

통계계산에서의 갱신 알고리즘에 관한 연구¹⁾

전 홍 석²⁾

< 요약 >

개인용 컴퓨터의 보급이 급격히 늘어남에 따라 자료의 통계분석에 개인용 컴퓨터가 많이 이용되고있다. 컴퓨터의 하드웨어가 하루가 다르게 발전하고 있음으로 웬만큼 많은 양의 자료를 분석하는 데에는 컴퓨터의 기억용량이나 처리속도등이 문제되지 않는다. 자료가 축차적(sequentially)으로 주어질 때 어떤 통계량을 계산하기 위하여 매번 전체 자료를 다시 읽어야 한다면 이는 번거로운 작업이 될 것이며 기억용량의 낭비임에 틀림없다. 이러한 문제점을 S/W 적인 입장에서 해결하고자 하는 노력이 바로 갱신 알고리즘 (Updating Algorithm)이다.

이 연구에서는 몇 가지 통계량에 대한 갱신 알고리즘들을 알아보고 그들의 특성을 밝힘으로서 소형 및 개인용 컴퓨터를 이용하여서도 많은 양의 자료분석이 가능하도록 하고자 한다.

1. 기초 통계량

표본 $\{X_1, X_2, \dots, X_m\}$ 이 주어졌을 때 가장 보편적인 통계량은 다음의 (1) 과 (2) 로 계산되는 평균과 분산이다.

$$\bar{X} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m X_i \quad (1)$$

$$s^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (X_i - \bar{X})^2 = \frac{1}{m-1} S \quad (2)$$

이 절에서는 \bar{X} 와 식(2)에서 S 로 표현한 수정제곱합 (corrected sum of squares)만을 생각하기로 한다. 식(2)에 의한 분산의 계산법을 일반적으로 교과서적 알고리즘 (Textbook Algorithm) 이라고 부르는데, 이 공식을 이용하기 위하여는 자료를 두 번 읽어야 하기 때문에 자료의 양이 많거나, 컴퓨터의 성능이 떨어지는 경우에는 어려움

1) 본 연구는 한국과학재단의 지원을 받아 이루어졌음(883-0105-008-1).

2) 402-751 인천직할시 남구 용현동 253, 인하대학교 통계학과

Internet : hsjorn@dragon1.inha.ac.kr

이 있다. 따라서 이와 동치(同値)인 다음의 식을 이용하여 소위 간편계산법이라 부르는 공식이 알려져 있기도 하다,

$$S = \sum_{i=1}^m X_i^2 - \frac{1}{m} \left(\sum_{i=1}^m X_i \right)^2 . \quad (3)$$

식(2)에 비하여 식(3)은 자료를 한번만 읽어도 계산이 가능하다는 장점이 있으나, 컴퓨터의 유효 숫자 처리능력에 따라서는 부정확할 수 있고, 또한 경우에 따라서는 음수의 값이 계산될 염려도 있다.

이러한 각각의 장단점을 보완하기 위하여 다음의 알고리즘이 제안되고 있다. 먼저 T_y , M_y , S_y 를 다음과 같이 정의하자,

$$T_y = \sum_{k=i}^j X_k , \quad M_y = \frac{1}{(j-i+1)} T_y ,$$

$$S_y = \sum_{k=i}^j (X_k - M_y)^2 . \quad (4)$$

식(4)의 T_y , M_y , S_y 는 각각 자료 $\{X_1, X_2, \dots\}$ 의 부분집합 $\{X_k\}_{k=i}^j$ 에 대한 합, 평균, 제곱합을 나타내고 있다. 크기 $m+n$ 인 자료를 $\{X_i\}_{i=1}^m$ 과 $\{X_i\}_{i=m+1}^{m+n}$ 로 분할 하였을 때, 각각에서의 T, S 는 다음과 같이 주어진다,

$$T_{1,m} = \sum_{i=1}^m X_i , \quad T_{m+1,m+n} = \sum_{i=m+1}^{m+n} X_i$$

$$S_{1,m} = \sum_{i=1}^m \left(X_i - \frac{1}{m} T_{1,m} \right)^2 , \quad (5)$$

$$S_{m+1,m+n} = \sum_{i=m+1}^{m+n} \left(X_i - \frac{1}{n} T_{m+1,m+n} \right)^2 .$$

