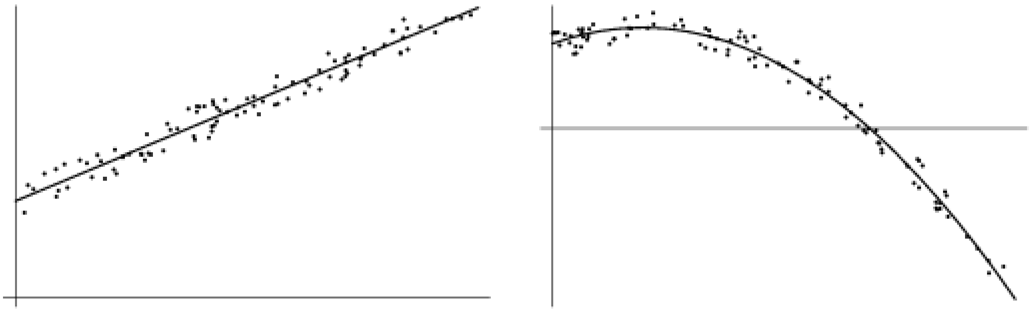
Least squares



Least squares란 측정 등을 통해 얻어진 여러 개의 데이터를 가장 잘 나타내는 수식의 형태를 아는 경우, 해당 수식과 데이터들의 오차의 제곱의 합을 최소로 하는 수식을 구하는 방법이다.

Least squares는 linear least squares와 non-linear least squares로 나눌 수 있다. Non-linear least squares의 경우 주로 문제를 linear equation 형태로 고친 후 linear least squares의 방법을 반복적으로 이용하여 푼다.

Linear least squares

어떤 식 $f(x)$와 데이터 (x_i, y_i)의 오차의 제곱은 다음과 같다.

$$R_i^2 = [y_i - f(x_i, a_1, a_2, \cdots, a_n)]^2$$

여기서 $f(x_i, a_1, a_2, \cdots, a_n)$란 계수가 $a_1, a_2, \cdots, a_n$인 x에 대한 식 $f(x)$에 측정값인 x_i을 대입했음을 의미한다. 오차의 제곱의 합은 다음과 같다.

$$R^2 = \sum_{i=1}^n[y_i - f(x_i, a_1, a_2, \cdots, a_n)]^2$$

이 때 R^2을 최소로 하는 조건은

$$\frac{\partial(R^2)}{\partial a_i} = 0$$

for $i = 1,2,\cdots,n$

이다. 즉, 미지수가 $a_1, a_2, \cdots, a_n$인 n개의 연립방정식을 푸는 형태가 된다.

가장 간단한 경우인 $f(a,b)=a+bx$를 예를 들면,

$$\begin{aligned} & R^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - (a+bx_i)]^2\\ & \frac{\partial(R^2)}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (a+bx_i)] \\ & \frac{\partial(R^2)}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (a+bx_i)]x_i \end{aligned}$$

이 equation은 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$\begin{aligned} & na + b \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ & a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{aligned}$$

이를 matrix form으로 다시 쓰면

\begin{displaymath} \left(\begin{array}{cc} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} a \\ b \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{array} \right) \end{displaymath}

위 식에서 왼쪽 matrix의 inverse를 구하여 양변에 곱해주면 계수 a, b를 구할 수 있다. 수치 해석에서 matrix의 inverse는 Gauss-Jordan elimination 등의 방법으로 구할 수 있다.

링크

http://mathworld.wolfram.com/LeastSquaresFitting.html

http://en.wikipedia.org/wiki/Least_squares