

くりこみ法の謎を解く

金谷 健一

岡山大学大学院自然科学研究科

筆者の提起したくりこみ法の解釈をめぐる多くの疑問が提起されていたが、本論文では厳密な誤差解析を行い、くりこみ法は最尤推定の近似解法ではなく、精度の理論限界 (KCR 下界) を達成するように構成した解法であることを指摘する。この意味で、くりこみ法は最尤推定の解法である Leedan らの HEIV 法や Chojnacki らの FNS 法とは出発点が異なるが、高次の誤差解析により、精度が最尤推定量と高次の項まで同一であることを指摘する。その結果として、最尤推定量の精度を上回る解法の可能性が示される。

Unraveling the Mystery of Renormalization

Kenichi Kanatani

Department of Computer Science, Okayama University, Okayama 700-8530 Japan

Since the author presented his renormalization method, many questions and doubts have been raised about its justification. This paper demonstrates by rigorous error analysis that it is not an approximate solution technique for MLE (maximum likelihood estimation) but rather a method so constructed as to attain the theoretical accuracy bound (KCR lower bound). In this sense, renormalization is different from the HEIV of Leedan and Meer and the FNS of Chojnacki et al., both of which are solution techniques for MLE. However, we demonstrate by higher order analysis that the accuracy of renormalization is identical to MLE up to higher order terms. This analysis also implies the existence of better methods than MLE.

1. 何が問題か

「くりこみ法」とは誤差のあるデータに線形拘束条件を最適に当てはめる計算法であり、最小二乗解に特有の偏差を推定しては除去するという発想のもとに考案された [7]。そして、その解の精度が高次の誤差項を除いて理論限界 (「KCR 下界」 [1]) を到達することが証明された [9]。また、実験的にも非常に高精度であることが実証され、画像からの 3 次元復元のための基礎行列や画像モザイク生成のための射影変換行列の最適計算に不可欠となっている [12, 13]。そのため国内国外で広く利用され、商用システムにも組み込まれている。

しかし、発表当時からその解釈をめぐる議論が絶えなかった。それは、くりこみ法は最尤推定量を計算しているのか、そうでないのかという疑問である。これに対して、Chojnacki ら [2, 3, 4, 5] は「金谷のくりこみ法の正当化 (Rationalising the renormalisation method of Kanatani)」と題する論文 [2] で、くりこみ法は最尤推定の近似解法の一つであると位置づけ、最尤推定解を直接に計算する方法として「FNS 法」を提案した [3]。さらに、Leedan ら [14] の「HEIV 法」も FNS 法と同じ範疇の最尤推定の解法であることを指摘した [5]。

これらの結果から、Chojnacki らは、FNS 法や HEIV 法が理論的に最適とされている最尤推定解を

計算しているのに対して、くりこみ法はその近似解法であるから、FNS 法や HEIV 法のほうが優れていると示唆している。

しかし、新たな疑問が生じる。くりこみ法が最尤推定の近似解法であるなら、なぜ最尤推定解と同じ精度なのであろうか。シミュレーション実験によっても、くりこみ法は FNS 法や HEIV 法と比べて精度に実質的な差がない。これは偶然であらうか¹。それとも、くりこみ法は最尤推定の近似解法ではなく、別の意味の最適解法なのであろうか。それなら、その“意味”は何であらうか。

本論文では、くりこみ法は最尤推定とは無関係に構成される解法であることを示し、それが最尤推定量と同等の精度をもつことを示す。その過程から、最尤推定を上回る精度の解法の可能性が示唆される。

2. 幾何学的当てはめと KCR 下界

幾何学的当てはめとは、観測したデータに対して、成立すべき幾何学的拘束条件を当てはめてパラメータを計算することである [9]。最も単純な例は画像上に与えられた N 個の点列 $\{(x_\alpha, y_\alpha)\}$ に曲線 (直線、円、楕円、多項式曲線など)

$$F(\mathbf{x}; \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

を当てはめる問題である。ただし $\mathbf{x} = (x, y)^\top$ と置

¹論文 [1] で最尤推定の最適性を筆者とは別の方法で証明した Chernov は筆者との私信で、偶然であるなら奇跡的であり、最大の謎であると述べている。この議論が本論文の動機となった。

[†]700-8530 岡山市津島中 3-1-1, TEL/FAX: (086)251-8173
E-mail: kanatani@suri.it.okayama-u.ac.jp

き、曲線のパラメータをベクトル $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_p)^\top$ で表した。

これはコンピュータビジョンの多くの問題に拡張できる。例えば複数画像間の特徴点の対応が得られれば、各点の“軌跡”は画像の直積空間（直積画像）の1点とみなせる。それにカメラの撮像モデルから導かれる拘束条件（エピ極線拘束条件、3重焦点拘束条件、4重焦点拘束条件、アフィン拘束条件など）を当てはめれば、カメラの運動やシーンの3次元形状を計算することができる[6]。

データ $\{(x_\alpha, y_\alpha)\}$ に誤差があるとき、 $\mathbf{x}_\alpha = (x_\alpha, y_\alpha)^\top$ と置くと、 $F(\mathbf{x}_\alpha; \mathbf{u}) = 0$ が $\alpha = 1, \dots, N$ のすべてに対して成立する解 \mathbf{u} は存在しない。そこで、何らかの方法で \mathbf{u} を推定する必要がある。これは \mathbf{u} の推定値 $\hat{\mathbf{u}}$ をデータ $\{\mathbf{x}_\alpha\}$ の何らかの関数

$$\hat{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (2)$$

の形に表すことである。関数 $\hat{\mathbf{u}}$ を \mathbf{u} の推定量と呼ぶ。この推定量 $\hat{\mathbf{u}}$ の共分散行列

$$V[\hat{\mathbf{u}}] = E[(\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u})(\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u})^\top] \quad (3)$$

を考える²。各データ \mathbf{x}_α はその真の値 $\bar{\mathbf{x}}_\alpha$ の各成分に独立に期待値0、標準偏差 ε の正規分布に従う誤差が加わる、すなわち

$$\mathbf{x}_\alpha = \bar{\mathbf{x}}_\alpha + \Delta \mathbf{x}_\alpha, \quad \Delta \mathbf{x}_\alpha \sim N(\mathbf{0}, \varepsilon^2 \mathbf{I}) \quad (4)$$

とし、 ε をノイズレベルと呼ぶ。このとき、任意の不偏推定量 $\hat{\mathbf{u}}$ に対して次の不等式が成立することが証明される³[8, 9]。

$$V[\hat{\mathbf{u}}] \succ \varepsilon^2 \left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{(\nabla_{\mathbf{u}} \bar{F}_\alpha)(\nabla_{\mathbf{u}} \bar{F}_\alpha)^\top}{\|\nabla_{\mathbf{x}} \bar{F}_\alpha\|^2} \right)^{-1} \quad (5)$$