자료 전체로부터의 $T_{1,m+n}$ 과 $S_{1,m+n}$ 이 각 부분집합으로부터 계산된 T, S 와 어떤 관계가 성립하는가를 알게되면, m 과 n 을 적당히 조정함으로써 갱신 알고리즘을 이용한 여러가지 계산법을 구할 수 있다.

$$T_{1,m+n} = T_{1,m} + T_{m+1,m+n}$$

$$\begin{aligned}
 S_{1,m+n} &= \sum_{i=1}^{m+n} (X_i - M_{1,m+n})^2 = \sum_{i=1}^{m+n} \left(X_i - \frac{1}{m+n} T_{1,m+n} \right)^2 \\
 &= \sum_{i=1}^m \left\{ (X_i - M_{1,m}) - \frac{mT_{m+1,m+n} - nT_{1,m}}{m(m+n)} \right\}^2 \\
 &\quad + \sum_{i=m+1}^{m+n} \left\{ (X_i - M_{m+1,m+n}) - \frac{nT_{1,m} - mT_{m+1,m+n}}{n(m+n)} \right\}^2 \\
 &= S_{1,m} + S_{m+1,m+n} + \frac{(nT_{1,m} - mT_{m+1,m+n})^2}{mn(m+n)}
 \end{aligned} \tag{6}$$

Nash(1981)의 알고리즘은 위의 식 (6)에서 $n=1$ 인 경우로서, 자료가 하나씩 순차적으로 입력될 적마다 계산 결과를 줄 수 있다. Chan 등(1982)에 의하여 제안된 pairwise 알고리즘 역시 위의 식 (6)에서 $m=n$ 인 해당된다. 전체 자료의 크기나 계산값의 필요 정도에 따라서 m, n 의 값을 정할 수 있다. $n=1$ 인 경우는 자료가 입력될 때 마다 T 와 S 를 갱신하는 것으로 가장 자주 쓰이는 계산 방법으로서 다음과 같이 정리될 수 있다,

$$\begin{aligned}
 T_{1,m+1} &= T_{1,m} + X_{m+1} \\
 S_{1,m+1} &= S_{1,m} + \frac{1}{m(m+1)} (T_{1,m} - mX_{m+1})^2
 \end{aligned} \tag{7}$$

m, n 의 값을 정할 때에 부동점표시에 의한 오차(rounding error)역시 중요한 요인이 되고 있는데, Youngs 과 Cramer(1971)는 여러 경우에 따른 오차의 범위를 시뮬레이션의 결과로 보여주고 있다. 여러가지 알고리즘을 비교할 때에는 정확성(accuracy), 계산의 최소비용(least computational costs), 최소 입출력(minimal I/O), 최소 저장(least storage)등을 고려하여야 된다. 그러나 이러한 여러 가지 조건을 모두 만족하는 알고리즘은 알려져 있지 않음으로 사용자의 목적에 따라서 적당한 알고리즘을 선택하여야 할 것이다.

2. 선형 모형

Chambers (1971), Albert와 Sittler(1966) 등 많은 학자들에 의하여 제안된 선형모형에서의 갱신알고리즘은 Cholesky 분해, QR 분해 및 특이치분해(singular value decomposition)등 행렬의 분해법에 근거하고있다. Placket(1950)은 최대계수(full rank) 계획행렬이 축차적으로 주어질 경우에 적용할 수 있는 갱신알고리즘을 제안하고있다. 계획행렬(design matrix) X_1 과 이에 따른 종속변수 Y_1 이 조사되었을때 다음의 선형모형식을 세울수 있다.

$$Y_1 = X_1\beta + \varepsilon \tag{8}$$

여기서 Y_1 은 $m \times 1$ 벡터, X_1 은 계수(rank) p 인 $m \times p$ 계획행렬, β 는 미지의 $p \times 1$ 계

수 벡타이고 ε 은 $m \times 1$ 의 오차 ($\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$) 벡타이다. 이 경우 필요한 계산은 β 의 추정치, 그의 공분산행렬 그리고 잔차제곱합(residual sum of squares) 등이다. 최소제곱법에 의한 이들의 계산결과는 다음과 같이 널리 알려져 있다.

