Vol.2012-CVIM-182 No.33
2012/5/24

幾何学的推定のための最尤推定の超精度補正

金谷健一[1,a)]

概要：コンピュータビジョンにおいて，ノイズのあるデータから幾何学的拘束を利用してパラメータを最適に計算する幾何学的推定の最もよく知られた方法は最尤推定である．本論文では最尤推定解の精度をさらに高める「超精度補正」を再吟味する．従来は拘束が単一のスカラ方程式の場合が調べられていたが，本論文では拘束がベクトル方程式で与えられる複数拘束の場合に拡張する．そして，精密な誤差解析を行い，従来は無視されていた項の存在を明らかにする．ただし，その項の解の精度に与える影響は小さく，実際問題では無視することができる．

Hyperaccurate Correction of Maximum Likelihood for Geometric Estimation

Kenichi Kanatani[1,a)]

Abstract: The best known method for geometric estimation for computer vision, optimally computing parameters from noisy data making use of geometric constraints, is maximum likelihood. This paper reinvestigates “hyperaccurate correction” for further improving the accuracy of the maximum likelihood solution. In the past, only the case of a single scalar constraint was studied. In this paper, we extend existing results to multiple constraints given in the form of vector equations. Doing detailed error analysis, we illuminate the existence of a term that has been ignored in the past. However, that term has small influence over the accuracy of the solution and can be ignored in practical applications.

1. まえがき

コンピュータビジョンの重要な基礎技術の一つは，「幾何学的拘束」を利用して画像上で観測したデータから対象の 2 次元および 3 次元形状を計算することである．ここで幾何学的拘束というのは，対象が直線である，平面である，平行である，直交する，カメラの撮像が透視投影であるのような，比較的簡単な方程式で表される図形の性質のことを言う．このような幾何学的拘束に基づく推論を以下,「幾何学的推定」と呼ぶ．観測データにノイズ（以下，データに含まれる誤差を「ノイズ」と呼ぶ）があるときの幾何学的推定は 1980 年代から筆者らを含む多くの研究者によって精力的に研究され，さまざまな方法が確立されている [2], [5].

現在，最も精度が高いと考えられているのは，「最尤推定」に基づく方法と「くりこみ法」に基づく方法である [8]. 最尤推定は「マハラノビス距離」（特別の場合が「再投影誤差」）を最小にするものであり，その解の偏差を理論的に解析してそれを差し引く「超精度補正 [6], [7]」によってさらに精度が向上する．一方，筆者によって提案されたくりこみ法は，何らかの評価関数を最小にするものではなく，ノイズの統計的挙動をモデル化し，誤差解析によって偏差のない解を推定しようとするものである [3], [4], [5] ．最近，さらに詳細な誤差解析によってノイズの 2 次の項までの偏差を完全に除去する「超精度くりこみ法 [9], [10]」が提案され，実験によって最尤推定を上回る精度であることが確認されている [22], [24]. 精密な比較実験によると，最尤推定の超精度補正のほうがわずかに精度が高い．しかし，ノイズが大きいと最尤推定解を計算するための FNS 法に代表される反復解法が必ずしも収束しない．一方，超精度くりこみ法は「超精度最小二乗法 [11], [12], [21]」と呼ぶ精度の高い代数的解法から出発するのでノイズにロバストで，数回の反復で収束するという一長一短がある．

統計学においても最尤推定の偏差が研究されている．統計学における推定問題（「統計的推定」と呼ぶ）では，観測

1 岡山大学大学院自然科学研究科
Department of Computer Science, Okayama University, Japan
a) kanatani@suri.cs.okayama-u.ac.jp

データを直接にノイズ項を含んだ式で表し（「統計的モデル」と呼ぶ），データ数 $N \to \infty$ の漸近的解析が行われる．Okatani らは幾何学的推定問題を補助変数を導入して非線形回帰問題に帰着させ，「セミパラメトリックモデル」による推定 [18]，拘束が定義する超曲面の曲率の解析による偏差の除去 [19]，射影スコアに基づく偏差の除去 [20] を試みている．本論文で扱う幾何学的推定が統計的推定と異なるのは，幾何学的拘束を常に陰関数（「幾何学的モデル」）として扱い，ノイズレベル σ に対して $\sigma \to 0$ の摂動解析を行うこと点である．

本論文では，最尤推定の超精度補正を再吟味する．従来は拘束が単一のスカラ方程式の場合が調べられていたが，ここでは拘束がベクトル方程式で与えられる複数拘束の場合に拡張する．そして，精密な解析を行い，従来は無視されていた項の存在を明らかにする．