ただし、 \succ は左辺から右辺を引いたものが半正値対称行列であることを意味する。 $\nabla_{\mathbf{u}} \bar{F}_\alpha$ は式(1)の関数 $F(\mathbf{x}; \mathbf{u})$ の \mathbf{u} に関する勾配を $\mathbf{x} = \bar{\mathbf{x}}_\alpha$ において評価することを表す。Chernov ら [1] は式(5)の右辺を KCR（金谷・クラメル・ラオ）下界と呼んでいる。

このとき、最尤推定量 $\hat{\mathbf{u}}_{\text{ML}}$ （後述）の共分散行列 $V[\hat{\mathbf{u}}_{\text{ML}}]$ が $O(\varepsilon^4)$ を除いてこの KCR 下界を達成することが証明される⁴[9]。

² そのトレース $\text{tr} V[\hat{\mathbf{u}}] = E[\|\hat{\mathbf{u}} - \mathbf{u}\|^2]$ が二乗平均誤差である。

³ 前報 [11] に分かりやすい証明が示されている。これはより一般的なノイズモデルに拡張できる。例えば指数分布族に属する分布であればよい [8, 9]。

⁴ 前報 [11] 分かりやすい証明が示されている。Chernov ら [1] は同じ結論を別の観点から証明している。

3. 拘束条件の線形化

コンピュータビジョンによく現れる多くの問題では、拘束条件(1)が変数変換によって次のように線形化できる。

$$(\xi(\mathbf{x}_\alpha), \mathbf{u}) = 0. \quad (6)$$

ここに $\xi(\cdot)$ は m 次元ベクトルから p 次元ベクトルへの（一般に非線形の）写像である。 \mathbf{u} には定数倍の不定性があるので $\|\mathbf{u}\| = 1$ と正規化する。

【例1】平面上の N 点 $\{(x_\alpha, y_\alpha)\}$, $\alpha = 1, \dots, N$ に2次曲線（円、楕円、放物線、双曲線、およびそれらの退化）を当てはめる問題の拘束条件は

$$Ax_\alpha^2 + 2Bx_\alpha y_\alpha + Cy_\alpha^2 + 2(Dx_\alpha + Ey_\alpha) + F = 0 \quad (7)$$

と書ける。これは

$$\begin{aligned} \xi(x, y) &= (x^2 \ 2xy \ y^2 \ 2x \ 2y \ 1)^\top \\ \mathbf{u} &= (A \ B \ C \ D \ E \ F)^\top \end{aligned} \quad (8)$$

と置けば、式(6)の形に線形化される。□

【例2】同一シーンを異なる位置から撮影した2画像から N 個の特徴点が抽出され、第1画像の点 (x_α, y_α) が第2画像の点 (x'_α, y'_α) に対応すれば、画像に誤差がなければある特異行列 F （基礎行列と呼ぶ）があって、

$$\left(\begin{array}{c} x_\alpha \\ y_\alpha \\ 1 \end{array} \right), F \left(\begin{array}{c} x'_\alpha \\ y'_\alpha \\ 1 \end{array} \right) = 0. \quad (9)$$

が成り立つ。これをエピ極線方程式と呼ぶ[6]。これは

$$\begin{aligned} \xi(x, y, x', y') &= (xx' \ xy' \ xy \ x'y' \ yy' \ y \ x' \ y' \ 1)^\top \\ \mathbf{u} &= (F_{11} \ F_{12} \ F_{13} \ F_{21} \ F_{22} \ F_{23} \ F_{31} \ F_{32} \ F_{33})^\top \end{aligned} \quad (10)$$

と置くと、式(6)の形に線形化される。□

線形化した拘束条件(6)に対しては、式(5)の右辺の KCR 下界は $O(\varepsilon^4)$ を除いて次のように書ける⁵ [9]。

$$V_{\text{KCR}}[\hat{\mathbf{u}}] = \varepsilon^2 \left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})} \right)^{-1} \quad (11)$$

ただし、上添え字 $\bar{\cdot}$ は（ムーア・ペンローズの）一般逆行列であり、 $\bar{\xi}_\alpha$ は真の値 $\bar{\mathbf{x}}_\alpha$ を変換 $\xi_\alpha(\bar{\mathbf{x}}_\alpha)$ を表す。右辺の分母の $V_0[\xi_\alpha]$ は $\xi(\mathbf{x}_\alpha)$ の正規化共分散行

⁵ データ \mathbf{x} やパラメータ \mathbf{u} に何らかの制約があったり、式(1)の形の拘束条件が複数あり、しかも重複したり冗長であったりすれば、一般逆行列や射影作用素が含まれる [9]。

列 (ノイズレベル ε を 1 に正規化した共分散行列) である。これは $O(\varepsilon^4)$ を除いて次のように評価できる。

$$V_0[\xi_\alpha] = \nabla_x \xi_\alpha^\top \nabla_x \xi_\alpha \quad (12)$$

ここに $\nabla_x \xi_\alpha$ は $\xi(x)$ の $m \times p$ ヤコビ行列

$$\nabla_x \xi = \begin{pmatrix} \partial \xi_1 / \partial x_1 & \cdots & \partial \xi_p / \partial x_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial \xi_1 / \partial x_m & \cdots & \partial \xi_p / \partial x_m \end{pmatrix} \quad (13)$$

に $x = x_\alpha$ を代入したものである。

4. 最適推定量の構成

式 (11) が共分散行列の下界であるということは、最適な推定量 \hat{u} を構成するには、その共分散行列が式 (11) に一致する \hat{u} を求めればよい。これは従来の、発見的に何らかの方法 (例えば最尤推定) を考案しては、その精度をシミュレーションで試したり、その共分散行列が KCR 下界 (11) を達成するか事後的に解析してみるアプローチとは正反対の発想である。

出発点は次の事実である。推定量 \hat{u} は単位ベクトルに正規化されているから、その定義域は p 次元空間の単位球面 S^{p-1} である。したがって \hat{u} の不確定性は常に \hat{u} に直交する。式 (11) の右辺の一般逆行列 $(\cdots)^-$ は \cdots を S^{p-1} の接空間に制限することを意味している。

これは KCR 下界 $V_{\text{KCF}}[\hat{u}]^-$ の零空間が \hat{u} 方向にあり、 \hat{u} は $V_{\text{KCF}}[\hat{u}]$ の固有値 0 の単位固有ベクトルであることを意味する。したがって、KCR 下界 $V_{\text{KCF}}[\hat{u}]$ が分かれば、推定量 \hat{u} はその固有値 0 の単位固有ベクトルとして求まる。

