ 에 대한 상위 덮개  $g(x)$ 와 하위 덮개  $h(x)$ 를 생성한다.
- Step 3. 표본 후보 (candidate)  $x' \sim \pi(x) \propto \exp\{g(x)\}$ 와 테스트를 위한 임의의 난수  $u \sim \text{Uniform}(0, 1)$ 를 생성 한다.
- Step 4. (스퀴즈 테스트) 만약  $u \leq \exp\{h(x') - g(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 를 표본에 포함시키고 Step 3로 돌아간다.
- Step 5. (리젝션 테스트)
  - 1) 만약  $u \leq \exp\{f(x') - g(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 를 표본과 지지점 집합에 동시 포함시킨다. 이 후 Step 2로 돌아간다.
  - 2)  $u > \exp\{f(x') - g(x')\}$ 일 경우 표본 후보  $x'$ 는 지지점 집합에만 포함시키며 Step 2로 돌아간다.

## 2.2. 적응 기각 메트로폴리스 추출

Gilks 등 (1995)에 소개된 적응 기각 메트로폴리스 추출 (ARMS) 방법은 도함수 존재에 의존하지 않는 적응기각추출 (derivative-free ARS; DFARS라고 지칭)을 기반으로 메트로폴리스-헤이스팅스 (Metropolis-Hastings; MH) 알고리즘을 접목시킨 방법론으로 목표 분포가 로그-오목성을 가지지 않는 경우에도 사용이 가능한 장점을 지니고 있다. 그러나 기존 ARS와는 달리 MH방법을 통한 표본추출이기 때문에 목표확률분포로부터 독립표본 (independent sample)을 생성하지 않는다는 단점이 존재한다.

ARMS 구현을 위하여, 먼저 지지점 집합을 ARS와 동일하게  $S_k = \{s_j; i = 1, \dots, k\}$ 라 하자. 여기서  $s_1$ 과  $s_k$ 는 목표확률분포의 밀도함수  $p_0(x)$ 의 정의역 양 끝점이고 원소 개수의 최소값에 대해  $k \geq 5$ 이다. 그 다음  $2 \leq i \leq j \leq k-1$ 에 대해  $U_{ij}(x, S_k)$ 를 두 점  $(s_i, f(s_i))$ 와  $(s_j, f(s_j))$ 을 지나는 직선으로 정의하고, 상위 덮개  $g(x)$ 를 아래와 같이 생성한다.

$$g(x) = \max [U_{i(i+1)}(x, S_k), \min [U_{(i-1)i}(x, S_k), U_{(i+1)(i+2)}(x, S_k)]], \quad (2.5)$$

$$s_i \leq x \leq s_{i+1}, \quad i = 1, \dots, k-1$$

이 경우, 식 (2.5)로 부터 생성된  $g(x)$ 는  $U_{i(i+1)}(x, S_k)$ 의 최대값을 고려하기 때문에  $f(x)$ 의 볼록 구간에 대해서도 상위덮개를 생성할 수 있음을 알 수 있다. 이와 같은 절차를 통해 생성된  $g(x)$ 를 이용하여 ARS와 유사한 방식으로 표본 후보를 생성하고, 추가적으로 이러한 표본 후보에 MH 알고리즘을 적용하도록 한다. 구체적인 ARMS 알고리즘은 다음과 같다.

- Step 1. 초기 지지점 집합  $S_k = \{s_1, \dots, s_k\}$ ,  $k \geq 5$  및  $X_{cur}$ 를 설정한다.
- Step 2. 지지점을 이용하여  $f(x)$ 에 대한 상위 커버  $g(x)$ 를 생성한다.
- Step 3. 표본 후보  $x' \sim \pi(x) \propto \exp\{g(x)\}$ 와 테스트를 위한 임의의 수  $u \sim Uniform(0, 1)$ 를 생성한다.
- Step 4. (리젝션 테스트)
- 1) 만약  $u > \exp\{f(x') - g(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 를 지지점 집합에 포함시키며, 이 후 Step 2로 돌아간다.
  - 2)  $u \leq \exp\{f(x') - g(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 에 대해  $X_A = x'$ 와 같이 설정한다.
- Step 5. 임의의 수  $u \sim Uniform(0, 1)$ 를 다시 한 번 생성한다.
- Step 6. (메트로폴리스-헤이스팅스 알고리즘)
- 1) 만약  $u \leq \min[1, \alpha]$  이면  $X_A$ 를 표본에 포함시키고  $X_{cur} = X_A$ 로 설정한다. 이 후 Step 3으로 돌아간다.
  - 2)  $u > \min[1, \alpha]$  이면  $X_A$ 를 표본에 포함시키고 Step 3로 돌아간다.

### 2.3. 변곡점 함수 분해 적응 기각 추출

Evans와 Swartz (1998)에 의해 제시된, 변곡점 함수 분해 적응 기각 추출은 변곡점 (inflection point)을 통해 목표 확률밀도함수를 오목/볼록 형태의 부분 함수로 분해하고 각 부분 함수의 상/하위 덮개를 독립적으로 생성하여 ARS를 적용하는 방법론이다. 구체적으로는 각 부분 함수에 대해 오목 함수에는 접선 (tangent line)을, 볼록 함수에는 할선 (secant line)을 적용하여 상위 덮개를 생성하고, 이와는 반대로 할선과 접선을 각각의 함수에 적용하여 하위 덮개를 구성한다. 이때 부분 구간 덮개들의 결합을 통해 전 구간에서의 상/하위 덮개를 완성함으로써 다봉성의 특징을 갖는 목표 확률밀도함수에도 적용이 가능하다는 장점이 있다. 그러나, 이러한 방법은 변곡점을 기준으로 분해를 실시하기 때문에 별도로 변곡점에 대한 계산이 필요하며, 해당 계산이 복잡할 경우 난수 생성에 있어 큰 장애 요인이 될 수 있다는 것이 단점이라고 할 수 있다. 이러한 해당 방법론을 변곡점 함수 분해 적응 기각 추출이라고 칭하며, 아울러 제안자들의 이름 (Evans와 Swartz, 1998)을 바탕으로, 이후의 설명에서는 ESARS로 부르기로 한다.

ESARS에서는 먼저, 로그 변환이나 멱변환 (power transformation)과 같은 다양한 변환을 포함하는  $T$ -변형 ( $T$ -transformation)을 식 (2.1)의 목표확률밀도함수  $p(x)$ 에 적용한 후, 임계점과 변곡점을 계산하여 지지점 집합에 포함시킨다. 이렇게 생성된 지지점 집합을 기반으로 다음과 같이 접선  $t_i(x) = (T \circ p)(s_i) + (T \circ p)'(s_i)(x - s_i)$ 과 할선  $c_i(x) = (T \circ p)(z_i) + [(T \circ p)(z_i) - (T \circ p)(z_{i-1})](x - z_i) / (z_i - z_{i-1})$ 을 계산한다. 이 경우  $z_i$ 는 아래와 같이 정의하고,

$$z_i = \frac{[(T \circ p)'(s_i)s_i - (T \circ p)'(s_{i+1})s_{i+1}] - [(T \circ p)(s_i) - (T \circ p)(s_{i+1})]}{(T \circ p)'(s_i) - (T \circ p)'(s_{i+1})}, \quad i = 1, \dots, k-1. \quad (2.6)$$

이를 바탕으로 상/하위 덮개  $g(x)$ 와  $h(x)$ 를 아래와 같이 각각 계산한다.

- $T \circ p$ 가 오목함수이고  $T$ 가 증가함수 또는  $T \circ p$ 가 볼록함수이고  $T$ 가 감소함수라면,

$$\begin{aligned} g(x) &= t_i(x), \quad z_{i-1} \leq x \leq z_i, \quad i = 1, \dots, k \\ h(x) &= c_i(x), \quad z_{i-1} \leq x \leq z_i, \quad i = 1, \dots, k. \end{aligned} \quad (2.7)$$

- $T \circ p$ 가 오목함수이고  $T$ 가 감소함수 또는  $T \circ p$ 가 볼록함수이고  $T$ 가 증가함수라면

$$\begin{aligned} g(x) &= c_i(x), \quad z_{i-1} \leq x \leq z_i, \quad i = 1, \dots, k \\ h(x) &= t_i(x), \quad z_{i-1} \leq x \leq z_i, \quad i = 1, \dots, k. \end{aligned} \quad (2.8)$$

이를 바탕으로 한, ESARS의 구체적인 알고리즘은 다음과 같다:

- Step 1.  $T \circ p(x)$ 에 대해 임계점과 변곡점을 계산 후, 초기 지지점 집합  $S_k = \{s_1, \dots, s_k\}$ 을 설정한다.
- Step 2. 지지점과 접선  $t_i(x)$ 를 통해 얻은  $z_i$  그리고 이를 통한 할선  $c_i(x)$ 을 계산하여  $T \circ p(x)$ 에 대한 상위 덮개  $g(x)$ 와 하위 덮개  $h(x)$ 를 생성한다.
- Step 3. 표본 후보  $x' \sim \pi(x) \propto \exp\{g(x)\}$ 와 테스트를 위한 임의의 수  $u \sim \text{Uniform}(0, 1)$ 를 생성한다.
- Step 4. (스퀴즈 테스트) 만약  $u \leq \exp\{h(x') - g(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 를 표본에 포함시키고 Step 3로 돌아간다.
- Step 5. (리젝션 테스트)
  - 1) 만약  $u \leq \exp\{p(x') - g(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 를 표본과 지지점 집합에 동시 포함시키며, Step 2로 돌아간다.
  - 2)  $u > \exp\{p(x') - g(x')\}$ 일 경우 표본 후보  $x'$ 는 지지점 집합에만 포함시키며, Step 2로 돌아간다.