2. 幾何学的推定

幾何学的推定を次のように定式化する．誤差を含む N 個のデータベクトル $\boldsymbol{x}_1, ..., \boldsymbol{x}_N$ が得られているとする．これらのノイズがない真値 $\bar{\boldsymbol{x}}_1, ..., \bar{\boldsymbol{x}}_N$ はどれもある L 個の方程式（拘束）

$$F^{(k)}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta}) = 0, \qquad k = 1, ..., L \tag{1}$$

を満たすとする．ただし，$\boldsymbol{\theta}$ は未知パラメータベクトルであり，対象の 2 次元/3 次元形状を記述したり，2 次元/3 次元位置や運動を表したりする．式 (1) 中の $F^{(k)}(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta})$ は一般に $\boldsymbol{x}$ の複雑な非線形関数であるが，多くの問題では未知パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ に関しては線形であったり，パラメータをつけ直して線形に表せたりすることが多い．そのような場合は式 (1) が次の形に表せる．

$$(\boldsymbol{\xi}^{(k)}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{\theta}) = 0, \qquad k = 1, ..., L \tag{2}$$

ここに $\boldsymbol{\xi}^{(k)}(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}$ のある（ベクトル値）非線形関数である．ただし，ベクトル $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$ の内積を $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ と書く．以下ではさらに一般化して，式 (2) の L 個の式は $\boldsymbol{\theta}$ に関して線形独立ではなく，r 個のみが独立であるとし，r を拘束の「ランク」と呼ぶ．

【例 1 】（楕円の当てはめ） 与えられた点 (x_α, y_α)，$\alpha = 1, ..., N$ に楕円

$$Ax^2 + 2Bxy + Cy^2 + 2f_0(Dx + Ey) + f_0^2 F = 0 \tag{3}$$

を当てはめる．$\boldsymbol{\xi}(x, y)$，$\boldsymbol{\theta}$ を

$$\boldsymbol{\xi} = (x^2, 2xy, y^2, 2f_0x, 2f_0y, f_0^2)^\top, \quad \boldsymbol{\theta} = (A, B, C, D, E, F)^\top \tag{4}$$

と定義すると，式 (3) は式 (2) の形になる ($L = 1$)．ただし，f_0 は有限長数値計算の安定化のためにベクトル $\boldsymbol{\xi}$ の各成分のオーダーをそろえるスケール定数であり，データ x_α, y_α とほぼ同じ大きさにとる．

【例 2 】（基礎行列の計算） 同一シーンを異なる位置から撮影した 2 画像において，第 1 画像の点 (x, y) が第 2 画像の点 (x', y') に対応しているとき，両者は次の「エピ極線方程式」を満たす [2]（f_0 は楕円の場合と同様の数値計算安定化のためのスケール定数）．

$$\left(\begin{pmatrix} x \\ y \\ f_0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{F}\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ f_0 \end{pmatrix}\right) = 0 \tag{5}$$

ただし，$\boldsymbol{F}$ はそれぞれの画像を撮影したカメラの相対位置や内部パラメータに依存する（シーンや各点の位置にはよらない）ランク 2 の行列であり，「基礎行列」と呼ばれる．これを画像中の対応点から計算することにより，カメラ位置やシーンの 3 次元形状を計算することができる．

$$\boldsymbol{\xi} = (xx', xy', f_0x, yx', yy', f_0y, f_0x', f_0y', f_0^2)^\top, \quad \boldsymbol{\theta} = (F_{11}, F_{12}, F_{13}, F_{21}, F_{22}, F_{23}, F_{31}, F_{32}, F_{33})^\top \tag{6}$$

と定義すると，式 (5) は式 (2) の形になる ($L = 1$)．

【例 3 】（射影変換の計算） 平面あるいは無限遠方のシーンを 2 台のカメラで撮影すると，第 1 画像の点 (x, y) が第 2 画像の点 (x', y') に対応しているとき，両者は次の「射影変換」で結ばれる [2]（f_0 は数値計算安定化のためのスケール定数）．

$$x' = f_0\frac{h_{11}x + h_{12}y + h_{13}f_0}{h_{31}x + h_{32}y + h_{33}f_0}, \quad y' = f_0\frac{h_{21}x + h_{22}y + h_{23}f_0}{h_{31}x + h_{32}y + h_{33}f_0} \tag{7}$$

これは次のように書き直せる．

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ f_0 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ f_0 \end{pmatrix} \tag{8}$$

ただし，$\simeq$ は両辺が零でない定数倍を除いて等しいことを表す．これは両辺のベクトルが平行であることを表すので，次のようにも書ける．

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ f_0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ f_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