一見すると、これは不可能に思える。なぜなら KCR 下界 $V_{\text{KCF}}[\hat{u}]$ にはデータの真値 $\{\bar{x}_\alpha\}$ とパラメータ u の真値が含まれているからである。しかし、これは問題ではない。 $\{\bar{x}_\alpha\}$ はデータ $\{x_\alpha\}$ で近似すればよいし、 u にもその推定値を代入して反復すればよいからである。この近似の程度を解析して、得られる推定量 \hat{u} の共分散行列と KCR 下界の差が $O(\varepsilon^4)$ であれば目的が達成される。以下ではこれを実行する。

5. モーメント行列と摂動定理

次の行列 M を考える。

$$M = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\xi_\alpha \xi_\alpha^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} \quad (14)$$

これは線形化したデータ $\{\xi_\alpha\}$ の重みつき 2 次のモーメントであり、単にモーメント行列と呼ぶ。式 (11)

の KCR 下界は $V_{\text{KCR}}[\hat{u}] = \varepsilon^2 \bar{M}^-$ と書ける。ただし、 \bar{M} は $\{\xi_\alpha\}$ に真値 $\{\bar{x}_\alpha\}$ を代入して計算した M の値である。一般逆行列は零空間を保存するように定義されるから、 \bar{M} は \bar{M}^- と、したがって $V_{\text{KCR}}[\hat{u}]$ と同じ零空間を持つ。したがって $V_{\text{KCR}}[\hat{u}]$ の固有値 0 の単位固有ベクトルを求めるには \bar{M} の固有値 0 の単位固有ベクトルを求めればよい。

実際、 u が \bar{M} の固有値 0 の固有ベクトルであることは、拘束条件 $(\bar{\xi}_\alpha, u) = 0$ より次のように直接にも確かめられる。

$$\bar{M}u = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top u}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\bar{\xi}_\alpha, u) \bar{\xi}_\alpha}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} = 0 \quad (15)$$

実際には真のモーメント行列 \bar{M} は未知なので、これを式 (14) の M で近似し、後でその誤差を評価する。データから計算した M は一般に正則行列であり、固有値 0 を持たない。そこで最小⁶の固有値 λ に対する単位固有ベクトル u を求める。すなわち、

$$Mu = \lambda u \quad (16)$$

の解を \hat{u} とする。しかし M 自身に未知数 u が含まれている。そこで反復を行う。すなわち、 M 中の u に近似値 u_i を代入して得られる式 (16) の解を u_{i+1} とし、これを適切な (例えば最小二乗法で求めた) 初期値 u_0 から $i = 0, 1, 2, \dots$ と反復する。収束した解 \hat{u} は式 (16) が (与えた収束判定のしきい値以内で) 成立している。

次に、得られた \hat{u} がどの程度真の値 u を近似してかを解析する。

$$\xi_\alpha = \bar{\xi}_\alpha + \Delta \xi_\alpha \quad (17)$$

と置くと、行列 M の誤差は次のように評価できる。

$$\begin{aligned} \Delta M &= M - \bar{M} \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\bar{\xi}_\alpha + \Delta \xi_\alpha)(\bar{\xi}_\alpha + \Delta \xi_\alpha)^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} - \sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{\Delta \xi_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top + \bar{\xi}_\alpha \Delta \xi_\alpha^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{\Delta \xi_\alpha \Delta \xi_\alpha^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{\Delta \xi_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top + \bar{\xi}_\alpha \Delta \xi_\alpha^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (18)$$

固有値問題の摂動定理によれば、 \bar{M} が $\bar{M} - \Delta M$ に摂動したとき、 u は次のように摂動する [9]。

$$\hat{u} = u + \bar{M}^- \Delta M u + O(\varepsilon^2) \quad (19)$$

⁶行列 M はその構成法により半正値対称行列であるから、固有値はすべて非負である。

この共分散行列は次のように評価できる．

$$\begin{aligned}
V[\hat{u}] &= E[(\hat{u} - u)(\hat{u} - u)^\top] \\
&= E[\bar{M}^{-1} \Delta M u u^\top \Delta M \bar{M}^{-1}] + O(\varepsilon^4) \\
&= E[\bar{M}^{-1} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\Delta \xi_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top + \bar{\xi}_\alpha \Delta \xi_\alpha^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)} u u^\top \\
&\quad \sum_{\beta=1}^N \frac{\Delta \xi_\beta \bar{\xi}_\beta^\top + \bar{\xi}_\beta \Delta \xi_\beta^\top}{(u, V_0[\xi_\beta]u)} \bar{M}^{-1}] + O(\varepsilon^4) \\
&= E[\bar{M}^{-1} \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\Delta \xi_\alpha, u)(\Delta \xi_\beta, u) \bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\beta^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)(u, V_0[\xi_\beta]u)} \bar{M}^{-1}] + O(\varepsilon^4) \\
&= \bar{M}^{-1} \sum_{\alpha, \beta=1}^N \frac{(u, E[\Delta \xi_\alpha \Delta \xi_\beta^\top]u) \bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\beta^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)(u, V_0[\xi_\beta]u)} \bar{M}^{-1} + O(\varepsilon^4) \\
&= \bar{M}^{-1} \sum_{\alpha, \beta=1}^N \frac{(u, \varepsilon^2 \delta_{\alpha\beta} V_0[\xi_\alpha]u) \bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\beta^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)(u, V_0[\xi_\beta]u)} \bar{M}^{-1} + O(\varepsilon^4) \\
&= \bar{M}^{-1} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\varepsilon^2 \bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)} \bar{M}^{-1} + O(\varepsilon^4) \\
&= \varepsilon^2 \bar{M}^{-1} \bar{M} \bar{M}^{-1} + O(\varepsilon^4) = \varepsilon^2 \bar{M}^{-1} + O(\varepsilon^4) \\
&= V_{\text{KCR}}[\hat{u}] + O(\varepsilon^4) \tag{20}
\end{aligned}$$

ただし， $\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカのデルタであり， $\alpha = \beta$ のとき 1，それ以外で 0 をとる．また上式中で，各データ x_α に入る誤差は互いに独立という仮定から $E[\Delta \xi_\alpha \Delta \xi_\beta^\top] = \delta_{\alpha\beta} V_0[\xi_\alpha]$ であることを用いた．最後の項が $O(\varepsilon^4)$ であるのは，誤差は正負に対称であり， ε の奇数次の項の期待値が 0 になるためである．

6. 偏差の除去

式 (20) より，データを代入したモーメント行列 \bar{M} の最小固有値に対する単位固有ベクトル \hat{u} を u の推定値とすればその共分散行列は $O(\varepsilon^4)$ を除いて KCR の下界に一致するという意味で“最適”である．しかし，これは筆者が提案したくりこみ法ではない．筆者が提案したくりこみ法は，これから偏差を除去したものである [7, 9, 10]．