#### 2.4. 오목-볼록 적응 기각 추출

본 절에서는 Görür와 Teh (2011)에서 소개된 오목-볼록 적응 기각 추출 (concave-convex adaptive rejection sampling; CCARS) 방법에 대해 소개한다. CCARS는 목표 함수를 오목/볼록 함수로의 분해를 실시하고, 각 부분 함수만의 상/하위 덮개를 정의함으로써 다봉성 함수에도 적용 가능한 방법론이다. 특히, ESARS와는 달리 각 부분 함수는 상호 배타적인 정의역 구간을 갖지 않고 원함수  $p(x)$ 의 정의역 전 구간에서 오목/볼록 함수의 특징을 유지한다는 장점을 가지고 있다. CCARS는 부분 함수로의 분해 방법에 따라 두 가지 유형으로 나누어지며, 전체 알고리즘 설명에 앞서 해당 함수 분해 방법을 설명하기로 한다.

첫 번째 방법은 ESARS와 같이 변곡점을 이용한 분해 방법이다.  $f(x) (\equiv \log p(x) \propto \log p_0(x))$ 가 미분가능함수로 유한개의 변곡점을 갖고 있을 경우 아래와 같이 오목( $f_\cap$ )/볼록( $f_\cup$ ) 부분 함수로의 분해가 가능하며, 이와 같은 함수 분해는 최소 분해 (minimal decomposition)라고 불리워진다.

$$\begin{aligned} f_\cap &= f(x)I[x \in D_\cap] + \sum_{j=1}^M t_{\alpha_j}(x)I[(x > \alpha_j) \wedge (\alpha_j^- \in D_\cap)] \vee I[(x < \alpha_j) \wedge (\alpha_j^+ \in D_\cap)] \\ f_\cup &= f(x)I[x \in D_\cup] - \sum_{j=1}^M t_{\alpha_j}(x)I[(x > \alpha_j) \wedge (\alpha_j^- \in D_\cap)] \vee I[(x < \alpha_j) \wedge (\alpha_j^+ \in D_\cap)], \end{aligned} \quad (2.9)$$

여기서  $D_\cap, D_\cup$ 는 변곡점을 기준으로 구분되는  $f''(x) \leq 0, f''(x) \geq 0$ 인 정의역 부분 구간이며,  $t_{\alpha_j}(x) = f(\alpha_j) + f'(\alpha_j)(x - \alpha_j)$ ,  $j = 1, \dots, M$ 는  $\alpha_j$ 에서의 접선,  $\alpha_j$ 와  $M$ 은 각각 변곡점과 변곡점의 개수를,  $I[A]$ 는 지지 함수,  $\alpha_j^\pm = \alpha_j \pm \epsilon$ ,  $\epsilon > 0$ 을 의미한다. 이후 논의에 있어 위와 같은 분해 방법을 사용한 CCARS를 CCARS-M (minimal)으로 칭하도록 하고, CCARS-M방법의 경우에는 변곡점에 대한 정보를 필요로 하기 때문에 ESARS와 동일한 문제가 발생할 수 있다는 단점이 있다.

또 다른 분해방법은  $f(x)$ 의 형태가  $f(x) = \sum_{i=1}^n f_i(x)$ 와 같이 합 (additive)의 형태일 경우 적용하는 방법으로서, 각각의  $f_i(x)$ 가 오목이나 볼록 함수의 형태를 갖고 있을 경우, 오목 함수들의 합을  $f_{\cap}$ 로 볼록 함수들의 합을  $f_{\cup}$ 로 정의한다. 만약  $f_i(x)$ 가 다봉성인 경우에는 앞서 언급한 최소 분해방법을 각  $f_i(x)$ 에 적용하도록 하며, 이 경우 변곡점에 대한 정보가 필요하지만, 부분 함수에 대한 변곡점의 계산은  $f(x)$ 에서의 변곡점에 대한 계산보다 수월하다는 장점이 있다고 할 수 있다. 이와 같은 분해 방법을 이용한 CCARS를 이후 논의에서는 CCARS-A (additive)로 부르도록 한다.

두 가지 분해방법 CCARS-M과 CCARS-A에 의해 생성된 부분함수  $f_{\cap}(x)$ 와  $f_{\cup}(x)$ 를 임의로 설정한 지지점  $s_i$ 와 이들의 집합  $S_k = \{s_i, i = 1, \dots, k\}$ 을 이용하여 다음과 같이 접선과 할선을 정의하고

$$\begin{aligned} t_i^{f_{\cap}}(x) &= f_{\cap}(s_i) + f'_{\cap}(s_i)(x - s_i), \quad i = 1, \dots, k \\ c_j^{f_{\cup}}(x) &= f_{\cup}(s_j) + \frac{f_{\cup}(s_{j+1}) - f_{\cup}(s_j)}{s_{j+1} - s_j}(x - s_j), \quad j = 0, \dots, k, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$f_{\cap}(x)$ 의 상위 덮개  $g_{\cap}(x) = \min_{i=1, \dots, k} t_i^{f_{\cap}}(x)$ 와 하위덮개  $h_{\cap}(x) = \min_{i=0, \dots, k} c_i^{f_{\cap}}(x)$ 를 설정하고, 아울러  $f_{\cup}(x)$ 의 상위 덮개  $g_{\cup}(x) = \max_{i=0, \dots, k} c_i^{f_{\cup}}(x)$ 와 하위덮개  $h_{\cup}(x) = \max_{i=1, \dots, k} t_i^{f_{\cup}}(x)$ 를 각각 설정한다. 이를 바탕으로 한, 구체적인 CCSAR의 알고리즘은 다음과 같다.

- Step 1. 초기 지지점 집합  $S_k = \{s_1, \dots, s_k\}$ 을 설정한다.
- Step 2.  $f(x)$ 에 대해 오목/볼록의 특징을 갖는 부분 함수로의 분해를 실시한다.
- Step 3. 부분 함수  $f_{\cap}(x)$ 와  $f_{\cup}(x)$ 에 대해 접선과 할선 그리고 지지점을 이용하여 상/하위 커버를 각각 생성한 후 결합하여  $f(x)$ 에 대한 상/하위 커버  $g(x)$ ,  $h(x)$ 를 생성한다.
- Step 4. 표본 후보  $x' \sim \pi(x) \propto \exp\{g(x)\}$ 와 테스트를 위한 임의의 수  $u \sim \text{Uniform}(0, 1)$ 를 생성한다.
- Step 5. (스퀴즈 테스트) 만약  $u \leq \exp\{h(x') - g(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 를 표본에 포함시키고 Step 4로 돌아간다.
- Step 6. (리젝션 테스트)
  - 1) 만약  $u \leq \exp\{f(x') - g(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 를 표본과 지지점 집합에 동시에 포함시킨다. 이후 Step 3으로 돌아간다.
  - 2)  $u > \exp\{f(x') - g(x')\}$ 일 경우 표본 후보  $x'$ 는 지지점 집합에만 포함시키며 Step 3으로 돌아간다.

## 2.5. 일반화 적응 기각 추출

일반화 적응 기각 추출 (generalized adaptive rejection sampling; GARS)은 Martino와 Miguez (2011)에 의해 제시 되었으며, 오목/볼록 부분 함수가 아닌 아래와 같은 방식으로 주어진 목표 함수를 분해함으로써 ARS의 한계를 보완하는 대안적인 방법이다.

$$p_0(x) \propto p(x) = \exp\{-V(x, g)\} = \exp\left\{-c_n - \sum_{i=1}^n U_i(g_i(x))\right\}, \quad (2.11)$$

여기서  $U_i(x)$ 는 볼록 함수이며  $g_i(x)$ 는 볼록 또는 오목함수로서 이제 도함수가 상수가 되는 조건을 만족하는 함수이다. GARS 알고리즘은  $g_i(x)$ 를 대체할 수 있는 선형 함수  $h_i(x)$ 를 찾고 이를 대입함으로써  $V(x, h)$ 가 볼록 함수가 될 수 있도록 만들어 준다. 여기에 접선을 이용하여 하위 덮개  $W(x)$ 를 생성하고 이로부터  $p(x)$ 의 상위덮개  $\exp\{-W(x)\}$ 를 만들고자 함이 본 알고리즘의 핵심이다.