この 3 成分を取り出すと次のように式 (2) の形に書ける [17]($L = 3$)．

$$(\boldsymbol{\xi}^{(1)}, \boldsymbol{\theta}) = 0, \quad (\boldsymbol{\xi}^{(2)}, \boldsymbol{\theta}) = 0, \quad (\boldsymbol{\xi}^{(3)}, \boldsymbol{\theta}) = 0 \tag{10}$$

ただし，次のように置いた．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta} &= (h_{11}\, h_{12}\, h_{13}\, h_{21}\, h_{22}\, h_{23}\, h_{31}\, h_{32}\, h_{33})^\top, \\ \boldsymbol{\xi}^{(1)} &= (0, 0, 0, -f_0x, -f_0y, -f_0^2, xy', yy', f_0y')^\top, \\ \boldsymbol{\xi}^{(2)} &= (f_0x, f_0y, f_0^2, 0, 0, 0, -xx', -yx', -f_0x')^\top, \\ \boldsymbol{\xi}^{(3)} &= (-xy', -yy', -f_0y', xx', yx', f_0x', 0, 0, 0)^\top \end{aligned} \tag{11}$$

式 (10) の 3 式は線形従属であり，独立な式は 2 個である ($r = 2$).

3. ノイズのモデル化

各データ $\boldsymbol{x}_\alpha$ はその真の値 $\bar{\boldsymbol{x}}_\alpha$ に期待値 $\boldsymbol{0}$，共分散行列 $\sigma^2 V_0[\boldsymbol{x}_\alpha]$ の独立な正規分布に従うノイズ項 $\Delta\boldsymbol{x}_\alpha$ が加わると仮定する．ただし，σ はノイズの強度を表す未知の定数（「ノイズレベル」と呼ぶ）であり，$V_0[\boldsymbol{x}_\alpha]$ はその方向特性を表す既知の行列（「正規化共分散行列」と呼ぶ）である．このように表すのは，実際問題として不確定性の絶対的大きさを測定することが困難であるということ，およびパラメータ $\boldsymbol{\theta}$ が σ に無関係に $V_0[\boldsymbol{x}_\alpha]$ のみから推定できるという事実を反映したものである．ノイズの分布が方向によらず（「等方」），また α によらない（「一様」）であれば，$V_0[\boldsymbol{x}_\alpha] = \boldsymbol{I}$（単位行列）と置ける．

変換した $\boldsymbol{\xi}^{(k)}(\boldsymbol{x}_\alpha)$ (以下 $\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}$ と略記) を次のように書く．

$$\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)} = \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)} + \Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)} + \Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)} + \cdots \tag{12}$$

ただしバーはノイズのないときの値であり，Δ_i はノイズの i 次の項を表す．変換 $\boldsymbol{\xi}^{(k)}(\boldsymbol{x})$ のヤコビ行列を用いると，1 次の誤差項 $\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}$ は $\boldsymbol{x}_\alpha$ のノイズ項 $\Delta\boldsymbol{x}_\alpha$ を用いて次のように書ける．

$$\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)} = \boldsymbol{T}_\alpha^{(k)}\Delta\boldsymbol{x}_\alpha, \qquad \boldsymbol{T}_\alpha^{(k)} \equiv \left.\frac{\partial\boldsymbol{\xi}^{(k)}(\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}}\right|_{\boldsymbol{x}=\bar{\boldsymbol{x}}_\alpha} \tag{13}$$

そこで $\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}$, $k = 1, ..., L$ の共分散行列を次のように定義する（$E[\,\cdot\,]$ は期待値).

$$\begin{aligned} V^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha] &\equiv E[\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top}] = \boldsymbol{T}_\alpha^{(k)}E[\Delta\boldsymbol{x}_\alpha\Delta\boldsymbol{x}_\alpha^\top]\boldsymbol{T}_\alpha^{(l)\top} \\ &= \boldsymbol{T}_\alpha^{(k)}V[\boldsymbol{x}_\alpha]\boldsymbol{T}_\alpha^{(l)\top} \end{aligned} \tag{14}$$

【例 4 】（楕円の当てはめ）例 1 の楕円の当てはめでは 1 次の誤差 $\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha$ は次のように書ける．

$$\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha = \boldsymbol{T}_\alpha\begin{pmatrix}\Delta x_\alpha \\ \Delta y_\alpha\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{T}_\alpha = 2\begin{pmatrix}\bar{x}_\alpha & \bar{y}_\alpha & 0 & f_0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{x}_\alpha & \bar{y}_\alpha & 0 & f_0 & 0\end{pmatrix}^\top \tag{15}$$

2 次の誤差 $\Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha$ は次のようになる．

$$\Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha = (\Delta x_\alpha^2, 2\Delta x_\alpha\Delta y_\alpha, \Delta y_\alpha^2, 0, 0, 0)^\top \tag{16}$$