式 (18) の最後の項を省略せず，その期待値をとると，次のようになる．

$$\begin{aligned}
E[\Delta M] &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{E[\Delta \xi_\alpha] \bar{\xi}_\alpha^\top + \bar{\xi}_\alpha E[\Delta \xi_\alpha^\top]}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{E[\Delta \xi_\alpha \Delta \xi_\alpha^\top]}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)} \\
&= \sum_{\alpha=1}^N \frac{\varepsilon^2 V_0[\xi_\alpha]}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)} = \varepsilon^2 N \tag{21}
\end{aligned}$$

ただし，行列 N を次のように定義した．

$$N = \sum_{\alpha=1}^N \frac{V_0[\xi_\alpha]}{(u, V_0[\xi_\alpha]u)} \tag{22}$$

ゆえに，式 (19) の期待値は次のようになる．

$$E[\hat{u}] = u + \varepsilon^2 \bar{M}^{-1} N u + O(\varepsilon^2) \tag{23}$$

したがって，もし式 (14) の代わりに

$$\hat{M} = M - \varepsilon^2 N \tag{24}$$

を用いれば， $\Delta \hat{M} = \hat{M} - \bar{M}$ の期待値は O であり，式 (23) の右辺第 2 項の偏差が除去できる．もちろん KCR 下界を達成しているという事実は変化しない．

7. くりこみ法

式 (24) の右辺中の ε^2 が未知である．くりこみ法ではこれを \hat{M} の最小固有値が 0 となるように推定している．具体的には，仮の値 ε^2 を用いた \hat{M} の最小固有値 λ と対応する単位固有ベクトルを \hat{u} を計算し， $\lambda \neq 0$ なら ε^2 を c だけ増加させる．増加量 c は $(\hat{M} - cN)\hat{u} = 0$ となるように，

$$\begin{aligned}
(\hat{u}, (\hat{M} - cN)\hat{u}) &= (\hat{u}, \hat{M}\hat{u}) - c(\hat{u}, N\hat{u}) \\
&= \lambda - c(\hat{u}, N\hat{u}) = 0 \tag{25}
\end{aligned}$$

から $c = \lambda / (\hat{u}, N\hat{u})$ とする．この反復を行列 \hat{M} の固有ベクトル u を求める反復の中に入れて，くりこみ法は次のように構成される [7, 9, 10]．

1. 初期値 u_0 を与え， $c_0 = 0$ と置く．
2. 第 $(i-1)$ 回目の反復解 u_{i-1} を用いて式 (14)，(22) から計算した行列 M ， N の値を M_{i-1} ， N_{i-1} とし，固有値問題

$$(M_{i-1} - c_{i-1} N_{i-1})u = \lambda u \tag{26}$$

の最小固有値に対する単位固有ベクトルを u_i とする．

3. λ が十分 0 に近ければ u_i を \hat{u} として終了．そうでなければ

$$c_i \leftarrow c_{i-1} + \frac{\lambda}{(u_{i-1}, N(u_{i-1})u_{i-1})} \tag{27}$$

および $u_{i-1} \leftarrow u_i$ としてステップ 2 に戻る．初期値 u_0 は，例えば

$$M_{\text{LS}} = \sum_{\alpha=1}^N \xi_\alpha \xi_\alpha^\top \tag{28}$$

の最小固有値に対応する単位固有ベクトルを用いる．これは

$$J_{LS} = \sum_{\alpha=1}^N (\xi_{\alpha}, \mathbf{u})^2 \quad (29)$$

を最小にする解（最小二乗解）である．

くりこみ法の反復が収束した時点では $(M - cN)\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$ が（収束判定しきい値以内で）成立しているから，両辺と $\hat{\mathbf{u}}$ との内積をとると次のようになる．

$$(\hat{\mathbf{u}}, (M - cN)\hat{\mathbf{u}}) = (\hat{\mathbf{u}}, M\hat{\mathbf{u}}) - c(\hat{\mathbf{u}}, N\hat{\mathbf{u}}) = 0 \quad (30)$$

したがって c は次のようになる．

$$c = \frac{(\hat{\mathbf{u}}, M\hat{\mathbf{u}})}{(\hat{\mathbf{u}}, N\hat{\mathbf{u}})} \quad (31)$$

この期待値を厳密に評価することは困難である．というのは， $\hat{\mathbf{u}}$ は M だけでなく， c 自身を用いて計算しているためである．しかし，第 1 近似として $\hat{\mathbf{u}} \approx \mathbf{u}$ とみなすと，上式の期待値は次のようになる．

$$E[c] = \frac{(\mathbf{u}, E[M]\mathbf{u})}{(\mathbf{u}, N\mathbf{u})} = \frac{(\mathbf{u}, \varepsilon^2 N\mathbf{u})}{(\mathbf{u}, N\mathbf{u})} = \varepsilon^2 \quad (32)$$

$\hat{\mathbf{u}}$ が \mathbf{u} のよい近似であれば，上式の誤差はより高次の $O(\varepsilon^4)$ と期待される ($O(\varepsilon^3)$ の期待値は 0 となる)．これを認めれば $E[\hat{M} - \bar{M}] = \varepsilon^2 N - E[c]N = O(\varepsilon^4)$ であるから，式 (23) の右辺第 2 項の偏差が除去される．

8. 偏差除去の意味

以上のように考えれば，くりこみ法が式 (14) のモーメント行列 M を出発点することが正当化される．単に偏差を除去するだけなら，式 (14) の M ではなく式 (28) の M_{LS} を用いてもよいはずである．実際， M_{LS} の真値 $\bar{M}_{LS} = \sum_{\alpha=1}^N \bar{\xi}_{\alpha} \bar{\xi}_{\alpha}^{\top}$ に対しても $\bar{M}_{LS}\mathbf{u} = \mathbf{0}$ である．したがって， $M_{LS}\hat{\mathbf{u}}_{LS} = \mathbf{0}$ の最小二乗解 $\hat{\mathbf{u}}_{LS}$ の偏差を除去してもよいことになり，なぜ式 (14) の M を用いるのかという問に答えられない．

筆者が式 (14) の M を用いたのは最尤推定（後述）の類推であり，その正当化は事後的な誤差解析および実験的検証であった．これから，くりこみ法は最尤推定の近似解法であるという解釈が生じ，Chojnacki ら [2] もそのように解釈している．しかし，上述のように考えれば，くりこみ法は KCR 下界から出発するものであり，最尤推定とは無関係に構成されることがわかる．最尤推定との関係が類推されるのは，最尤推定も KCR 下界が達成されるという事実 [11] に過ぎない．