$$b_1 = \hat{\beta} = (X_1' X_1)^{-1} X_1' Y_1$$

$$\text{Var}(b_1) = \sigma^2 (X_1' X_1)^{-1} \quad (9)$$

$$RSS_1 = (Y_1 - X_1 b_1)' (Y_1 - X_1 b_1)$$

이제 n 개의 자료(X_2, Y_2)가 추가로 얻어졌을때, $X' = (X_1', X_2')$, $Y' = (Y_1', Y_2')$ 로서 식(8) 과 같은 다음의 모형을 세워

$$Y = X\beta + \varepsilon \quad (10)$$

β 의 추정치, 공분산 행렬, 잔차제곱합을 다시 계산하지 않고 (9)의 결과를 구하고자 한다. 단 X_2 의 계수 역시 p 인 것으로 한다.

2.1 β 의 추정치와 공분산 행렬

모형 (10)에서 β 의 추정치를 $b = \hat{\beta}$ 라 하고 b 와 b_1 의 관계를 구하자. 먼저 다음의 기호들을 약속하고, 이를 이용하여 구하기로 한다.

$$C_1 = X_1' X_1, \quad C = X' X, \quad R_1 = X_2 C_1^{-1} X_2', \quad R = X_2 C^{-1} X_2' \quad (11)$$

$\text{Var}(b) = C^{-1} \sigma^2$, $\text{Var}(b_1) = C_1^{-1} \sigma^2$ 을 알고 있으므로 C_1^{-1} 와 C^{-1} 의 관계를 먼저 구하고, 이를 이용하여 $\hat{\beta}$ 의 순환 공식을 보이겠다. $I_n + R_1$ 은 양정치(positive definite) 행렬임으로 역행렬을 갖는다. 이를 구하기 위하여 다음의 계산이 필요하다.

$$C = X' X = X_1' X_1 + X_2' X_2 = C_1 + X_2' X_2$$

$$R_1 R = X_2 C_1^{-1} X_2' X_2 C^{-1} X_2' = X_2 C_1^{-1} (C - C_1) C^{-1} X_2' \quad (12)$$

$$= X_2 C_1^{-1} X_2' - X_2 C^{-1} X_2' = R_1 - R$$

즉

$$R_1 - R - R_1 R = 0 \quad (13)$$

이다. 따라서

$$I_n = I_n + R_1 - R - R_1R = (I_n + R_1)(I_n - R)$$

임으로

$$(I_n + R_1)^{-1} = I_n - R$$

이다. (12), (13)을 이용하여 다음을 계산할 수 있다.

$$\begin{aligned} (I_n + R_1)^{-1}X_2C_1^{-1} &= (I_n - R)X_2C_1^{-1} = X_2C_1^{-1} - RX_2C_1^{-1} \\ &= X_2C_1^{-1} - X_2C^{-1}X_2'X_2C_1^{-1} \\ &= X_2C_1^{-1} - X_2C^{-1}(C - C_1)C_1^{-1} = X_2C^{-1} \end{aligned} \quad (14)$$

윗 식의 양변에 $C_1^{-1}X_2'$ 을 곱하면

$$C_1^{-1}X_2'(I_n + R_1)^{-1}X_2C_1^{-1} = C_1^{-1}X_2'X_2C^{-1} = C_1^{-1}(C - C_1)C^{-1} = C_1^{-1} - C^{-1} \quad (15)$$

이 되어 공분산행렬에 대한 다음의 순환공식을 얻는다.

$$C^{-1}\sigma^2 = \{C_1^{-1} - C_1^{-1}X_2'(I_n + R_1)^{-1}X_2C_1^{-1}\}\sigma^2 \quad (16)$$

이제 β 의 추정치 b 에 대한 순환 공식은 다음의 과정을 거쳐서 구할 수 있다.