【例 5 】（基礎行列の計算）例 2 の基礎行列の計算では 1 次の誤差 $\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha$ は次のように書ける．

$$\begin{aligned} \Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha &= \boldsymbol{T}_\alpha(\Delta x_\alpha, \Delta y_\alpha, \Delta x'_\alpha, \Delta y'_\alpha)^\top \\ \boldsymbol{T}_\alpha &= \begin{pmatrix} \bar{x}'_\alpha & \bar{y}'_\alpha & f_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{x}'_\alpha & \bar{y}'_\alpha & f_0 & 0 & 0 & 0 \\ \bar{x}_\alpha & 0 & 0 & \bar{y}_\alpha & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{x}_\alpha & 0 & 0 & \bar{y}_\alpha & 0 & 0 & f_0 & 0 \end{pmatrix}^\top \end{aligned} \tag{17}$$

2 次の誤差 $\Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha$ は次のようになる．

$$\begin{aligned} \Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha = &(\Delta x_\alpha\Delta x'_\alpha, \Delta x_\alpha\Delta y'_\alpha, 0, \Delta y_\alpha\Delta x'_\alpha, \Delta y_\alpha\Delta y'_\alpha, \\ &0, 0, 0, 0)^\top \end{aligned} \tag{18}$$

【例 6 】（射影変換の計算）例 3 の射影変換の計算では 1 次の誤差 $\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}$ は次のように書ける．

$$\begin{aligned} \Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)} &= \boldsymbol{T}_\alpha^{(k)}(\Delta x_\alpha, \Delta y_\alpha, \Delta x'_\alpha, \Delta y'_\alpha)^\top, \\ \boldsymbol{T}_\alpha^{(1)} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -f_0 & 0 & 0 & \bar{y}'_\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -f_0 & 0 & 0 & \bar{y}'_\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{x}_\alpha & \bar{y}_\alpha & f_0 \end{pmatrix}^\top, \\ \boldsymbol{T}_\alpha^{(2)} &= \begin{pmatrix} f_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\bar{x}'_\alpha & 0 & 0 \\ 0 & f_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\bar{x}'_\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\bar{x}_\alpha & -\bar{y}_\alpha & -f_0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^\top, \\ \boldsymbol{T}_\alpha^{(3)} &= \begin{pmatrix} -\bar{y}'_\alpha & 0 & 0 & \bar{x}'_\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\bar{y}'_\alpha & 0 & 0 & \bar{x}'_\alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{x}_\alpha & \bar{y}_\alpha & f_0 & 0 & 0 & 0 \\ -\bar{x}_\alpha & -\bar{y}_\alpha & -f_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^\top \end{aligned} \tag{19}$$

2 次の誤差 $\Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha$ は次のようになる．

$$\begin{aligned} \Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(1)} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, \Delta x_\alpha\Delta y'_\alpha, \Delta y_\alpha\Delta y'_\alpha, 0)^\top, \\ \Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(2)} &= (0, 0, 0, 0, 0, 0, -\Delta x'_\alpha\Delta x_\alpha, -\Delta x'_\alpha\Delta y_\alpha, 0)^\top, \\ \Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(3)} &= (-\Delta y'_\alpha\Delta x_\alpha, -\Delta y'_\alpha\Delta y_\alpha, 0, \Delta x'_\alpha\Delta x_\alpha, \\ &\quad \Delta x'_\alpha\Delta y_\alpha, 0, 0, 0, 0)^\top \end{aligned} \tag{20}$$

ヤコビ行列 $\boldsymbol{T}_\alpha^{(k)}$ はデータの真値を含んでいるので，実際の計算では観測値を代入する．このようにしても，また高次の誤差項を考えなくても，共分散行列の評価に関しては影響がないことが確認されている．

4. 最尤推定

以上の状況のもとでの「最尤推定」とは「マハラノビス距離」

$$J = \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{x}_\alpha - \bar{\boldsymbol{x}}_\alpha, V_0[\boldsymbol{x}_\alpha]^{-1}(\boldsymbol{x}_\alpha - \bar{\boldsymbol{x}}_\alpha)) \tag{21}$$

を制約条件

$$(\boldsymbol{\xi}(\bar{\boldsymbol{x}}_\alpha), \boldsymbol{\theta}) = 0 \tag{22}$$