しかし，新たな疑問が生じる．それは，なぜ式 (23) の右辺第 2 項の偏差を除去するのが有効かという問である．式 (23) の右辺にはそもそも $O(\varepsilon^2)$ の誤差項がある．第 2 項も $O(\varepsilon^2)$ であるから，これを除去しても依然として偏差は $O(\varepsilon^2)$ である．しかし，第 2 項の偏差を除去すると，しないのに比べて著しく精度が向上することがシミュレーションによって実証されている（例えば文献 [12, 13] 参照）．さらに Chojnacki ら [3] の FNS 法や Leedan ら [14] の HEIV 法と比べて精度にほとんど差がないことも確認されている．これはなぜであろうか．その理由が示されない限り，くりこみ法自体に対する疑問視に完全に答えることができない．

振り返ってみると，この問に答えられなかった理由は，これまでの解析がすべて第 1 近似を用いているためであることがわかる．これに答えるためには，明らかに第 2 近似まで，すなわち $O(\varepsilon^2)$ の項まで厳密に評価する必要がある．以下ではこれを行う．

9. 2 次の摂動解析

式 (16) の固有値問題の摂動を 2 次の誤差項まで厳密に評価するために次のように置く．

$$M = \bar{M} + \Delta_1 M + \Delta_2 M, \quad (33)$$

ただし， Δ_1, Δ_2 はそれぞれ $O(\varepsilon), O(\varepsilon^2)$ の摂動を表す．式 (18) の計算より次のように書ける．

$$\Delta_1 M = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\Delta \xi_{\alpha} \bar{\xi}_{\alpha}^{\top} + \bar{\xi}_{\alpha} \Delta \xi_{\alpha}^{\top}}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_{\alpha}]\mathbf{u})} \quad (34)$$

$$\Delta_2 M = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\Delta \xi_{\alpha} \Delta \xi_{\alpha}^{\top}}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_{\alpha}]\mathbf{u})} \quad (35)$$

そして式 (16) を次のように書く．

$$\begin{aligned} & (\bar{M} + \Delta_1 M + \Delta_2 M)(\mathbf{u} + \Delta_1 \mathbf{u} + \Delta_2 \mathbf{u} + \cdots) \\ & = (\Delta_1 \lambda + \Delta_2 \lambda + \cdots)(\mathbf{u} + \Delta_1 \mathbf{u} + \Delta_2 \mathbf{u} + \cdots) \end{aligned} \quad (36)$$

両辺の $O(1), O(\varepsilon), O(\varepsilon^2)$ の項をそれぞれ取り出すと，次の結果を得る（導出は付録 A）．

$$\Delta_1 \mathbf{u} = -\bar{M}^{-1} \Delta_1 M \mathbf{u} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \Delta_2 \mathbf{u} & = -\bar{M}^{-1} \Delta_2 M \mathbf{u} + \bar{M}^{-1} \Delta_1 M \bar{M}^{-1} \Delta_1 M \mathbf{u} \\ & \quad - \|\bar{M}^{-1} \Delta_1 M \mathbf{u}\|^2 \mathbf{u} \end{aligned} \quad (38)$$

$E[\Delta_1 M] = \mathbf{O}$ であるから $E[\Delta_1 \mathbf{u}] = \mathbf{0}$ である．また $E[\Delta_2 M] = \varepsilon^2 N$ であるから， $\Delta_2 \mathbf{u}$ の期待値は次

のようになる．

$$E[\Delta_2 \mathbf{u}] = -\varepsilon^2 \bar{\mathbf{M}}^- \mathbf{N} \mathbf{u} + \bar{\mathbf{M}}^- E[\Delta_1 \mathbf{M} \bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M}] \mathbf{u} - E[\|\bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M} \mathbf{u}\|^2] \mathbf{u} \quad (39)$$

$E[\|\bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M} \mathbf{u}\|^2] = \varepsilon^2 \text{tr}(\bar{\mathbf{M}}^-)$ であり (導出は付録 B), くりこみ法は偏差 $-\varepsilon^2 \bar{\mathbf{M}}^- \mathbf{N} \mathbf{u}$ を除去するものであるから, 解 $\hat{\mathbf{u}}_{\text{RN}}$ の期待値は次のようになる (ε の 3 次の項の期待値は 0 となることに注意) .

$$E[\hat{\mathbf{u}}_{\text{RN}}] = \mathbf{u} + \bar{\mathbf{M}}^- E[\Delta_1 \mathbf{M} \bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M}] \mathbf{u} - \varepsilon^2 \text{tr}(\bar{\mathbf{M}}^-) \mathbf{u} + O(\varepsilon^4) \quad (40)$$

10. 最尤推定

式 (40) の意味を調べるために, これを最尤推定解と比較してみる. 最尤推定とは二乗マハラノビス距離 (= 負の対数尤度の $2\varepsilon^2$ 倍)

$$J = \sum_{\alpha=1}^N (\xi_\alpha - \bar{\xi}_\alpha, V_0[\xi_\alpha]^{-1} (\xi_\alpha - \bar{\xi}_\alpha)) \quad (41)$$

を拘束条件

$$(\bar{\xi}_\alpha, \mathbf{u}) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (42)$$

のもとで最小にするように $\{\bar{x}_\alpha\}$, \mathbf{u} を推定することである. ε が小さいときの摂動解析を行うために (摂動解析の意味については前報 [11] を参照), 線形近似を用いてラグランジュ乗数によって拘束条件 (1) を消去すると, 式 (41) は次のように書ける [9, 11] .

$$J = \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\xi_\alpha, \mathbf{u})^2}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})} \quad (43)$$

これを最小にすることは最尤推定のノイズレベル ε が小さいときの近似であるが, ここでは ε が小さいときの摂動解析を行なっているので, 単に「最尤推定」と呼ぶ. Chojnacki ら [3] の FNS 法も, Leedan ら [14] の HEIV 法も, 最近 Mühlich ら [15] が発表した平衡化法と呼ばれる方法の一種もすべて上式を最小化する解 $\hat{\mathbf{u}}_{\text{ML}}$ を計算しようとするものである.

式 (43) の微分は次のようになる .

$$\nabla_{\mathbf{u}} J = \sum_{\alpha=1}^N \frac{2(\xi_\alpha, \mathbf{u}) \xi_\alpha}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})} - \sum_{\alpha=1}^N \frac{2(\xi_\alpha, \mathbf{u})^2 V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u}}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})^2} \quad (44)$$

最尤推定量 $\hat{\mathbf{u}}_{\text{ML}}$ はこれを 0 にするものであるから, 次の方程式の解である .

$$\mathbf{M} \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{L} \hat{\mathbf{u}} \quad (45)$$

$$\mathbf{M} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\xi_\alpha \xi_\alpha^\top}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})}, \quad \mathbf{L} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\xi_\alpha, \mathbf{u})^2 V_0[\xi_\alpha]}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})^2} \quad (46)$$

Chojnacki ら [3] の FNS 法も, Leedan ら [14] の HEIV 法も, 式 (45) を固有値問題, あるいは一般固有値問題の反復によって解く方法である .