GARS를 설명하기 위해 주어진 정의역  $D$ 에 대해서 지지점 집합  $S_k = \{s_j; g_i(s) = M_i, U_i(M_i) = \min_{x \in D} U_i(x), i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, k\}$ 를 초기화한다. 다음으로  $g_i$ 를 대신할  $h_i$ 는  $|g_i(x) - M_i| \geq |h_i(x) - M_i|$ 의 조건을 만족하도록 다음과 같이 구한다. 여기서 논의의 편의성을 위하여  $g_i(x) = M_i$ 가 두 개의 해  $\{x_{i1}, x_{i2}; x_{i1} \leq x_{i2}\}$ 를 갖는 경우만 고려하기로 한다. 먼저  $g_i(x)$ 의 정의역을 해  $x_{i1}, x_{i2}$ 에 의해 세 개의 구간  $(-\infty, x_{i1}]$ ,  $[x_{i1}, x_{i2}]$ ,  $[x_{i2}, \infty)$ 으로 나눈다. 그 다음  $(-\infty, x_{i1}]$ ,  $[x_{i2}, \infty)$  구간에서는  $\{s_j; -\infty < s_j \leq x_{i1}\}$  또는  $\{s_j; x_{i2} \leq s_j < \infty\}$ 의  $s_j$ 를 이용하여  $g_i(x)$ 에 대한  $s_j$ 에서의 접선  $t_{ij}(x)$ 를 긋고  $h_i$ 를 계산하고,  $[x_{i1}, x_{i2}]$  구간에서는  $\{s_j; x_{i1} \leq s_j \leq x_{i2}\}$  관계를 만족하는 인접한 두 지지점  $s_j, s_{j+1}$ 를 이용하여 할선  $c_{ij}(x)$ 를 긋고  $h_i$ 를 계산한다. 이렇게 얻은  $h_i(x)$ 를  $g_i(x)$  자리에 대입함으로써  $V(x, h) = c_n + \sum_{i=1}^n U_i(h_i(x)) \leq c_n + \sum_{i=1}^n U_i(g_i(x)) = V(x, g)$ 의 수식을 만족하는 볼록 함수  $V(x, h)$ 를 구한다. 다음으로  $W(x)$ 의 생성을 위해 지지점 집합  $S_k$ 의 원소를 이용하여  $k + 1$ 개의 구간  $\{I_j = [s_j, s_{j+1}]; j = 0, \dots, k, s_0 = -\infty, s_{k+1} = \infty\}$ 을 설정해준다. 또한 각 구간에서의  $V(x, h)$ 값을  $v_j(x, h)$ 라 정의했을 때,  $x, x_j \in I_j$ 에 대한  $w_j(x) = v_j(x_j, h) + v'_j(x_j, h)(x - x_j)$ 는 구간  $I_j$ 의 임의의 점  $x_j$ 에서 그  $v_j(x, h)$ 에 대한 접선이다. 이때  $\exp\{-W(x)\} \geq \exp\{-V(x, h)\}$ 의 조건을 만족하는  $W(x)$ 는 아래와 같이 정의한다.

$$W(x) = \begin{cases} w_0(x), & x, x_0 \in I_0 \\ \vdots \\ w_k(x), & x, x_k \in I_k \end{cases} \quad (2.12)$$

이를 바탕으로 한, 구체적인 GARS 알고리즘은 다음과 같다.

- Step 1.  $U_i$ 와  $g_i, M_i$ 의 특성을 고려하여 초기 지지점 집합  $S_k = \{s_1, \dots, s_k\}$ 을 설정한다.
- Step 2.  $g_i(x)$ 를 대신할 수 있는 선형 함수  $h_i(x)$ 를 구한다.
- Step 3. 선형 함수  $h_i(x)$ 를 대입한  $V(x, h)$ 에 대해 하위 커버  $W(x)$ 를 생성한다.
- Step 4. 표본 후보  $x' \sim \pi(x) \propto \exp\{-W(x)\}$ 와 임의의 수  $u \sim \text{Uniform}(0, 1)$ 를 생성한다.
- Step 5. (리젝션 테스트)
  - 1) 만약  $u \leq p(x') / \exp\{-W(x')\}$ 이면 표본 후보  $x'$ 를 표본에 포함시키고, Step 4로 돌아간다.
  - 2)  $u > \exp\{f(x') - g(x')\}$ 일 경우 표본 후보  $x'$ 는 지지점 집합에만 포함시키며 Step 2로 돌아간다.

### 3. 모의 실험에 기반한 실증적 성능 비교

3절에서는 2절에서 설명된 각 방법들에 대하여, 모의실험을 통해 적합성과 효율성을 바탕으로 한 성능 비교를 실시하고, 이를 기반으로 각 상황에 따른 최적의 방법들에 대해 비교 분석하도록 한다. 이를 위하여, 먼저 Table 3.1과 같이 2절에서 설명된 ARS에 기반한 다섯 가지 방법론의 주요 특징에 대해 요약하고자 한다. 첫번째로, 목표 분포에 있어서 ARS를 제외한 모든 방법론은 다봉성 특징을 갖는 분포에 적용이 가능하고, 이를 위하여 상위 덮개를 생성함에 있어 공통적으로 주어진 목표 함수에 대한 변형을 실시하는데, ESARS와 CCARS는 로그 변환에 국한되지 않고 다양한 변환을 진행할 수 있다. 두번째로, 표본 후보를 선택하기 위하여 각 알고리즘 내에 사용되는 테스트를 살펴보면, ARMS와 GARS는 상위 덮개를 이용한 리젝션 테스트만 진행하는데 반해 그 외의 방법론은 하위 덮개를 통한 스퀴즈 테스트를 동시에 진행하고 있음을 알 수 있다. 마지막으로, ESARS와 CCARS는 주어진 목표 함수 분해를

위해 변곡점에 대한 정보가 필요하며, CCARS의 경우  $f(x) = \sum_{i=1}^n f_i(x)$ 와 같이 정의된 모든 부분 함수  $f_i(x)$ 가 오목 또는 볼록의 형태를 갖고 있다면 변곡점에 대한 계산을 생략할 수 있다.

**Table 3.1** Basic properties of ARS-based methods

Method	Target density	Transformation	Test in algorithm	Inflection points
ARS	Log-concave	Logarithm	Rejection & Squeeze	Not applicable
ARMS	Multimodal	Logarithm	Rejection	Not required
ESARS	Multimodal	General $T$	Rejection & Squeeze	Required
CCARS	Multimodal	General $T$	Rejection & Squeeze	Required, but not always
GARS	Multimodal	Logarithm	Rejection	Not required

본 절에서 고려하는 모의 실험은 통계 프로그래밍 언어 R을 통해 시행하였으며, 각 방법간의 알고리즘 구현과 비교 그래프 생성 모두 R을 통하여 다음과 같은 방식으로 분석하였다. 단, CCARS의 구현에 있어서는 CCARS 방법이 제안된 Görür와 Teh (2011) 논문에 첨부된 MATLAB 프로그램을 바탕으로 구현하였다. 먼저, 각 방법론들의 적합성과 효율성과 비교하기 위해 목표 분포가 로그-오목 (log-concave)인 경우와 다봉성 함수인 경우로 나누어 모의실험을 진행하였다. 로그-오목 함수의 경우 적합성 및 효율성 측면에 있어서 ARS와 타 방법론간의 비교 실험을 실시하였다. 이러한 모의 실험을 통하여, 다봉성 함수에 적용하기 위해 고안된 난수 생성기의 경우 로그-오목 함수에 적용하였을 때 어떠한 성능 변화를 가져오는지 알아보고자 하였다. 아울러, 다봉성 함수의 경우에서도, 같은 방식으로 적합성 비교를 실시하였고, ARS가 다봉성 특징을 갖는 목표 분포에 부적합하다는 결론을 바탕으로 효율성 비교에 있어서는 ARS를 제외하였다. 적합성에 대한 비교는 각 방법론을 통해 얻은 표본들의 분포 그래프와 목표 분포의 그래프를 이용하여 실시하였다. 또한 콜모고로프-스미르노프 (Kolmogorov-Smirnov, KS)검정을 이용하여 적합성에 대한 판단을 강화하였다. 목표 분포 그래프와의 시각적 유사성이 클수록 적합성 측면에서 효과적인 방법론이 볼 수 있고, KS 검정에서의 높은 유의 확률은 두 분포의 동일성을 추론하는 귀무 가설을 지지한다. 효율성의 경우 특정 크기의 표본을 생성하기 위해 사용된 총 표본 후보의 개수를 채택률 (acceptance rate = number of sample candidates accepted / total number of sample candidates)의 형태로 측정하여 판단하였다. 또한 특정 크기의 표본을 생성하는데 사용된 지지점의 개수를 보조 지표로 이용하였다. 모의실험결과에서는 적합성을 확인하기 위해서 표본의 크기가  $n = 1000$ 인 경우를 고려하였고 효율성에서는 표본의 크기가  $n = 500$ 을 고려하였으며 아울러 GARS와 CCARS간의 효율성을 추가적으로 살펴보기 위해서  $n = 1000$ 인 경우까지 증가시켜 보았다. Intel(R) Core(TM) i5-3470 CPU 3.20 GHz (4 CPUs) 프로세서와 4096MB RAM 환경에서 모의실험을 진행하였다.