のもとで最小化することである [8]．幾何学的には，データ空間の N 個のデータ点 $\boldsymbol{x}_\alpha$ に式 $(\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{\theta}) = 0$ が定義する "超曲面" を当てはめていると解釈できる．ただし，各点と超曲面の隔たりを通常のユークリッド距離で測るのではなく，正規化共分散行列 $V_0[\boldsymbol{x}_\alpha]^{-1}$ に関する式 (21) のマハラノビス距離で測る．特にノイズが一様等方であれば $V_0[\boldsymbol{x}_\alpha]$ $= \boldsymbol{I}$ 置けるので，式 (21) の右辺は $(1/N)\sum_{\alpha=1}^{N}\|\boldsymbol{x}_\alpha - \bar{\boldsymbol{x}}_\alpha\|^2$

となり，「再投影誤差」と呼ばれる．

式 (21) を制約条件 (22) のもとで最小化することは複雑な非線形問題であり，直接的に解くのが困難であるが，$\boldsymbol{x}_\alpha$ でなく変換した $\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}$ の誤差が期待値 $\mathbf{0}$，共分散行列 $V^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha] = \sigma^2 V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]$ の正規分布に従うとみなせば計算が簡単になる．その場合は制約条件 (22) が消去され，式 (21) のマハラノビス距離は次のように書ける [5].

$$J = \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3} W_\alpha^{(kl)}\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top} \tag{23}$$

ただし，$W_\alpha^{(kl)}$ は $(\boldsymbol{\theta}, V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{\theta})$ を (kl) 要素とする行列のランクを r で打ち切った一般逆行列の (kl) 要素である．これを次のように略記する．

$$\left(W_\alpha^{(kl)}\right) = \left((\boldsymbol{\theta}, V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{\theta})\right)_r^- \tag{24}$$

式 (23) は「サンプソン誤差」と呼ばれ [2], 単一拘束 ($L = 1$) の場合は Chojnacki ら [1] の「FNS 法」により，多拘束 ($L > 2$) の場合はそれを拡張した「多拘束 FNS 法 [13], [17], [22], [23]」によって最小化できる．式 (23) の最小化解は必ずしも式 (21) を最小にする最尤推定解とは限らないが，式 (23) の最小化解を用いて式 (23) を補正し（「修正サンプソン誤差」と呼ぶ），これを FNS 法や多拘束 FNS 法で最小化し，これを反復すると厳密な最尤推定解が得られる [15]．この反復は数回で収束し，解は有効数字の最初の数桁は変化しないので [13], [14], [16], [23]，実質的にサンプソン誤差最小化解を最尤推定解と同一視することができる．そこで式 (23) を最小化する解の誤差解析を行う．

5. 誤差解析

式 (4) の微分は次のようになる [13], [17], [22], [23].

$$\nabla_{\mathbf{u}} J = 2(\boldsymbol{M} - \boldsymbol{L})\boldsymbol{\theta} \tag{25}$$

$$\boldsymbol{M} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3} W_\alpha^{(kl)}\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top},$$
$$\boldsymbol{L} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3} W_\alpha^{(km)}W_\alpha^{(ln)}(\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(m)},\boldsymbol{\theta})(\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(n)},\boldsymbol{\theta})V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha] \tag{26}$$

式 (12) を代入すると次のように書ける（以下 “$+\cdots$” は σ の 3 次以上の項を表す）.

$$\boldsymbol{M} = \bar{\boldsymbol{M}} + \Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_2\boldsymbol{M} + \cdots \tag{27}$$

ただし，次のように置いた．

$$\Delta_1\boldsymbol{M} = \Delta_1^0\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M}, \tag{28}$$

$$\Delta_2\boldsymbol{M} = \Delta_2^0\boldsymbol{M} + \Delta_2^*\boldsymbol{M} + \Delta_2^\dagger\boldsymbol{M} \tag{29}$$

$$\Delta_1^0\boldsymbol{M} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3} \bar{W}_\alpha^{(kl)}(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)\top} + \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top}), \tag{30}$$

$$\Delta_1^*\boldsymbol{M} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3} \Delta_1 W_\alpha^{(kl)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)\top} \tag{31}$$

$$\Delta_2^0\boldsymbol{M} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3} \bar{W}_\alpha^{(kl)}(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top} + \Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)\top} + \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}\Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top}) \tag{32}$$

$$\Delta_2^*\boldsymbol{M} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3} \Delta_1 W_\alpha^{(kl)}(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)\top} + \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top}) \tag{33}$$

$$\Delta_2^\dagger\boldsymbol{M} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3} \Delta_2 W_\alpha^{(kl)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)\top} \tag{34}$$

$\Delta_1 W_\alpha^{(kl)}$, $\Delta_2 W_\alpha^{(kl)}$ は次のようになる（導出は付録）.