$$b = \hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y = C^{-1}X'Y \quad (17)$$

$$X'Y = X_1'Y_1 + X_2'Y_2 \quad (18)$$

로 부터

$$\begin{aligned} X_2'(Y_2 - X_2b) &= X_2'Y_2 - X_2'X_2b = X'Y - X_1'Y_1 - (C - C_1)b \\ &= Cb - C_1b_1 - (C - C_1)b = C_1(b - b_1) \end{aligned} \quad (19)$$

을 얻어 양변에 $X_2C_1^{-1}$ 을 곱하고 몇가지 계산의 결과를 정리하면 다음을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} X_2C_1^{-1}X_2'(Y_2 - X_2b) &= X_2(b - b_1) \\ R_1(Y_2 - X_2b) &= X_2(b - b_1) \\ Y_2 - X_2b_1 &= Y_2 - X_2b + R_1(Y_2 - X_2b) = (I + R_1)(Y_2 - X_2b) \end{aligned} \quad (20)$$

식(19)와 (20) 으로부터 β 의 추정치 b 에 대한 순환공식을 얻을 수 있다.

$$b = b_1 + C_1^{-1}X_2'(Y_2 - X_2b) = b_1 + C_1^{-1}X_2'(I_n + R_1)^{-1}(Y_2 - X_2b_1) \quad (21)$$

2.2 잔차제곱합

모형 (10)에 의한 잔차 제곱합은 다음과 같다.

$$RSS = (Y - Xb)'(Y - Xb) = (Y_1 - X_1b)'(Y_1 - X_1b) + (Y_2 - X_2b)'(Y_2 - X_2b) \quad (22)$$

위의 첫항은 모형 (9) 에서의 잔차제곱합을 RSS_1 이라 할때 (22)를 이용하여 정리하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} (Y_1 - X_1b)'(Y_1 - X_1b) &= \{(Y_1 - X_1b_1) - X_1(b - b_1)\}' \{(Y_1 - X_1b_1) - X_1(b - b_1)\} \\ &= (Y_1 - X_1b_1)'(Y_1 - X_1b_1) + (b - b_1)'C_1(b - b_1) \\ &= RSS_1 + (b - b_1)'C_1(b - b_1) \end{aligned} \quad (23)$$

또한 식(20)을 이용하면

$$(Y_2 - X_2b)'(Y_2 - X_2b) = (Y_2 - X_2b_1)'(I_n + R_1)^{-1}(Y_2 - X_2b_1) \quad (24)$$

을 얻게 되므로 잔차제곱합에 대한 다음의 순환공식을 얻을 수 있다.

$$RSS = RSS_1 + (Y_2 - X_2b_1)'(I_n + R_1)^{-1}(Y_2 - X_2b_1) + (b - b_1)'C_1(b - b_1) \quad (25)$$

2.3 계산예

Hald 의 자료를 이용하여(Draper & Smith (1981)) 이상의 갱신알고리즘을 적용하여보자.

$$Y = \begin{pmatrix} 78.5 \\ 74.3 \\ 104.3 \\ 87.6 \\ 95.9 \\ 109.2 \\ 102.7 \\ 72.5 \\ \dots \\ 93.1 \\ 115.9 \\ 83.8 \\ 113.3 \\ 109.4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_1 \\ \dots \\ Y_2 \end{pmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} 1 & 6 & 60 \\ 1 & 15 & 52 \\ 1 & 8 & 20 \\ 1 & 8 & 47 \\ 1 & 6 & 33 \\ 1 & 9 & 22 \\ 1 & 17 & 6 \\ 1 & 22 & 44 \\ \dots & \dots & \dots \\ 1 & 18 & 22 \\ 1 & 4 & 26 \\ 1 & 23 & 34 \\ 1 & 9 & 12 \\ 1 & 8 & 12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 \\ \dots \\ X_2 \end{pmatrix}$$

$m=8, n=5$ 로하여 다음의 계산이 가능하다.