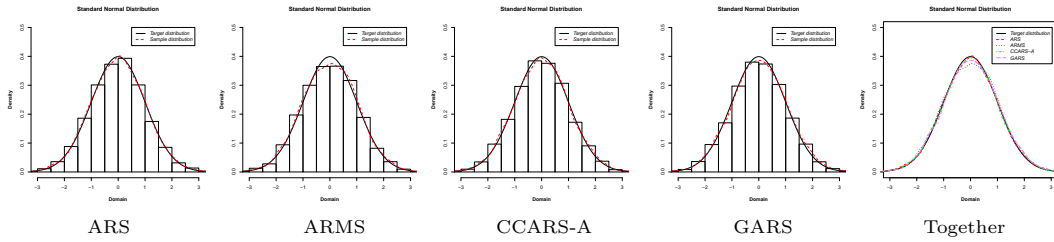
### 3.1. 적합성 비교 : 로그-오목 목표 함수

로그-오목 함수에 대한 모의실험은 두 가지 분포를 이용하여 실시하였다. 먼저 대표적 로그-오목 함수인 표준 정규 분포를 이용하여 표본 생성을 진행하였다. 또한 좌/우 비대칭이며 로그-오목인 함수를 아래와 같이 정의하여 추가 실험을 실시하였다.

$$p_0(x) \propto p(x) = x^4 \exp\left\{-\frac{x}{2}\right\}, \quad 1 \leq x \leq 30. \quad (3.1)$$

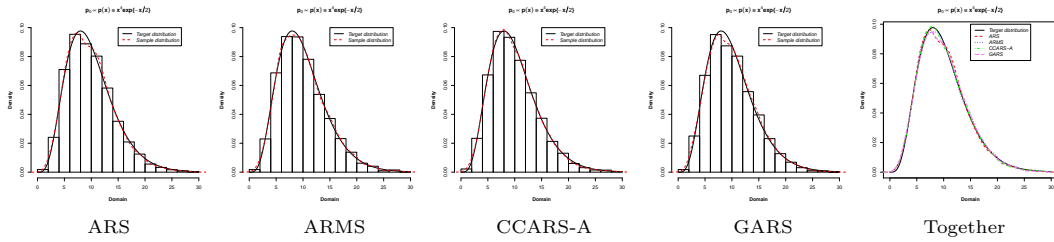
첫 번째로 적합성을 판단하기 위해 각각의 방법론으로부터 크기가 1000인 표본을 총 5회 반복하여 추출하였다. 해당 표본을 기반으로 히스토그램과 확률밀도함수를 구하였으며, 이를 목표 분포의 확률밀도함수 그래프와 비교함으로써 알고리즘에 대한 적합성을 판단하였다. 또한 표준 정규 분포와의 적합도 검정과 식 (3.1)의 비대칭 함수와의 적합도 검정을 위해 KS 검정법을 이용하였다.





**Figure 3.1** Comparisons of random samples from the standard normal distribution using ARS, ARMS, CCARS-A and GARS with the standard normal density (target) function

Figure 3.1은 목표 함수를 표준 정규 분포로 설정했을 때의 적합성 비교를 위한 그래프이다. 먼저 ARS와 ARMS, CCARS-A, GARS를 통해 얻은 표본들을 대상으로 히스토그램을 구하고, 이에 해당하는 확률밀도함수를 계산함으로써 목표 분포와의 그래프를 통한 비교를 진행하였다. ESARS와 CCARS-M의 경우 변곡점에 대한 정보가 필요하기 때문에 제외하였다. Figure 3.1에 나타난 바와 같이, 각 표본들의 히스토그램은 목표 함수인 표준정규분포 확률밀도함수와 동일한 형태를 보여주고, 확률밀도 값 또한 매우 유사함을 알 수 있고, 목표 분포 그래프와 각 방법론으로부터 구한 표본 분포 그래프들을 동시에 비교하였을 때도 전체적으로 비슷한 결과를 보여주고 있음을 알 수 있다.



**Figure 3.2** Comparisons of random samples from the true distribution of (3.1) using ARS, ARMS, CCARS-A and GARS with the true probability density (target) function

Figure 3.2는 목표 확률밀도함수를 식 (3.1)과 같이 설정하였을 때의 적합성 비교 그래프이다. 표준 정규 분포를 통한 비교에서와 마찬가지로 각 방법론을 통해 얻은 표본들의 히스토그램을 구하고 이를 이용하여 확률밀도함수를 계산함으로써 목표 분포와의 비교를 진행하였다. Figure 3.2에 나타난 바와 같이, 각 표본들의 히스토그램은 목표 분포 함수인 식 (3.1)의  $p_0(x)$ 와 동일한 형태를 보여주고 있으며, 확률밀도 값 또한 유사함을 알 수 있다. ARS가 상대적으로 다소 저조한 성능을 보이고 있으나, 전체적으로 네 가지 방법론 모두 식 (3.1)을 확률밀도함수로 갖는 표본을 생성하기 위한 적절한 난수생성기로 볼 수 있다.

**Table 3.2** Results of Kolmogorov-Smirnov test for the case with log-concave target distributions

Target distribution	Standard normal distribution		$p_0(x) \propto p(x) = x^4 \exp\{-x/2\}$	
Method	Test statistic	P-value	Test statistic	P-value
ARS	0.007	0.970	0.015	0.186
ARMS	0.013	0.361	0.008	0.891
CCARS-A	0.008	0.902	0.012	0.518
GARS	0.014	0.277	0.008	0.898

Figure 3.1과 3.2와 같이 생성된 표본의 히스토그램과 실제 분포함수간의 그래프를 통해 시각적으로 난수생성기의 적합성을 파악하는 방식 뿐만 아니라, Table 3.2에서는 각 방법론을 통해 얻은 표본들을

이용하여 목표 분포와의 통계적 가설 검정을 고려하였고, 구체적으로 콜모고로프-스미르노프 (KS) 검정을 이용하여 적합도 검정을 실시하였다. Table 3.2에 요약된 바와 같이, 네 가지 각 방법론 모두 귀무 가설 - 생성된 표본과 실제 확률분포가 동일하다 - 하에서의 높은 유의확률을 나타내고 있으며, 이를 통해 ARS, ARMS, CCARS-A, GARS 모두 두 가지 로그-오목 함수로부터의 난수 생성에 있어서 적합한 방법론임을 확인할 수 있었다.

### 3.2. 효율성 비교 : 로그-오목 목표 함수

앞 절에서 살펴본 적합성 비교 뿐 만 아니라, 본 절에서는 각 방법론을 통한 두 가지 로그-오목 목표 분포를 따르는 난수 생성에 있어서의 효율성을 살펴보고자 한다. 효율성을 판단하기 위해 각 방법론으로부터 크기가 500인 표본을 총 5회 반복하여 추출하였고, 이와 동시에  $i \in \{1, \dots, 500\}$  번째 표본이 만들어지는 시점에서 총 소요된 표본 후보의 개수를 이용하여 채택률을 계산하였다. 즉, 1회 반복 시마다 500개의 채택률이 계산되었으며 이를 총 5회에 걸쳐 획득하였다. 다음으로  $i$  번째 시점의 채택률 대표값을 산정하기 위해,  $i$  번째 표본에 해당하는 5개 채택률에 대하여 평균을 계산하였다. 지지점의 개수 역시 시점 별로 500개가 생성되며, 본 시뮬레이션이 5회 반복임을 감안하여 평균을 통해 시점 별 지지점 개수의 대표값을 산정하였다. Figure 3.3과 3.4는 목표 분포가 표준 정규 분포일 때와 식 (3.1)을 따르는 두 가지 경우에서의 각 난수 생성 방법에 대한 효율성을 비교하는 그래프이다.

