풀이

STEP II 2000, 문제 5

순수수학 • 최소제곱 근사

> **STEP II 2000, 5번 문제**
>
> 더 읽어 나가기 전에 문제부터 읽어 보자. 이 문제는 STEP Support Programme의 문제 데이터베이스에 있다:
>
> step.maths.org/questions/00-s2-q5

핵심 아이디어

제곱을 전개하면 최소화해야 할 양은 λ에 대한 이차식(quadratic)일 뿐이고, 그 계수는 고정된 수(f를 포함한 적분)이다. 완전제곱식(completing the square)으로 고치면 가장 좋은 λ와 가장 작은 오차를 한 번에 얻는다. 사인 함수의 예에서 요점은 n이 클 때 $\sin(\pi x/n)$이 원점을 지나는 직선과 거의 같다는 것이며, 작은 각에 대한 근사(small-angle approximation)가 이를 정확하게 만들어 준다.

풀이

λ의 최적값

다음과 같이 놓는다.

$$J = \int_0^1 x f(x)\,\mathrm{d}x, \qquad K = \int_0^1 (f(x))^2\,\mathrm{d}x.$$

이들은 λ에 의존하지 않는 상수이다. 제곱을 전개하고 $\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}$을 이용하면 다음을 얻는다.

$$\begin{aligned} I(\lambda) = \int_0^1 (f(x) - \lambda x)^2\,\mathrm{d}x &= K - 2\lambda J + \tfrac{1}{3}\lambda^2 \\ &= \tfrac{1}{3}(\lambda - 3J)^2 + K - 3J^2. \end{aligned}$$

제곱항은 결코 음수가 아니고 $\lambda = 3J$일 때에만 영이 되므로, $I(\lambda)$가 가장 작아지는 것은 정확히

$$\lambda = 3\int_0^1 x f(x)\,\mathrm{d}x,$$

일 때이며, 이것이 보이려던 것이다. (같은 이야기로, $I'(\lambda) = -2J + \frac{2}{3}\lambda = 0$에서 $\lambda = 3J$를 얻고, $I''(\lambda) = \frac{2}{3} > 0$이므로 최솟값임이 확인된다.)

잔차 오차

R^2은 I의 최솟값이고, 완전제곱식에 의해 이 값은 $K - 3J^2$이다. $J = \lambda/3$이므로 $3J^2 = \frac{1}{3}\lambda^2$이고, 따라서

$$R^2 = \int_0^1 (f(x))^2 \,\mathrm{d}x - \tfrac{1}{3}\lambda^2,$$

이며, 이것이 보이려던 것이다. (만약 미분으로 λ를 구했다면, $J = \lambda/3$을 $K - 2\lambda J + \frac{1}{3}\lambda^2$에 대입하여 $K - \frac{2}{3}\lambda^2 + \frac{1}{3}\lambda^2$을 얻는데, 이는 같은 결과이다.)

$f(x) = \sin(\pi x/n)$인 경우

계산을 깔끔하게 하기 위해 $a = \pi/n$으로 놓으면 $f(x) = \sin ax$이고 $n \to \infty$일 때 $a \to 0$이다. $u = x$, $\mathrm{d}v = \sin ax \,\mathrm{d}x$로 부분적분(integration by parts)하면

$$\begin{aligned}\int_0^1 x \sin ax \,\mathrm{d}x &= \Big[-\frac{x\cos ax}{a}\Big]_0^1 + \frac{1}{a}\int_0^1 \cos ax \,\mathrm{d}x \\ &= -\frac{\cos a}{a} + \frac{\sin a}{a^2},\end{aligned}$$

이므로

$$\lambda = \frac{3(\sin a - a\cos a)}{a^2}.$$

> **생각해 보기** $\sin\theta$의 근사에서 단순히 $\sin\theta \approx \theta$만 쓰지 않고 θ^3항까지 필요한 이유는 무엇인가?

$\sin a \approx a$와 $\cos a \approx 1$만 쓰면 분자는 $a - a = 0$이 되어 아무것도 알려 주지 않는다. 최고차 항들이 상쇄되고, 답은 그다음 차수에 들어 있다. 힌트의 두 근사를 모두 이용하면

$$\sin a - a\cos a \approx \left(a - \tfrac{1}{6}a^3\right) - a\left(1 - \tfrac{1}{2}a^2\right) = \tfrac{1}{3}a^3,$$

이고, 따라서 n이 클 때

$$\lambda \approx \frac{3\cdot\frac{1}{3}a^3}{a^2} = a = \frac{\pi}{n}$$

이다. 이것이 결과 (i)이다.