$$\Delta_1 W_\alpha^{(kl)} = -2\sum_{m,n=1}^{3} \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}(\Delta_1\boldsymbol{\theta}, V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}}) \tag{35}$$

$$\Delta_2 W_\alpha^{(kl)} = -\sum_{m,n=1}^{3} \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}\Big((\Delta_1\boldsymbol{\theta}, V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\Delta_1\boldsymbol{\theta}) + 2(\Delta_2\boldsymbol{\theta}, V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}})\Big) \tag{36}$$

式 (26) の行列 $\boldsymbol{L}$ については $(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}, \bar{\boldsymbol{\theta}}) = 0$ より次のようになる．

$$\boldsymbol{L} = \bar{\boldsymbol{L}} + \Delta_1\boldsymbol{L} + \Delta_2\boldsymbol{L} + \cdots, \quad \bar{\boldsymbol{L}} = \Delta_1\boldsymbol{L} = \boldsymbol{O}, \tag{37}$$

$$\Delta_2\boldsymbol{L} = \frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3} \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}\Big((\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(m)},\Delta_1\boldsymbol{\theta})(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(n)},\Delta_1\boldsymbol{\theta}) + (\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(m)},\Delta_1\boldsymbol{\theta})(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(n)},\bar{\boldsymbol{\theta}}) + (\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(m)},\bar{\boldsymbol{\theta}})(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(n)},\Delta_1\boldsymbol{\theta}) + (\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(m)},\bar{\boldsymbol{\theta}})(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(n)},\bar{\boldsymbol{\theta}})\Big)V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha] \tag{38}$$

式 (25) を $\mathbf{0}$ と置いて得られる $\boldsymbol{M}\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{\theta}$ にこれらを代入すると次のようになる．

$$(\bar{\boldsymbol{M}} + \Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_2\boldsymbol{M} + \cdots)(\bar{\boldsymbol{\theta}} + \Delta_1\boldsymbol{\theta} + \Delta_2\boldsymbol{\theta} + \cdots) = \Delta_2\boldsymbol{L}(\bar{\boldsymbol{\theta}} + \Delta_1\boldsymbol{\theta} + \Delta_2\boldsymbol{\theta} + \cdots) \tag{39}$$

両辺の誤差のオーダーが等しい項を等値すると次のようになる．

$$\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_1\boldsymbol{\theta} + \Delta_1\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{0} \tag{40}$$

$$\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_2\boldsymbol{\theta} + \Delta_1\boldsymbol{M}\Delta_1\boldsymbol{\theta} + \Delta_2\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}} = \Delta_2\boldsymbol{L}\bar{\boldsymbol{\theta}} \tag{41}$$

式 (40) に $\bar{\boldsymbol{M}}^-$（$\bar{\boldsymbol{M}}$ の一般逆行列）を掛けて，$\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{M}} = \boldsymbol{P}_{\bar{\boldsymbol{\theta}}}$（$\bar{\boldsymbol{\theta}}$ 方向の射影行列）となること，および $\Delta_1\boldsymbol{\theta}$ は $\bar{\boldsymbol{\theta}}$ に直交することに注意すると，$\boldsymbol{\theta}$ の 1 次の誤差項は次のよう

に書ける．

$$\Delta_1\boldsymbol{\theta} = -\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}} = -\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}} \tag{42}$$

ただし，$(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \bar{\boldsymbol{\theta}}) = 0$ より $\Delta_1^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{0}$ であることを用いた．式 (41) に $\bar{\boldsymbol{M}}^-$ を掛けて，$\Delta_2^\perp\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{P}_{\bar{\boldsymbol{\theta}}}\Delta_2\boldsymbol{\theta}$（$\Delta_2\boldsymbol{\theta}$ の $\bar{\boldsymbol{\theta}}$ に直交する誤差成分）と置くと次のようになる．

$$\Delta_2^\perp\boldsymbol{\theta} = -\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\Delta_1\boldsymbol{\theta} - \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}} + \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{L}\bar{\boldsymbol{\theta}} \tag{43}$$

6. 偏差の解析

誤差の奇数次の項の期待値は 0 であるから，$E[\Delta_1\boldsymbol{\theta}] = \boldsymbol{0}$ である．ゆえに偏差は $E[\Delta_2^\top\boldsymbol{\theta}]$ で評価される．そこで

$$E[\Delta_2^\perp\boldsymbol{\theta}] = -E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\Delta_1\boldsymbol{\theta}] - E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] + E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{L}\bar{\boldsymbol{\theta}}] \tag{44}$$

の各項を順に評価する．

6.1 第 1 項

式 (44) の第 1 項は次のように書ける．

$$-E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\Delta_1\boldsymbol{\theta}] = E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] + E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] \tag{45}$$