$$b_1 = (X_1'X_1)^{-1}X_1'Y_1 = \begin{pmatrix} 129.4476 \\ -1.1896 \\ -0.7124 \end{pmatrix}$$

$$C_1^{-1} = (X_1' X_1)^{-1} = \begin{pmatrix} 1.3255 & -0.0528 & -0.0169 \\ -0.0528 & 0.0042 & 0.0002 \\ -0.0169 & 0.0002 & 0.0004 \end{pmatrix}$$

$$RSS_1 = (Y_1 - X_1 b_1)' (Y_1 - X_1 b_1) = 55.8402$$

$$R_1 = X_2 C_1^{-1} X_2' = \begin{pmatrix} 0.3575 & -0.0117 & 0.4279 & 0.1758 & 0.1504 \\ -0.0177 & 0.4113 & -0.2407 & 0.3234 & 0.3555 \\ 0.4279 & -0.2407 & 0.6823 & -0.0165 & -0.0646 \\ 0.1758 & 0.3234 & -0.0165 & 0.4013 & 0.4149 \\ 0.1504 & 0.3555 & -0.0646 & 0.4149 & 0.4325 \end{pmatrix}$$

공분산 행렬에 대한 (16)의 순환공식을 이용하면

$$C^{-1} = C_1^{-1} - C_1^{-1} X_2' (I_5 + R_1)^{-1} X_2 C_1^{-1} \\ = \begin{pmatrix} 0.6102 & -0.0232 & -0.0087 \\ -0.0232 & 0.0020 & -0.0000 \\ -0.0087 & -0.0000 & 0.0003 \end{pmatrix}$$

을 얻고 β 의 추정치에 대한 (21)식을 이용하면

$$b = b_1 + C_1^{-1} X_2' (I_5 + R_1)^{-1} (Y_2 - X_2 b_1) \\ = (131.2824 \quad -1.1999 \quad -0.7246)$$

을 얻게된다. 또 잔차제곱합에 대한 순환공식 (25)로부터

$$RSS = RSS_1 + (Y_2 - X_2 b_1)' (I_5 + R_1)^{-1} (Y_2 - X_2 b_1) \\ = 55.8402 + 119.8778 = 175.7380$$

을 얻는다. 자료의 크기가 큰 경우에도 적당한 m, n 의 값을 정하여 위의 순환공식을 여러번 적용함으로써 많은 양의 자료분석에 소형 및 개인용 컴퓨터를 충분히 활용할 수 있다.

3. Hotelling의 T^2 -통계량

정규분포를 따르는 모집단의 평균에 대한 가설검정에 t-분포가 이용되는데, 이것을 다변량변수(multivariate variable)의 경우로 확장한 것이 Hotelling의 T^2 통계량이다. $\{X_1, X_2, \dots, X_N\}$ 을 평균벡터 μ ($p \times 1$), 공분산행렬 Σ ($p \times p$)을 갖는 p -변량 정규분포로부터 조사된 N 개의 표본이라 할때, 귀무가설 $H_0: \mu = \mu_0$ 을 검정하기 위한 T^2 통

계량은 다음으로 정의된다.

$$T^2 = N(\bar{X}_N - \mu_0)' S_N^{-1} (\bar{X}_N - \mu_0) \quad (26)$$

여기서 \bar{X}_N 는 표본평균벡터, S_N 는 표본공분산행렬을 뜻하고, 첨수 N 은 표본의 크기가 N 일때에 통계량을 계산하였음을 나타내기로한다. 새로운 표본 X_{N+1} 이 주어질 때 마다 그에 해당하는 역행렬 S_{N+1}^{-1} 을 새로이 구하는 것은 번거로울 뿐 아니라, 자료의 크기가 클때에는 많은 양의 기억을 요하기 때문에 효과적이라 할 수 없다. 따라서 \bar{X}_{N+1} 과 S_{N+1}^{-1} 의 순환 공식을 구하면 T^2 에 대한 갱신 알고리즘은 쉽게 구할 수 있다.

$$\bar{X}_{N+1} = \frac{1}{N+1} \sum_{i=1}^{N+1} X_i = \frac{N}{N+1} \bar{X}_N + \frac{1}{N+1} X_{N+1} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} S_{N+1} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N+1} (X_i - \bar{X}_{N+1})(X_i - \bar{X}_{N+1})' \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X}_N)(X_i - \bar{X}_N)' + (\bar{X}_{N+1} - \bar{X}_N)(\bar{X}_{N+1} - \bar{X}_N)' \\ &\quad + \frac{1}{N} (X_{N+1} - \bar{X}_{N+1})(X_{N+1} - \bar{X}_{N+1})' \\ &= \frac{N-1}{N} S_N + \frac{N+1}{N^2} (X_{N+1} - \bar{X}_{N+1})(X_{N+1} - \bar{X}_{N+1})' \end{aligned} \quad (28)$$