式 (43) は拘束条件 $\|\mathbf{u}\| = 1$ のもとで最小化すべきであるから, $\nabla_{\mathbf{u}} J$ は \mathbf{u} に直交する方向のみ 0 ではないかという疑問が生じる. しかし, 式 (43) は \mathbf{u} の 0 次形式であり, \mathbf{u} の定数倍によって変化しない. したがって $\nabla_{\mathbf{u}} J$ は \mathbf{u} 方向にも 0 であり, 全方向に $\nabla_{\mathbf{u}} J = 0$ である ($\|\mathbf{u}\| = 1$ に対するラグランジュ乗数を導入しても同じ結果になる) .

誤差による $\bar{\mathbf{M}}$ の摂動は式 (33)~(35) で与えられる. 一方, \mathbf{L} については次のようになる .

$$\mathbf{L} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\bar{\xi}_\alpha + \Delta \xi_\alpha, \mathbf{u})^2 V_0[\xi_\alpha]}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})^2} = \frac{(\Delta \xi_\alpha, \mathbf{u})^2 V_0[\xi_\alpha]}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})^2} = \Delta_2 \mathbf{L} \quad (47)$$

すなわち, $\bar{\mathbf{L}} = \mathbf{O}$, $\Delta_1 \mathbf{L} = \mathbf{O}$ である. そこで式 (45) を次のように書く .

$$(\bar{\mathbf{M}} + \Delta_1 \mathbf{M} + \Delta_2 \mathbf{M})(\mathbf{u} + \Delta_1 \mathbf{u} + \Delta_2 \mathbf{u} + \dots) = \Delta_2 \mathbf{L}(\mathbf{u} + \Delta_1 \mathbf{u} + \Delta_2 \mathbf{u} + \dots) \quad (48)$$

両辺の $O(1)$, $O(\varepsilon)$, $O(\varepsilon^2)$ の項をそれぞれ取り出すと, 次の結果を得る (導出は付録 C) .

$$\Delta_1 \mathbf{u} = -\bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M} \mathbf{u} \quad (49)$$

$$\Delta_2 \mathbf{u} = -\bar{\mathbf{M}}^- \Delta_2 \mathbf{M} \mathbf{u} + \bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M} \bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M} \mathbf{u} + \bar{\mathbf{M}}^- \Delta_2 \mathbf{L} \mathbf{u} - \|\bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M} \mathbf{u}\|^2 \mathbf{u} \quad (50)$$

既に見たように, $E[\Delta_1 \mathbf{u}] = \mathbf{0}$ であり, $E[\Delta_2 \mathbf{M}] = \varepsilon N$ である. 式 (47) より $\Delta_2 \mathbf{L}$ の期待値は次のようになる .

$$\begin{aligned} E[\Delta_2 \mathbf{L}] &= E\left[\sum_{\alpha=1}^N \frac{(\Delta \xi_\alpha, \mathbf{u})^2 V_0[\xi_\alpha]}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})^2}\right] \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\mathbf{u}, E[\Delta \xi_\alpha \Delta \xi_\alpha^\top] \mathbf{u}) V_0[\xi_\alpha]}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})^2} \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\mathbf{u}, \varepsilon^2 V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u}) V_0[\xi_\alpha]}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})^2} = \varepsilon^2 \sum_{\alpha=1}^N \frac{V_0[\xi_\alpha]}{(\mathbf{u}, V_0[\xi_\alpha] \mathbf{u})} \\ &= \varepsilon^2 N \end{aligned} \quad (51)$$

以上より, 最尤推定量 $\hat{\mathbf{u}}_{\text{ML}}$ の期待値は次のようになる .

$$E[\hat{\mathbf{u}}_{\text{ML}}] = \mathbf{u} + \bar{\mathbf{M}}^- E[\Delta_1 \mathbf{M} \bar{\mathbf{M}}^- \Delta_1 \mathbf{M}] \mathbf{u}$$

$$-\varepsilon^2 \text{tr}(\bar{M}^-)u + O(\varepsilon^4) \quad (52)$$

これは式 (40) と一致する . これから次の結論を得る .

1. くりこみ法の解 \hat{u}_{RN} と最尤推定量 \hat{u}_{ML} の期待値は

$$E[\hat{u}_{\text{RN}} - \hat{u}_{\text{ML}}] = O(\varepsilon^4) \quad (53)$$

2. $\hat{u}_{\text{RN}}, \hat{u}_{\text{ML}}$ は共に KCR 下界を満たし, $O(\varepsilon^2)$ の項が共通であるから, これらの共分散行列は

$$V[\hat{u}_{\text{RN}}] = V[\hat{u}_{\text{ML}}] + O(\varepsilon^6) \quad (54)$$

11. まとめ

本論文で新たに発見した結論は次の通りである .

- くりこみ法は最尤推定の近似解法ではなく, KCR 下界を満たす解を構成し, それから $O(\varepsilon^2)$ の偏差項の一つを除去するものである .
- くりこみ法の解も最尤推定量も共に KCR 下界を満たすだけでなく, その期待値が $O(\varepsilon^4)$ を除いて一致し, その共分散行列も $O(\varepsilon^6)$ を除いて一致する .
- くりこみ法の解にも最尤推定量にも共通の誤差項 $\bar{M}^- E[\Delta_1 M \bar{M}^- \Delta_1 M]u$ が存在する .

上記の誤差項を推定して差し引けば, 最尤推定を上回る精度が達成できるはずである . これについては現在検討中である .

謝辞: 本研究の一部は文部科学省科学研究費基盤研究 C (2) (No. 15500113) によった . 米国 Alabama 大学の Nikolai Chernov 博士, オーストラリア Adelaide 大学の Wojciech Chojnacki 博士, ウクライナ Taras Shevchenko 国立大学の Alexander Kukosh 教授に有益な討論を感謝します .