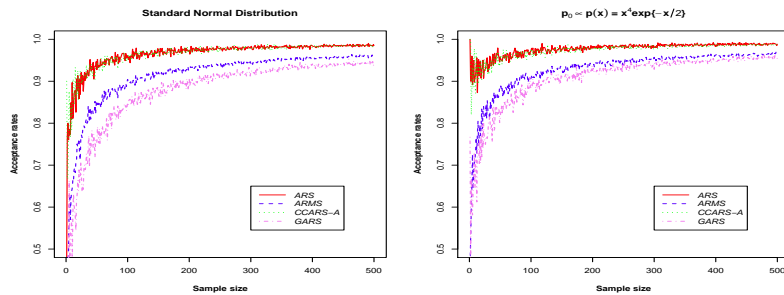


Figure 3.3 Acceptance rates of random variables generated from two log-concave target function

구체적으로, 표본 크기  $n$ 이 증가할 때,  $n = 1, 2, \dots, 500$ , 각각의 경우에서의 채택률과 지지점 개수를 나타낸 그래프로, 앞 절과 마찬가지로 ARS와 ARMS, CCARS-A, GARS의 경우에 대해 비교를 실시하였다. 채택률이 낮을 경우 동일한 크기의 표본 생성에 있어 더 많은 표본 후보를 필요로 하게 되며, 이를 통해, 채택률은 알고리즘의 시행 횟수를 결정하는 요인임을 알 수 있다. 따라서 높은 채택률을 갖는 방법론일수록, 더 적은 표본 후보를 통해 원하는 크기의 표본 생성이 가능하며 전체 알고리즘의 시행 횟수 또한 감소하게 된다. 알고리즘의 반복 시행을 통해 제안 분포가 목표 분포에 가까워지므로 필요로 하는 표본의 크기가 증가할수록 채택률은 증가하게 되며 일정 크기 이상의 표본 생성에 대해서는 1에 가까운 채택률을 갖게 되며, 이러한 사실들은 Figure 3.3의 채택률 (acceptance rate)이 표본의 크기가 커질 수록 채택률이 1에 수렴함을 통해서도 확인할 수 있다. 특히 Figure 3.3의 결과는, 제안 분포가 표본 생성 과정에서 계속적으로 개선되기 때문에 나타나는 ARS와 CCARS-A 방법이 갖는 장점이라고 할 수 있으며, 실제로 Figure 3.3에서 알 수 있듯이 일정 수준 이상에서는 표본으로의 포함 확률이 1에 가깝기 때문에, 크기가 큰 표본 추출에 있어서도 빠르고 효율적으로 표본을 생성할 수 있다. 구체적으로, ARS와 CCARS-A가 ARMS나 GARS에 비해 상대적으로 높은 채택률을 갖고 있음을 볼 수 있는데, 이는 해당 방법론 중 ARS와 CCARS-A에 존재하는 스퀴즈 테스트의 영향력에 기인한 것으로 보인다. 즉, ARS와 CCARS-A에서는 하위 덮개를 이용하여 스퀴즈 테스트를 실시하기 때문에 ARMS나

GARS에 비해 제안 분포가 빠른 속도로 목표 확률밀도함수와 근접해지며, 일정 시점에서의 상위 덮개는 ARMS나 GARS의 상위 덮개보다 목표 분포에 가깝게 형성됨을 알 수 있다. 또한 표본 후보 추출 후 리젝션 테스트를 진행함에 있어서도 ARS와 CCARS-A의 표본 후보가 더 높은 통과 확률을 보이며, ARMS와 GARS의 상대적으로 낮은 채택률은 표본 후보 생성 횟수의 증가를 비롯하여 알고리즘의 반복 시행의 수에 대한 증가를 초래할 것으로 예상된다. 특히 GARS는 비교하는 방법 가운데 가장 최근에 제시된 방법임에도 불구하고 스퀴즈 테스트를 통한 제안 분포의 개선이 이루어 지지 않기 때문에 CCARS-A에 비해서 효율성 측면에 있어서 떨어짐을 확인할 수 있었다. 그러나, GARS는 Martino와 Miguez (2011)에서 제안된 바와 같이, 난수생성기의 성능 개선에 초점을 맞추기 보다는, 변곡점에 대한 계산 없이 다봉성 목표 함수에 적용 가능한 난수 생성기이기 때문에, 모의실험 결과와 같이 효율성은 떨어질 수 있지만, 변곡점 계산이 복잡할 때 사용하는 것이 효과적이고 또한 표본의 크기가 큰 경우에는 다른 방법론과의 효율성 차이가 크지 않기 때문에 변곡점 계산이 없는 GARS가 더욱 유용할 것이다.

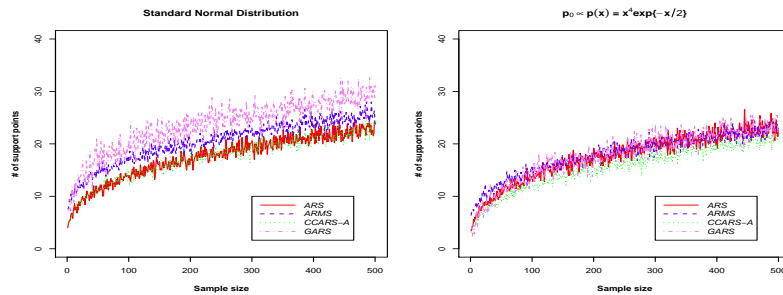


Figure 3.4 Number of support points for random variables generated from two log-concave target function

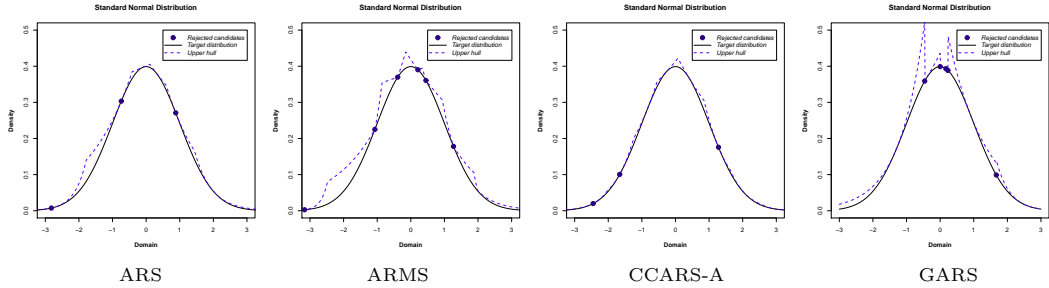
채택률뿐만 아니라 특정 크기의 표본을 생성하는데 사용된 지지점의 개수를 효율성의 지표로 고려하였으며, Figure 3.4의 결과에서 알 수 있듯이 CCARS-A는 두가지 분포에서 모두, ARS는 표준정규 분포에서 각각 ARMS나 GARS보다 적은 수의 지지점을 필요로 하게 된다. 이는 스퀴즈 테스트를 통한 상위 덮개의 개선 속도 향상과 테스트 시행 횟수의 감소에 기인한 것으로, 이를 반영하는 ARS와 CCARS-A가 지지점의 개수에 있어서도 우수한 성능을 보이고 있으며, 이에 반해 GARS는 채택률의 경우와 마찬가지로 지지점의 개수에 있어서도 저조한 결과를 보임을 확인할 수 있었다. 결과적으로 ARS와 CCARS-A는 두 목표 함수에서 모두 ARMS와 GARS보다 높은 효율성을 보여주고 있다. 해당결과는 Figure 3.3과 3.4뿐만 아니라 이러한 결과들을 특정한 표본 크기에서 구체적으로 정리한 Table 3.3의 결과에서도 확인할 수 있다.

Table 3.3 Acceptance rates and the number of support points with different sample sizes ( $n$ )

Target distribution		Standard normal distribution							
Method		Acceptance rates				Support points			
		$n = 200$	$n = 300$	$n = 400$	$n = 500$	$n = 200$	$n = 300$	$n = 400$	$n = 500$
ARS		0.975	0.982	0.984	0.985	17	21	21	24
ARMS		0.928	0.942	0.952	0.963	19	23	23	23
CCARS-A		0.976	0.979	0.983	0.987	18	21	21	23
GARS		0.905	0.923	0.941	0.945	20	25	27	31

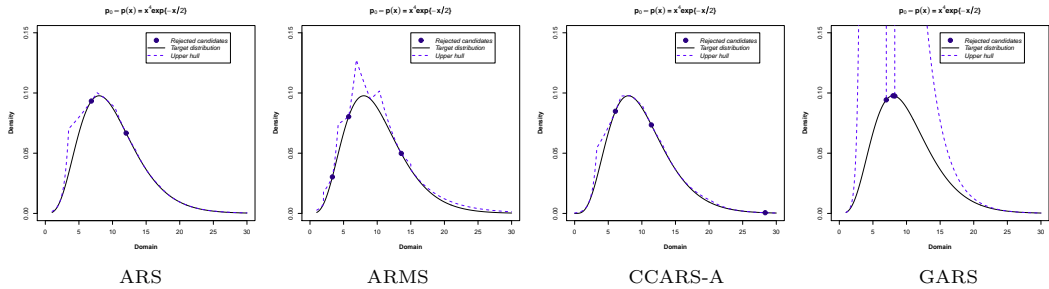
  

Target distribution		$p_0(x) \propto p(x) = x^4 \exp\{-x/2\}$							
Method		Acceptance rates				Support points			
		$n = 200$	$n = 300$	$n = 400$	$n = 500$	$n = 200$	$n = 300$	$n = 400$	$n = 500$
ARS		0.983	0.980	0.983	0.988	19	19	21	23
ARMS		0.937	0.957	0.962	0.964	18	21	21	23
CCARS-A		0.977	0.977	0.986	0.986	15	18	20	21
GARS		0.926	0.929	0.948	0.954	18	24	22	23