(ii)를 위해서는 K도 필요하다. $\sin^2 ax = \frac{1}{2}(1 - \cos 2ax)$를 이용하면

$$K = \int_0^1 \sin^2 ax \,\mathrm{d}x = \frac{1}{2} - \frac{\sin 2a}{4a}.$$

$n \to \infty$일 때 $a \to 0$이고 $\dfrac{\sin 2a}{2a} \to 1$이므로 $K \to \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$이다. 또한 $\lambda \approx \pi/n$이므로 $\lambda \to 0$이다. 따라서

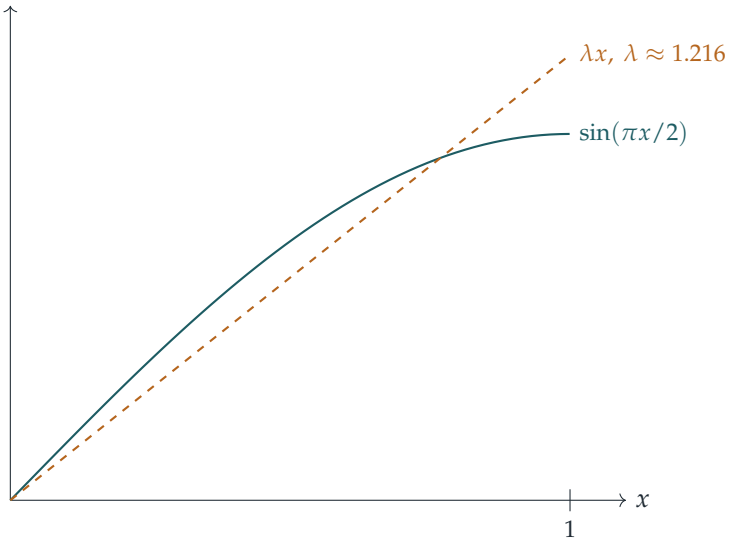
$$R^2 = K - \tfrac{1}{3}\lambda^2 \to 0 - 0 = 0,$$

이고, $R \geq 0$이므로 $\lim_{n\to\infty} R = 0$을 얻는다. 이것이 결과 (ii)이다.

사실 상쇄는 이보다 훨씬 강하다. $\sin 2a \approx 2a - \frac{4}{3}a^3$을 쓰면 $K \approx \frac{1}{2} - (\frac{1}{2} - \frac{1}{3}a^2) = \frac{1}{3}a^2$이고, $\frac{1}{3}\lambda^2 \approx \frac{1}{3}a^2$이기도 하다. 그러므로 R^2은 단지 작은 것이 아니라, f 자체의 크기인 K에 비해서도 작다. 직선이 f의 거의 전부를 담아낸다.

이런 결과가 예상되는 이유

$0 \leq x \leq 1$에서 각 $\pi x/n$은 0과 π/n 사이에 있고, n이 크면 이 각은 작다. 그러므로 구간 전체에서 $\sin(\pi x/n) \approx \pi x/n$이다. 즉 이 함수 자체가 $\lambda = \pi/n$인 일차함수 λx와 거의 같다. 따라서 가장 잘 맞는 직선의 기울기(gradient)는 π/n에 가까워야 하고, 근사는 사실상 완벽해져야 하므로 잔차(residual) 오차는 영으로 수렴(converge)해야 한다. 아래 그림은 $n = 2$일 때에도 곡선이 직선에서 크게 벗어나지 않음을 보여 준다.



검산

- 이미 $f(x) = cx$라면 $\lambda = 3c\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = c$이고 $R^2 = \frac{1}{3}c^2 - \frac{1}{3}c^2 = 0$이다. 당연히 그래야 한다.
- 수치로 보면, $n = 10$일 때 정확한 공식은 $\lambda = 0.31107$을 주며, 이는 $\pi/10 = 0.31416$과 비교된다. $n = 100$일 때 비 $\lambda/(\pi/n)$은 0.99990이다.

- $n = 10$일 때 수치 적분(quadrature)으로 $R^2 \approx 6.0 \times 10^{-7}$을 얻는 반면 $K \approx 0.032$이므로, 잔차는 f에 비해 정말로 아주 작다.

흔한 실수

- $\sin a \approx a, \cos a \approx 1$에서 멈추고 $\lambda \approx 0$을 얻는 것. 참이긴 하지만 쓸모가 없다. 삼차항을 남겨 두어야 한다.
- $\lambda = 3\int_0^1 xf(x)\,\mathrm{d}x$의 3이 $\int_0^1 x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{3}$에서 나온다는 것을 잊는 것.

STEP 너머

이것은 최소제곱 근사(least-squares approximation)이며, 실제로는 기하학이다. $[0,1]$ 위의 함수들을 "내적"(dot product) $\langle f, g\rangle = \int_0^1 fg\,\mathrm{d}x$를 갖는 벡터(vector)로 생각하자. 그러면 λx는 f를 x가 생성하는 직선 위로 정사영(orthogonal projection)한 것이고, $R^2 = K - \frac{1}{3}\lambda^2$은 피타고라스(Pythagoras) 정리이다. 전개를 한 단계 더 밀고 나가면 $R^2 \approx a^6/1575$임을 알 수 있는데, 이는 x^3항에서 x 방향 성분을 사영으로 제거한 데서 나온다. 스트랭(Strang)의 *Introduction to Linear Algebra*(선형대수 입문)는 사영과 최소제곱을 자세히 다루며, 같은 아이디어는 푸리에 급수(Fourier series)로 이어진다.

Beyond STEP 풀이: https://beyondstep.keithmcnulty.org/ko/. 풀이 글은 CC0 1.0이다. 문제 자체의 저작권은 © Cambridge University Press & Assessment에 있으며 여기에 싣지 않는다. 영어 원문을 기계 번역하였으며 아직 검토되지 않았다.