식 (29)는 $A + UV'$ 의 형태이므로

$$(A + UV')^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}UV'A^{-1}}{(1 + V'A^{-1}U)} \quad (29)$$

의 공식을 이용하면(Rao) 공분산행렬 S_{N+1}^{-1} 에 대한 다음의 순환공식을 얻는다.

$$S_{N+1}^{-1} = \frac{N}{N-1} S_N^{-1} - \frac{S_N^{-1} (X_{N+1} - \bar{X}_{N+1})(X_{N+1} - \bar{X}_{N+1})' S_N^{-1}}{\frac{N(N-1)}{N+1} + (X_{N+1} - \bar{X}_{N+1})' S_N^{-1} (X_{N+1} - \bar{X}_{N+1})} \quad (30)$$

따라서 N 개의 자료가 주어졌을때, \bar{X}_N 과 S_N^{-1} 만의 값을 계산하여 저장하고 있으면, 새로운 자료 X_{N+1} 이 주어졌을때, 식(28), (31)을 구하여

$$T_{N+1}^2 = (N+1)(\bar{X}_{N+1} - \mu_0)' S_{N+1}^{-1} (\bar{X}_{N+1} - \mu_0) \quad (31)$$

로부터 Hotelling의 T^2 -통계량을 얻을 수 있다.

< 참고 문헌 >

- [1] Albert, A., Sittler, R. W. (1966), "A Method for Computing Least Squares Estimators that keep up with the Data," *Journal of SIAM*. (A) Vol. 3, 384~417.
- [2] Anderson, T. W. (1971), *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*, John Wiley & Sons.
- [3] Chambers, J. M. (1971), "Regression Updating," *Journal of the American Statistical Association*. Vol. 66, 744~748.
- [4] Chan, T. F., Golub, G. H. & LeVeque, R. J. (1982), "Updating Formulae and a Pairwise Algorithms for Computing Sample Variances," *COMPSTAT* 30~41.
- [5] Chan, T. F., Golub, G. H. & LeVeque, R. J. (1983), "Algorithms for Computing the Sample variances : Analysis and recommendations," *American Statistician* Vol. 37, 242~247.
- [6] Chan, T. F., Lewis, J. G. (1979), " Computing Standard Deviations : Accuracy," *Communications in ACM*. Vol. 22, 526~531.
- [7] Draper, N. R., Smith, H. (1981), *Applied Regression Analysis*, 2nd ed. John Wiley & Sons.
- [8] Hui, Y. V. (1987), " On Computing Sequential T^2 Test Statistics," *Proceedings of the Statistical Computing*, American Statistical Association, 429~430.
- [9] Nash, J. C. (1981), "Fundamental Statistical Calculations," *Interface Age*, September, 40~42.
- [10] Plackett, R. L. (1950), "Some Theorems in Least Squares," *Biometrika*, Vol. 37, 149~157.
- [11] Rao, C. R. (1973), *Linear Statistical Inferences and its Applications*, 2nd ed. John Wiley & Sons.
- [12] Youngs, E. A., Cramer, E. M. (1971), "Some results Relevant to Choices of Sum and Sum-of-product Algorithms," *Technometrics*, Vol. 13, 657~665.

Updating Algorithms in Statistical Computations¹⁾

Hongsuk Jorn²⁾

< Abstract >

Updating algorithms are studied for the basic statistics (mean, variance). For a linear model, a recursive formulae for least squares estimators of regression coefficients, residual sum of squares and variance-covariance matrix are also studied. Hotelling's T^2 statistics can be calculated recursively using the recursive formulae of mean vector and variance-covariance matrix without computing the sample variance-covariance matrix at each stage.

1) This research was partially supported by KOSEF.

2) Department of Statistics, Inha University, #253 Yonghyun-Dong Nam-Ku Incheon, 402-751, Korea.
Internet : hsjorn@dragon1.inha.ac.kr