**Figure 3.5** Graphical display of the rejected sample candidates and the convergence of the proposal distribution for standard normal target distribution

추가적으로, Figure 3.5와 3.6은 두 가지 로그-오목 목표 분포에 대하여 각 방법론이 생성하는 상위 밀도를 통한 제안 분포가 목표 분포에 수렴하는지 살펴보기 위한 그래프로서, 20번의 시뮬레이션을 진행하였을 때 생성되는 제안 분포의 형태와 해당 시점까지 리젝션 테스트를 통해 탈락한 표본 후보 (rejected candidate)의 개수와 위치를 보여주고 있다. 전체적으로 ARS와 CCARS-A 방법이 ARMS와 GARS 방법보다 목표 분포에 가까운 제안 분포를 생성하고 있음을 알 수 있으며, 이는 탈락된 표본 후보의 수를 감소시키고 채택률을 상승시키는 ARS와 CCARS-A의 우수성을 입증하는 또 다른 실증적 근거로 사용될 수 있을 것이다. GARS 방법의 경우, 탈락 후보가 특정 값 부근에 모여 있음을 볼 수 있는데 이는 최초 해당 범위에서 제안 분포의 확률값이 크게 형성될 경우 그 범위 안에서 계속해서 난수가 발생하는 문제로 기인한 것으로서, 다른 방법들에서 유사한 결과가 나타날 수 있다고 하겠다. 다만, 해당 부분의 제안 분포를 개선하는 방법에 있어 ARS나 CCARS-A와 같은 방법들은 탈락 후보 위치에서의 할선을 이용함으로써, 지나치게 크게 형성된 확률 값을 한 개의 탈락 후보를 통해 대폭 감소시키는 반면에, GARS는 지지점들과 탈락된 후보 표본을 통해 구간을 계속적으로 세분화함으로써 제안 분포를 목표 함수에 근사시키게 된다. 다시 말해서 GARS의 경우, 과도하게 크게 형성된 제안 분포의 확률 값을 감소시키기 위해 해당 부분에서의 많은 표본 생성과 이를 통한 구간 세분화를 필요로 하게 되며, 이는 특정 부분에서의 탈락후보들의 군집화를 초래할 것이며, 탈락된 표본 후보를 통한 제안 분포 개선에 있어서도 타 방법론보다 개선 속도가 느려지게 됨을 알 수 있다.



**Figure 3.6** Graphical display of the rejected sample candidates and the convergence of the proposal distribution for  $p_0(x) \propto p(x) = x^4 \exp\{-x/2\}$

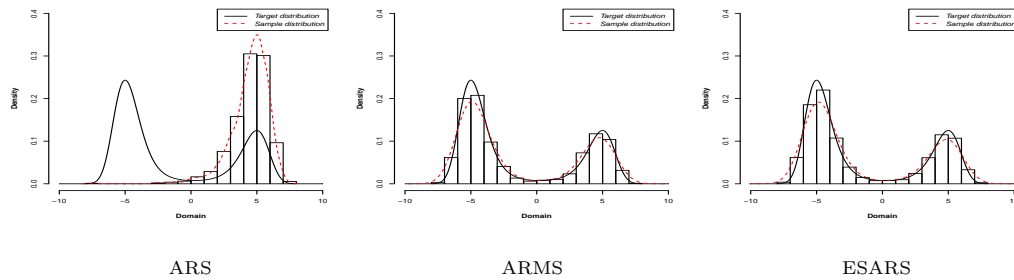
**3.3. 다봉성 함수를 통한 실증적 비교**

앞 절에서 고려했던 두가지 로그-오목 함수는 최빈값 (mode)이 하나인 경우였으나, 본 절에서는 추가적인 모의실험으로서, 목표 함수가 여러가지 최빈값을 갖게되는 다봉성 (multi-modal)인 경우를 고려하

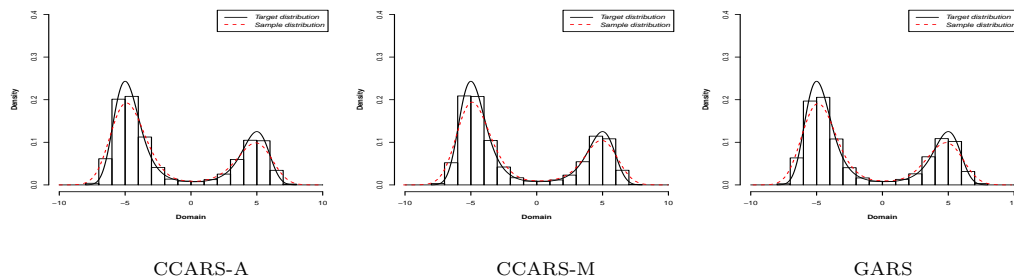
도록 한다. 구체적으로, 다음과 같은 다봉성 목표 함수를 사용하며,

$$p_0(x) \propto p(x) = \exp \left\{ - \left( \frac{1}{200}x^4 + \frac{1}{750}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{10}x \right) \right\}, \quad -10 \leq x \leq 10. \quad (3.2)$$

앞 절의 로그-오목 함수에 대한 모의 실험과의 모든 과정과 절차를 동일하게 수행하도록 하고, 앞 절에서 살펴보았던 바와 마찬가지로 각 난수 생성방법에서의 적합성과 효율성을 비교해보도록 한다. 다만, 앞 절의 로그-오목 함수에서의 경우와는 다르게, 다봉성 목표 함수에서의 경우에는 변곡점의 정보가 필요한 ESARS와 CCARS-M 방법도 적용이 가능하므로, 본 절에서 고려하는 실증적 비교에 포함시키도록 한다.



**Figure 3.7** Comparisons of random samples using ARS, ARMS, and ESARS with the true probability density (target) function  $p_0(x) \propto p(x) = \exp \left\{ - \left( \frac{1}{200}x^4 + \frac{1}{750}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{10}x \right) \right\}$



**Figure 3.8** Comparisons of random samples using CCARS-A, CCARS-M, and GARS with the true probability density (target) function  $p_0(x) \propto p(x) = \exp \left\{ - \left( \frac{1}{200}x^4 + \frac{1}{750}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{10}x \right) \right\}$

Figure 3.7과 3.8은 목표 함수  $p_0(x) \propto p(x) = \exp \left\{ - \left( \frac{1}{200}x^4 + \frac{1}{750}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{10}x \right) \right\}$ 에 대한 각 방법론들간의 적합성 비교 그래프이다. 로그-오목 함수에서와 마찬가지로, 각 표본에 대한 히스토그램과 확률밀도함수를 생성하고 이를 목표 확률밀도함수 (3.2)와 비교함으로써 적합성을 판단하였다. Figure 3.7의 첫 번째 그래프는 ARS 방법을 적용한 결과로서, 목표 분포와 비교하였을 때, 다봉성 형태를 나타내지 못하고 큰 차이를 보였으며, 이를 통해 다봉성 분포 함수의 경우에는 ARS 방법이 적절치 못함을 확인할 수 있었다. ARS를 제외한 나머지 방법론들에 대해 살펴보면, Figure 3.7과 3.8에서 확인할 수 있듯이, 각 표본들의 분포 그래프는 목표 분포의 다봉성 형태를 포함하고 있고, ARS보다 적합성에 있어서 효과적인 방법론임을 알 수 있었으나, 최빈값들 주변에서의 확률밀도가 목표 분포와 다소 차이가 있음을 공통적으로 확인할 수 있었다.

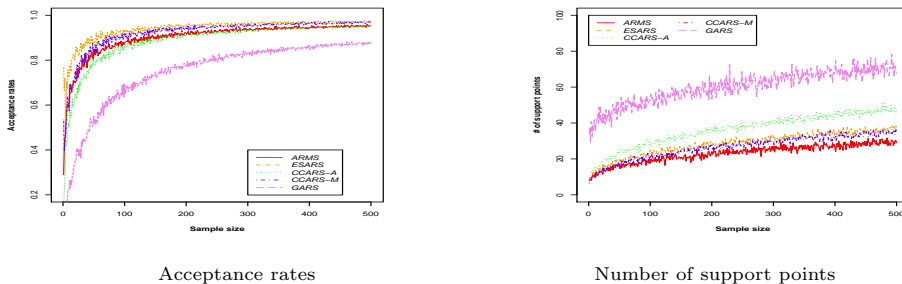
Table 3.4는 ARS를 포함한 총 6가지 방법론으로부터의 표본들에 대해 목표 분포와의 적합도 검정을 실시한 결과이다. 이를 위하여, KS 검정법을 이용하였으며, Figure 3.7의 결과와 마찬가지로, ARS는

높은 검정 통계량과 0에 가까운 유의확률을 나타내고 있음을 확인할 수 있었고, 다른 모든 방법들 모두, 귀무 가설 - 생성된 표본과 실제 확률분포가 동일하다 - 하에서의 높은 유의확률을 나타내고 있으며, 이를 통해 ARS는 다봉분포 함수에는 적절하지 않고, ARS를 제외한 나머지 방법들의 경우에는 다봉성 함수로부터의 난수 생성에 있어서 적합한 방법론임을 확인할 수 있었다.