この第 1 項は次のようになる．

$$\begin{aligned}
&E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] \\
&= E[\frac{1}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha,\beta=1}^N\sum_{k,l,m,n=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(kl)}\bar{W}_\beta^{(mn)}\Big(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)\top} \\
&\quad +\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top}\Big)\bar{\boldsymbol{M}}^-(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\beta^{(m)}, \bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\beta^{(n)}] \\
&= \frac{\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l,m,n=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(kl)}\bar{W}_\alpha^{(mn)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)}, \\
&\quad \bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(n)})V_0^{(km)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}} \\
&\quad +\frac{\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l,m,n=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(kl)}\bar{W}_\alpha^{(mn)}(\bar{\boldsymbol{\theta}}, \\
&\quad V_0^{(ml)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(n)})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}
\end{aligned} \tag{46}$$

ただし，誤差の独立性の仮定より，

$$E[\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\beta^{(l)\top}] = \sigma^2\delta_{\alpha\beta}V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha] \tag{47}$$

となることを用いた（$\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカデルタ）．一方

$$\Delta_1^*\boldsymbol{M} = \frac{2}{N}\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l,m,n=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}, V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)\top} \tag{48}$$

より，式 (45) の第 2 項は

$$\begin{aligned}
&E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] \\
&= E[\frac{2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}, \\
&\quad V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}})(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)}, \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}] \\
&= \frac{2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)}, \\
&\quad E[\Delta_1\boldsymbol{\theta}\Delta_1\boldsymbol{\theta}^\top]V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)} \\
&= \frac{2\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)}, \bar{\boldsymbol{M}}^-V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}
\end{aligned} \tag{49}$$

となる．ただし，$E[\Delta_1\boldsymbol{\theta}\Delta_1\boldsymbol{\theta}^\top]$ が $\boldsymbol{\theta}$ の共分散行列の第 1 近似であり，「KCR の下界」と呼ばれる精度の理論限界に一致すること [5], [7], [12], [17], [22]，すなわち

$$E[\Delta_1\boldsymbol{\theta}\Delta_1\boldsymbol{\theta}^\top] = \frac{\sigma^2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^- \tag{50}$$

となることを用いた．以上より，式 (45) は次のようになる．

$$\begin{aligned}
&E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\Delta_1\boldsymbol{\theta}] \\
&= \frac{\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l,m,n=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(kl)}\bar{W}_\alpha^{(mn)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)}, \bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(n)}) \\
&\quad V_0^{(km)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}} + \frac{3\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)}, \\
&\quad \bar{\boldsymbol{M}}^-V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}
\end{aligned} \tag{51}$$

6.2 第 2 項

式 (44) の第 2 項は次のように書ける．

$$-E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] = -E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] - E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] \tag{52}$$

この第 1 項は次のようになる．

$$\begin{aligned}
&-E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] = -\bar{\boldsymbol{M}}^-\frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(kl)} \\
&\quad \Big(E[\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top}] + \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}E[\Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)\top}]\Big)\bar{\boldsymbol{\theta}} \\
&= -\frac{\sigma^2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l=1}^3 \bar{W}_\alpha^{(kl)}\Big(V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}} + (\boldsymbol{e}_\alpha^{(k)}, \bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(l)}\Big)
\end{aligned} \tag{53}$$

ただし，$\boldsymbol{e}_\alpha^{(k)}$ は次の関係によって定義した．

$$E[\Delta_2\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)}] = \sigma^2\boldsymbol{e}_\alpha^{(k)} \tag{54}$$

式 (52) の第 2 項は次のようになる．

$$\begin{aligned}
&-E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}] \\
&= -E[\bar{\boldsymbol{M}}^-\frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^N\sum_{k,l=1}^3 \Delta_1W_\alpha^{(kl)}(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)}, \bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^{(k)}]
\end{aligned} \tag{55}$$

$$=-2\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\frac{1}{N}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\theta}},$$
$$E[\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(l)}(\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}})^{\top}]\bar{\boldsymbol{M}}^{-}V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(k)} \tag{56}$$

上式中の $E[\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(l)}(\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}})^{\top}]$ は次のようになる．

$$E[\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(l)}(\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}})^{\top}]=E[\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(l)}\Big(\frac{1}{N}\sum_{\beta=1}^{N}\sum_{p,q=1}^{3}\bar{W}_{\beta}^{(pq)}$$
$$\Big(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\beta}^{(p)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\beta}^{(q)\top}+\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\beta}^{(p)}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\beta}^{(q)\top}\Big)\bar{\boldsymbol{\theta}}\Big)^{\top}]$$
$$=\frac{1}{N}\sum_{\beta=1}^{N}\sum_{p,q=1}^{3}\bar{W}_{\beta}^{(pq)}E[\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(l)}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\beta}^{(q)\top}]\bar{\boldsymbol{\theta}}\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\beta}^{(p)\top}$$
$$=\frac{\sigma^2}{N}\sum_{p,q=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(pq)}V_0^{(lq)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(p)\top} \tag{57}$$