参考文献

- [1] N. Chernov and C. Lesort, Statistical efficiency of curve fitting algorithms, *Comput. Stat. Data Anal.*, **47**-4 (2004-11), 713–728.
- [2] W. Chojnacki, M. J. Brooks and A. van den Hengel, Rationalising the renormalisation method of Kanatani, *J. Math. Imaging Vision*, **14**-1 (2001), 21–38.
- [3] W. Chojnacki, M. J. Brooks, A. van den Hengel and D. Gawley, On the fitting of surfaces to data with covariances, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **22**-11 (2000), 1294–1303.
- [4] W. Chojnacki, M. J. Brooks, A. van den Hengel and D. Gawley, A new approach to constrained parameter estimation applicable to some computer vision applications, *Proc. Statistical Methods in Video Processing Workshop*, June 2002, Copenhagen, Denmark, pp. 43–48.
- [5] W. Chojnacki, M. J. Brooks, A. van den Hengel and D. Gawley, From FNS to HEIV: A link between two vision parameter estimation methods, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **26**-2 (2004-2), 264–268.
- [6] R. Hartley and A. Zisserman, *Multiple View Geometry in Computer Vision*, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 2000.
- [7] 金谷健一, コンピュータビジョンのためのくりこみ法, 情報処理学会論文誌, **35**-2 (1994-2), 201–209.
- [8] 金谷健一, 当てはめ問題の最適推定と精度の理論限界, 情報処理学会論文誌, **36**-8 (1995-8), 1865–1873.
- [9] K. Kanatani, *Statistical Optimization for Geometric Computation: Theory and Practice*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1996.
- [10] 金谷 健一, くりこみ法その後: 波紋と発展, 情報処理学会研究報告 2003-CVIM-139-5 (2003-7), 33–40.
- [11] 金谷 健一, 最尤推定の最適性と KCR 下界, 情報処理学会研究報告 2005-CVIM-147-8 (2005-1), 59-64.
- [12] 金谷健一, 三島等, 未校正カメラによる 2 画像からの 3 次元復元とその信頼性評価, 情報処理学会論文誌: CVIM **42**-SIG 6 (2001-6), 1–8.
- [13] K. Kanatani, N. Ohta and Y. Kanazawa, Optimal homography computation with a reliability measure, *IE-ICE Trans. Inf. & Sys.*, **E83-D**-7 (2000-7), 1369–1374.
- [14] Y. Leedan and P. Meer, Heteroscedastic regression in computer vision: Problems with bilinear constraint, *Int. J. Comput. Vision.*, **37**-2 (2000), 127–150.
- [15] M. Mühlich and R. Mester, Unbiased errors-in-variables estimation using generalized eigensystem analysis, *Proc. 2nd Workshop on Statistical Methods in Video Processing*, May 2004, Prague, Czech, pp. 38–49.

付録 A. くりこみ法の高次解析

1. u は単位ベクトルであるという条件のもとに摂動するので, 次式が成立しなければならない .

$$\begin{aligned} & \|u + \Delta_1 u + \Delta_2 u + \dots\|^2 \\ &= (u + \Delta_1 u + \Delta_2 u + \dots, u + \Delta_1 u + \Delta_2 u + \dots) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (55)$$

$O(1), O(\varepsilon), O(\varepsilon^2)$ の項をそれぞれ取り出すと次のようになる .

$$(u, u) = \|u\|^2 = 1, \quad (u, \Delta_1 u) = 0 \quad (56)$$

$$(u, \Delta_2 u) = -(\Delta_1 u, \Delta_1 u) = -\|\Delta_1 u\|^2 \quad (57)$$

2. 式 (36) の $O(1)$ の項を取り出すと $\bar{M}u = 0$ となる .
3. 式 (36) の $O(\varepsilon)$ の項を取り出すと次のようになる .

$$\bar{M}\Delta_1 u + \Delta_1 M u = \Delta_1 \lambda u \quad (58)$$

両辺と u との内積をとると次のようになる .

$$(u, \bar{M}\Delta_1 u) + (u, \Delta_1 M u) = \Delta_1 \lambda (u, u) \quad (59)$$

$(u, \bar{M}\Delta_1 u) = (\bar{M}u, \Delta_1 u) = 0, (u, u) = \|u\| = 1$ および式 (34) より, $\Delta_1 \lambda$ が次のようになる .

$$\begin{aligned} \Delta_1 \lambda &= (u, \Delta_1 M u) \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \frac{(u, \Delta \xi_{\alpha})(\bar{\xi}_{\alpha}, u) + (u, \bar{\xi}_{\alpha})(\Delta \xi_{\alpha}, u)}{(u, V_0[\xi_{\alpha}]u)} = 0 \end{aligned} \quad (60)$$

行列 \bar{M} の 0 でない固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}$ とし, 対応する単位固有ベクトルの正規直交系を u_1, \dots, u_{n-1} とする (u は \bar{M} の固有値 0 に対する単位固有ベクトルであることに注意) . 式 (58) の両辺と u_i との内積をとると, 次のようになる .

$$(u_i, \bar{M}\Delta_1 u) + (u_i, \Delta_1 M u) = \Delta_1 \lambda (u_i, u) \quad (61)$$

これは $(u_i, \bar{M}\Delta_1 u) = (\bar{M}u_i, \Delta_1 u) = (\lambda_i u_i, \Delta_1 u)$ と $(u_i, u) = 0$ より, 次のように書ける .

$$\lambda_i (u_i, \Delta_1 u) + (u_i, \Delta_1 M u) = 0 \quad (62)$$

式 (56) の第 2 式より, $\Delta_1 u$ は u に直交するから, 正規直交系 u_1, \dots, u_n の線形結合で次のように表せる .

$$\begin{aligned}\Delta_1 u &= \sum_{i=1}^{n-1} (u_i, \Delta_1 u) u_i = - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{u_i (u_i, \Delta_1 M u)}{\lambda_i} \\ &= - \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{u_i u_i^\top}{\lambda_i} \right) \Delta_1 M u = - \bar{M}^- \Delta_1 M u \quad (63)\end{aligned}$$

4. 式 (36) の $O(\varepsilon^2)$ の項を取り出すと次のようになる .

$$\bar{M} \Delta_2 u + \Delta_2 M u + \Delta_1 M \Delta_1 u = \Delta_1 \lambda \Delta_1 u + \Delta_2 \lambda u \quad (64)$$

両辺と u との内積をとると次のようになる .

$$\begin{aligned}(u, \bar{M} \Delta_2 u) + (u, \Delta_2 M u) + (u, \Delta_1 M \Delta_1 u) \\ = \Delta_1 \lambda (u, \Delta_1 u) + \Delta_2 \lambda (u, u) \quad (65)\end{aligned}$$

$(u, \bar{M} \Delta_2 u) = (\bar{M} u, \Delta_2 u) = 0$, $(u, \Delta_1 u) = 0$, $(u, u) = \|u\| = 1$ および式 (63) より, 次式を得る .

$$\begin{aligned}\Delta_2 \lambda &= (u, \Delta_2 M u) + (u, \Delta_1 M \Delta_1 u) \\ &= (u, \Delta_2 M u) - (u, \Delta_1 M \bar{M}^- \Delta_1 M u) \quad (66)\end{aligned}$$

式 (64) の両辺と u_i との内積をとると,

$$\begin{aligned}(u_i, \bar{M} \Delta_2 u) + (u_i, \Delta_2 M u) + (u_i, \Delta_1 M \Delta_1 u) \\ = \Delta_1 \lambda (u_i, \Delta_1 u) + \Delta_2 \lambda (u_i, u) \quad (67)\end{aligned}$$