**Table 3.4** Results of Kolmogorov-Smirnov test for the case with the multi-modal target distribution

Target distribution	$p_0(x) \propto p(x) = \exp \left\{ - \left( \frac{1}{200}x^4 + \frac{1}{750}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{10}x \right) \right\}$	
Method	Test Statistic	P-value
ARS	0.634	<0.001
ARMS	0.018	0.071
ESARS	0.014	0.297
CCARS-A	0.010	0.644
CCARS-M	0.009	0.847
GARS	0.010	0.682

Figure 3.9는 효율성을 비교하기 위하여, 표본 크기의 증가에 따른 채택률과 지지점 개수의 변화를 나타낸 그래프로서, ARS를 제외한 나머지 방법론들에 대해 비교를 실시하였다. 먼저 채택률에 대해 살펴보면, GARS가 타 방법론에 비해 현저히 낮음을 알 수 있고, 그 외 방법론들 중에는 ESARS가 가장 높은 채택률을 보이고 있으며, 표본의 크기가 증가함에 따라 CCARS-M이 ESARS와 유사한 값을 갖게 됨을 알 수 있었다. 또한, 일정 크기의 이상의 표본에 있어서의 채택률은 ESARS와 CCARS-M이 가장 높고, CCARS-A, ARMS와 GARS 순임을 알 수 있었다. 하위 덮개를 이용하여 스퀴즈 테스트를 실시하는 방법론이 제안 분포의 개선 속도를 증가시키기 때문에, 스퀴즈 테스트를 실시하지 않는 ARMS나 GARS 방법보다 효율성면에서 우수했으며, 특히 변곡점을 이용하여 함수 분해를 실시하는 방법론들이 채택률 측면에서 가장 우수한 결과를 나타냈다. GARS의 경우 스퀴즈 테스트를 미실시 할 뿐만 아니라 목표 분포를 로그 오목으로 근사한 함수에 대해 상위 덮개를 생성하기 때문에 성능이 오히려 저하됨을 확인할 수 있었다. 다만, GARS의 경우 동일한 크기의 표본을 생성함에 있어서는 타 방법론에 비해 더 많은 반복 시행이 필요하나, 목표 함수의 형태에 따라 변곡점에 대한 계산이 매우 복잡할 수 있기 때문에, 이러한 경우 변곡점을 이용하는 CCARS-M 방법보다 GARS 방법이 난수생성에 있어 유용할 수 있다. 지지점의 개수를 살펴보면 일정 크기의 표본 생성에 있어서 ARMS가 가장 적은 지지점을 필요로 하는 것을 알 수 있었으며, 이는 채택률에서 확인할 수 있듯이, 일정 크기의 표본 생성에 있어 리젝션 테스트를 통과하지 못한 표본 후보의 수는 비슷하지만, 스퀴즈 테스트 미시행으로 이를 통해 추가되는 지지점이 없기 때문에 발생한다. 비슷한 채택률을 보이는 ESARS와 CCARS-M은 지지점 개수에서 역시 비슷한 결과를 나타내었고, 이보다 낮은 채택률을 갖는 CCARS-A의 경우 리젝션 테스트에서 탈락된 표본 후보의 수가 더 많기 때문에 결국 ESARS보다 많은 지지점 개수를 필요로 하였다.



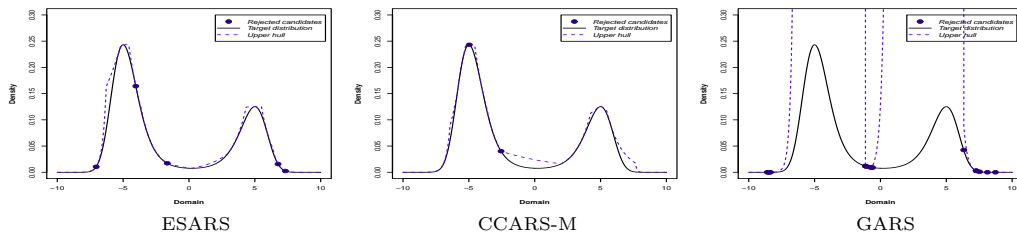
**Figure 3.9** Acceptance rates and the number of support points for  $p_0(x) \propto p(x) = \exp \left\{ - \left( \frac{1}{200}x^4 + \frac{1}{750}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{10}x \right) \right\}$

따라서, Figure 3.9의 채택률과 지지점의 개수, 두 가지 지표를 종합해 보았을 때, 식 (3.2)와 같이 다봉성 특징을 갖는 목표 분포에 대한 표본 생성의 경우, ESARS와 CCARS-M이 가장 효율적인 방법론이 볼 수 있고, ARMS의 경우 CCARS-A와 비슷한 채택률을 갖고 있으나 필요한 지지점 개수가 적기 때문에 ARMS, CCARS-A, GARS 순으로 효율성에 대한 순위를 부여할 수 있었다. 이러한 결과들은, 특정한 표본 크기에서의 채택률과 지지점의 개수를 정리한 Table 3.5에서 다시 한 번 확인할 수 있다.

**Table 3.5** Acceptance rates and the number of support points with different sample sizes( $n$ )

Target distribution	$p_0(x) \propto p(x) = \exp \left\{ - \left( \frac{1}{200}x^4 + \frac{1}{750}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{10}x \right) \right\}$							
	Acceptance rates				Support points			
	Method	$n = 200$	$n = 300$	$n = 400$	$n = 500$	$n = 200$	$n = 300$	$n = 400$
ARMS	0.919	0.937	0.945	0.953	24	25	26	29
ESARS	0.956	0.964	0.968	0.975	28	32	35	38
CCARS-A	0.914	0.932	0.945	0.953	37	41	46	48
CCARS-M	0.941	0.952	0.963	0.974	27	30	32	34
GARS	0.778	0.831	0.866	0.884	53	65	68	68

추가적으로, Figure 3.10은 식 (3.2)의 목표 분포에 대하여 각 방법론이 생성하는 상위 덮개를 통한 제안 분포가 목표 분포에 수렴하는지 살펴보기 위한 그래프로서, 20번의 시뮬레이션을 진행하였을 때 생성되는 제안 분포의 형태와 해당 시점까지 리젝션 테스트를 통해 탈락한 표본 후보 (rejection candidate)의 개수와 위치를 보여주고 있다. 이 경우, Figure 3.9를 통해 가장 효율적으로 나타난 두 가지 방법과 ESARS와 CCARS-M, 상대적으로 효율성이 떨어지는 GARS 방법을 고려하였다. Figure 3.9의 결과와 마찬가지로 ESARS와 CCARS-M이 목표 분포에 매우 가까운 제안 분포를 제시하고 있으며, 탈락된 표본 후보의 개수 역시 적음을 확인할 수 있었고, 이에 반해, GARS의 경우 제안 분포가 목표 분포에 비해 지나치게 크게 형성되고 있고, 탈락된 표본 후보의 개수가 매우 많았으며, 이를 통해 GARS의 경우, 제안 분포의 수렴 속도가 매우 느릴 것이라는 것을 예상할 수 있다. 따라서 Figure 3.10을 통해서, ESARS와 CCARS-M의 우수성과 GARS의 비효율성을 다시 한번 확인할 수 있었다.



**Figure 3.10** Graphical display of the rejected sample candidates and the convergence of the proposal distribution for  $p_0(x) \propto p(x) = \exp \left\{ - \left( \frac{1}{200}x^4 + \frac{1}{750}x^3 - \frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{10}x \right) \right\}$

마지막으로, 본 논문에서 고려한 방법론들 중 가장 최근에 제안된 CCARS와 GARS에 대하여 표본의 크기를 증가시켜 추가적인 모의실험을 고려해 보았다. 실제로 GARS 방법이 제안된 Martino and Miguez (2011)의 논문에서는 식 (3.2)의 다봉성 목표 함수로 난수를 생성하는 경우, GARS 방법이 ESARS에 비해서 표본의 크기가 작을 때는 채택률이 다소 떨어지지만 표본의 개수가 1000개까지 증가함에 따라 매우 비슷한 채택률을 보임을 실증적으로 확인하였다. 즉, GARS 방법은 변곡점에 대한 정보를 얻기 위해 이계 도함수 계산 등이 필요한 ESARS나 CCARS와는 달리 변곡점에 대한 계산이 필요 없다는 장점이 있으나, 효율성에서는 다소 저조한 성능을 나타냈지만, 해당 차이는 표본의 수가 증가함에 따라 줄어들음을 알 수 있었다. 따라서 추가적인 모의 실험에서는 목표 표본의 개수를 1000개까지 증

가시켜 GARS와 CCARS (로그 오목 목표 분포 : CCARS-A / 다봉성 목표 분포 : CCARS-M)간의 효율성과 채택률을 비교해 보았다. 반복적 실험의 결과 두 방법론간의 효율성 차이는 표본 크기가 증가함에 따라 계속적으로 감소함을 알 수 있었으며, 표본의 작은 경우와 달리, 일정 크기 이상의 표본에서는 GARS 방법이 CCARS 방법과 비슷한 성능을 보이고 있기 때문에 다봉성 함수의 변곡점을 찾는 것이 어려운 경우에는 GARS 방법이 더 선호될 것이라고 판단된다. Table 3.6은 목표 표본의 크기에 따른 두 방법간의 효율성 증가를 요약한 결과이다.