となる . $(u_i, \bar{M} \Delta_2 u) = (\bar{M} u_i, \Delta_2 u) = (\lambda_i u_i, \Delta_2 u)$ と $(u_i, u) = 0$ および式 (60), (63) より, 次式を得る .

$$\begin{aligned}\lambda_i (u_i, \Delta_2 u) + (u_i, \Delta_2 M u) \\ - (u_i, \Delta_1 M \bar{M}^- \Delta_1 M u) = 0 \quad (68)\end{aligned}$$

これと式 (57) より $\Delta_2 u$ が次のように表せる .

$$\begin{aligned}\Delta_2 u &= \sum_{i=1}^{n-1} (u_i, \Delta_2 u) u_i + (u, \Delta_2 u) u \\ &= - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{u_i (u_i, \Delta_2 M u)}{\lambda_i} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{u_i (u_i, \Delta_1 M \bar{M}^- \Delta_1 M u)}{\lambda_i} - \|\Delta_1 u\|^2 u \\ &= - \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{u_i u_i^\top}{\lambda_i} \right) \Delta_2 M u - \|\bar{M}^- \Delta_1 M u\|^2 u \\ &\quad + \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{u_i u_i^\top}{\lambda_i} \right) \Delta_1 M \bar{M}^- \Delta_1 M u \\ &= - \bar{M}^- \Delta_2 M u + \bar{M}^- \Delta_1 M \bar{M}^- \Delta_1 M u \\ &\quad - \|\bar{M}^- \Delta_1 M u\|^2 u \quad (69)\end{aligned}$$

付録 B. $E[\|\bar{M}^- \Delta_1 M u\|^2]$ の評価

$(\xi_\alpha, u) = 0$ であるから, 式 (34) より次のようになる .

$$\Delta_1 M u = \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\Delta \xi_\alpha, u) \bar{\xi}_\alpha}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} \quad (70)$$

したがって, 次のようになる .

$$\begin{aligned}E[\|\bar{M}^- \Delta_1 M u\|^2] &= E[(\bar{M}^- \Delta_1 M u, \bar{M}^- \Delta_1 M u)] \\ &= E[(\Delta_1 M u, (\bar{M}^-)^2 \Delta_1 M u)] \\ &= E\left[\left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{\xi}_\alpha (\Delta \xi_\alpha, u)}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)}, (\bar{M}^-)^2 \sum_{\beta=1}^N \frac{\bar{\xi}_\beta (\Delta \xi_\beta, u)}{(u, V_0[\xi_\beta] u)}\right)\right] \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^N \frac{E[(\Delta \xi_\alpha, u) (\Delta \xi_\beta, u)] (\bar{\xi}_\alpha, (\bar{M}^-)^2 \bar{\xi}_\beta)}{(u, V_0[\xi_\alpha] u) (u, V_0[\xi_\beta] u)} \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^N \frac{(u, E[\Delta \xi_\alpha \Delta \xi_\beta^\top] u) (\bar{\xi}_\alpha, (\bar{M}^-)^2 \bar{\xi}_\beta)}{(u, V_0[\xi_\alpha] u) (u, V_0[\xi_\beta] u)} \\ &= \sum_{\alpha, \beta=1}^N \frac{(u, \varepsilon^2 \delta_{\alpha\beta} V_0[\xi_\alpha] u) (\bar{\xi}_\alpha, (\bar{M}^-)^2 \bar{\xi}_\beta)}{(u, V_0[\xi_\alpha] u) (u, V_0[\xi_\beta] u)} \\ &= \varepsilon^2 \sum_{\alpha=1}^N \frac{(u, V_0[\xi_\alpha] u) (\bar{\xi}_\alpha, (\bar{M}^-)^2 \bar{\xi}_\alpha)}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)^2} \\ &= \varepsilon^2 \sum_{\alpha=1}^N \frac{(\bar{\xi}_\alpha, (\bar{M}^-)^2 \bar{\xi}_\alpha)}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} \\ &= \varepsilon^2 \text{tr} \left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{\bar{\xi}_\alpha \bar{\xi}_\alpha^\top}{(u, V_0[\xi_\alpha] u)} (\bar{M}^-)^2 \right) \\ &= \varepsilon^2 \text{tr}(\bar{M} (\bar{M}^-)^2) = \varepsilon^2 \text{tr}(\bar{M}^- \bar{M} \bar{M}^-) \\ &= \varepsilon^2 \text{tr}(\bar{M}^-) \quad (71)\end{aligned}$$

付録 C. 最尤推定量の高次解析

1. u が単位ベクトルであるという制約から, その摂動 $\Delta_1 u, \Delta_2 u$ に対して式 (55) が成立する .
2. 式 (48) の $O(1)$ の項を取り出すと $\bar{M} u = 0$ となる .
3. 式 (48) の $O(\varepsilon)$ の項を取り出すと次のようになる .

$$\bar{M} \Delta_1 u + \Delta_1 M u = 0 \quad (72)$$

両辺に左から \bar{M}^- を掛けると次のようになる .

$$P_u \Delta_1 u + \bar{M}^- \Delta_1 M u = 0 \quad (73)$$

ただし, $P_u = I - u u^\top$ は u に直交する方向への射影演算子である ($\bar{M}^- \bar{M} = P_u$ であることに注意 [9]) . 式 (56) の第 2 式より $\Delta_1 u$ は u に直交するから, $P_u \Delta_1 u = \Delta_1 u$ である . これから式 (49) が得られる .

4. 式 (48) の $O(\varepsilon^2)$ の項を取り出すと次のようになる .

$$\bar{M} \Delta_2 u + \Delta_1 M \Delta_1 u + \Delta_2 M u = \Delta_2 L u \quad (74)$$

両辺に左から \bar{M}^- を掛け, 移項すると次式を得る .

$$\begin{aligned}P_u \Delta_2 u &= -\bar{M}^- \Delta_2 M u + \bar{M}^- \Delta_1 M \bar{M}^- \Delta_1 M u \\ &\quad + \bar{M}^- \Delta_2 L u \quad (75)\end{aligned}$$

これは $\Delta_2 u$ の u に直交する成分である . u 方向の成分は式 (57) から $-\|\Delta_1 u\|^2 u$ であり,

$$\Delta_2 u = P_u \Delta_2 u - \|\Delta_1 u\|^2 u \quad (76)$$

となる . $\Delta_1 u$ は式 (37), (49) から分かるように, くりこみ法の場合と等しい . したがって, 既に示したように $\|\Delta_1 u\|^2 = -\|\bar{M}^- \Delta_1 M u\|^2 u$ である . 以上より式 (50) を得る .