**Table 3.6** Acceptance rates and the number of support points with large size of sample ( $n$ )

		Standard Normal			Log concave (3.1)			Multi-modal (3.2)		
		500	800	1000	500	800	1000	500	800	1000
CCARS	Acceptance rates	0.986	0.990	0.991	0.983	0.993	0.992	0.969	0.976	0.982
	Support points	20	26	29	24	24	25	36	39	44
GARS	Acceptance rates	0.948	0.959	0.967	0.954	0.967	0.972	0.875	0.912	0.921
	Support points	29	35	39	24	29	29	72	78	82

#### 4. 결론

본 논문에서는 적응기각추출을 통한 난수 생성 방법을 이해하고, 이를 기반으로 하는 다양한 난수 생성기들에 대해 살펴보았으며, 실증적 분석을 통하여 성능비교를 실시하였다. 이러한 성능비교를 통하여 사용자들에게 실제 난수 생성에 있어서 ARS를 기반으로 하는 기존의 방법들을 이해하는데 조금이나마 도움을 주고자 하였으며 또한 상황에 따른 유용한 난수생성기의 선택에 지표를 제시하고자 하였다. 모의 실험을 통해 각 방법론들로부터 추출된 난수들과 목표 분포를 비교하는데 있어서 적합성과 효율성 두 가지 기준을 바탕으로 비교하였고, 목표 분포가 로그-오목인 경우와 다봉성을 갖는 경우 두가지를 고려하였다. 구체적으로, 각 방법론으로부터 얻은 표본들의 분포를 목표 분포 그래프와 비교하고, 추가적으로 콜모고로프-스미르노프 검정을 통해, 적합성 검정을 실시하였다. 또한, 표본 크기의 증가에 따른 채택률의 변화와 지지점의 개수를 통해 효율성을 살펴보고, 모의실험에 있어서 특정 시점에서의 제안 확률 밀도함수와 목표 함수를 비교하고, 탈락된 표본 후보의 개수를 통해 효율성을 재확인해보았다.

모의실험 결과, 목표 분포가 로그-오목인 경우에는 적합성에 대한 방법론들 간의 차이는 크지 않았고, 특정한 난수생성방법이 적합성 측면에서 더 우수하다고 판단하기에는 어려웠으나, 효율성에 있어서는 ARS와 CCARS-A가 채택률과 지지점 개수의 관점에서 더 효율적인 방법론임을 알 수 있었다. 목표 분포가 다봉성인 경우에는 ARS를 통해 생성된 표본 분포에서는 목표 분포의 다봉성 형태를 발견할 수 없었으며, 콜모고로프-스미르노프 적합도 검정에서 기각되어, 적절하지 않은 방법으로 확인되었으나, ARS를 제외한 나머지 방법론들은 목표 분포 그래프와 가까운 표본 분포를 제시하고 있으며, 적합성 측면에서는 방법론들 간의 큰 차이는 없었다. 그러나, 효율성 측면에서는 변곡점을 사용하여 함수 분해를 실시하는 ESARS와 CCARS-M 두 가지 난수생성방법이 채택률과 지지점의 개수 관점에서 가장 효율적인 방법론임을 확인할 수 있었고, GARS는 가장 낮은 채택률과 가장 많은 지지점 개수를 보이며 효율성 측면에서 성능이 다소 떨어짐을 알 수 있었다. 그러나, 표본의 크기가 증가함에 따라 GARS의 효율성은 개선되며, 모든 실험에서 우수한 효율성을 보였던 CCARS와의 효율성 차이가 점차 감소함을 확인할 수 있었다. 즉 표본의 크기가 커짐에 따라, 여전히 CCARS의 성능이 우수하기는 하나 GARS와의 성능 차이는 크지 않고, 오히려 변곡점에 대한 계산은 표본 생성 과정에 있어 장애요인이 될 수 있기 때문에 GARS 방법론은 다봉성 함수를 위한 난수생성기로 타 방법론보다 유용할 수 있을 것이다. 표본의 크기가 작은 경우에는, ESARS와 CCARS 방법을 사용하는 것이 효율적이지만 변곡점 계산에서의 복잡성을 동시에 고려하여 선택하는 것이 바람직할 것이다. 향후 보다 다양한 목표 함수를 고려하는 광범위



한 모의실험을 통한 추가적인 연구가 필요할 것이며, 아울러 적합성과 효율성에서 우수하며 동시에 변곡점 계산에서의 복잡성을 해결할 수 있는 대안적인 난수 생성 방법에 대한 개발은 매우 흥미롭고 기대되는 향후 과제라고 할 수 있다.

## References

- Choi, S. M., Kim, D. H., Shin, I. H., Kim, H. G. and Kim, S. G. (2011). Robust Bayesian meta analysis. *Journal of the Korean Data & Information Science Society*, **22**, 459-466.
- Choi, C. H. and Ko, B. W. (2014). Stochastic simulation of daily precipitation: A copula approach. *Journal of the Korean Data & Information Science Society*, **25**, 245-254.
- Evans, M. and Swartz, T. (1998). Random variable generation using concavity properties of transformed densities. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, **7**, 514-528.
- Gilks, W. R., Best, N. G. and Tan, K. K. C. (1995). Adaptive rejection Metropolis sampling within Gibbs Sampling. *Journal of the Royal Statistical Society : Series C (Applied Statistics)*, **44**, 455-472.
- Gilks, W. R. and Wild, P. (1992). Adaptive rejection sampling for Gibbs sampling. *Journal of the Royal Statistical Society : Series C (Applied Statistics)*, **41**, 337-348.
- Givens, G. H. and Hoeting, J. A. (2013). *Computational Statistics*, 2nd ed., Wiley Series in Computational Statistics, John Wiley & Sons, Inc., New Jersey.
- Görür, D. and Teh, Y. W. (2011). Concave-Convex adaptive rejection sampling. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, **20**, 670-691.
- Martino, L. and Míguez, J. (2011). A generalization of the adaptive rejection sampling algorithm. *Statistics and Computing*, **21**, 633-647.
- Mo, E. B. and Park, C. S. (2013). Application of quasi-Monte Carlo methods in multi-asset option pricing. *Journal of the Korean Data & Information Science Society*, **24**, 669-677.
- Park, K. Y., Kwon, G. C. and Kwon, Y. D. (1998). Uniformity and independency tests of pseudo-random number generators. *Journal of the Korean Data & Information Science Society*, **9**, 237-246.
- Sohn, J. K., Kim, H. J. and Kang, S. G. (1996). Convergence diagnostics for the Gibbs sampler. *Journal of Statistical Theory & Methods*, **7**, 1-12.

## Performance comparison of random number generators based on Adaptive Rejection Sampling<sup>†</sup>

Hyotae Kim<sup>1</sup> · Seongil Jo<sup>2</sup> · Taeryon Choi<sup>3</sup>

<sup>123</sup>Department of Statistics, Korea University

Received 24 February 2015, revised 12 March 2015, accepted 9 April 2015

### Abstract

Adaptive Rejection Sampling (ARS) method is a well-known random number generator to acquire a random sample from a probability distribution, and has the advantage of improving the proposal distribution during the sampling procedures, which update it closer to the target distribution. However, the use of ARS is limited since it can be used only for the target distribution in the form of the log-concave function, and thus various methods have been proposed to overcome such a limitation of ARS. In this paper, we attempt to compare five random number generators based on ARS in terms of adequacy and efficiency. Based on empirical analysis using simulations, we discuss their results and make a comparison of five ARS-based methods.

*Keywords:* Adaptive rejection sampling, log-concave function, multi-modal function, random number generator, simulations

---

<sup>†</sup> This research was supported by Basic Science Research Program through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Education, Science and Technology (No. 2013R1A1A2074463).

<sup>1</sup> Graduate student, Department of Statistics, Korea University, Seoul 136-701, Korea.

<sup>2</sup> Research professor, Department of Statistics, Korea University, Seoul 136-701, Korea.

<sup>3</sup> Corresponding author: Associate professor, Department of Statistics, Korea University, Seoul 136-701, Korea. E-mail: trchoi@korea.ac.kr