ゆえに式 (56) は次のようになる．

$$-E[\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\Delta_2^{*}\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}]$$
$$=-\frac{2\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n,p,q=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}\bar{W}_{\alpha}^{(pq)}(\bar{\boldsymbol{\theta}},$$
$$V_0^{(lq)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}})(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(p)},\bar{\boldsymbol{M}}^{-}V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(k)}$$
$$=-\frac{2\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(kl)}\bar{W}_{\alpha}^{(mn)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(k)},$$
$$\bar{\boldsymbol{M}}^{-}V_0^{(lm)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(n)} \tag{58}$$

ただし，式 (24) より，$\bar{W}_{\alpha}^{(kl)}$ を (kl) 要素とする行列を $\bar{\boldsymbol{W}}_{\alpha}$ と書けば，$(\bar{\boldsymbol{\theta}},V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}})$ を (kl) 要素とする行列は $\bar{\boldsymbol{W}}_{\alpha}^{-}$ であり，恒等式 $\bar{\boldsymbol{W}}_{\alpha}\bar{\boldsymbol{W}}_{\alpha}^{-}\bar{\boldsymbol{W}}_{\alpha}=\bar{\boldsymbol{W}}_{\alpha}$ より

$$\sum_{m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}(\bar{\boldsymbol{\theta}},V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{W}_{\alpha}^{(nl)}=\bar{W}_{\alpha}^{(kl)} \tag{59}$$

が成り立つことを用いた．上の結果より，式 (52) は次のように書ける．

$$-E[\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\Delta_2\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}]$$
$$=-\frac{\sigma^2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(kl)}\Big(V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}+(\boldsymbol{e}_{\alpha}^{(k)},\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(l)}\Big)$$
$$-\frac{2\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(kl)}\bar{W}_{\alpha}^{(mn)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(k)},$$
$$\bar{\boldsymbol{M}}^{-}V_0^{(lm)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(n)} \tag{60}$$

6.3 第 3 項

式 (44) の第 3 項は次のように書ける．

$$E[\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\Delta_2\boldsymbol{L}\bar{\boldsymbol{\theta}}]$$
$$=E[\frac{1}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(m)},\Delta_1\boldsymbol{\theta})(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(n)},$$
$$\Delta_1\boldsymbol{\theta})V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}] \tag{61}$$
$$+E[\frac{1}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(m)},\Delta_1\boldsymbol{\theta})$$
$$(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(n)},\bar{\boldsymbol{\theta}})V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}]$$
$$+E[\frac{1}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(m)},\bar{\boldsymbol{\theta}})$$
$$(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(n)},\Delta_1\boldsymbol{\theta})V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}]$$
$$+E[\frac{1}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(m)},\bar{\boldsymbol{\theta}})$$
$$(\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(n)},\bar{\boldsymbol{\theta}})V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}]$$
$$=\frac{\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(m)},\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(n)})$$
$$V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}$$
$$+\frac{1}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(m)},$$
$$E[\Delta_1\boldsymbol{\theta}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(n)\top}]\bar{\boldsymbol{\theta}})V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}$$
$$+\frac{1}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\theta}},$$
$$E[\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(m)}\Delta_1\boldsymbol{\theta}^{\top}]\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(n)})V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}$$
$$+\frac{\sigma^2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3}\bar{W}^{(kl)}V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}} \tag{62}$$

ただし，式 (50), (59) の関係を用いた．上式中の $E[\Delta_1\boldsymbol{\theta}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(n)\top}]$ は次のようになる．

$$E[\Delta_1\boldsymbol{\theta}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(n)\top}]=-E[\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\Delta_1^0\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{\theta}}\Delta_1\boldsymbol{\xi}_{\alpha}^{(n)\top}]$$
$$=-\frac{\sigma^2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{p,q=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(pq)}\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(p)}\bar{\boldsymbol{\theta}}^{\top}V_0^{(qn)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}] \tag{63}$$

ゆえに式 (62) は次のようになる．

$$E[\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\Delta_2\boldsymbol{L}\bar{\boldsymbol{\theta}}]$$
$$=-\frac{\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l,m,n=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(m)},$$
$$\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(n)})V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}}$$
$$+\frac{\sigma^2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3}\bar{W}^{(kl)}V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}} \tag{64}$$

6.4 2 次の偏差

以上より最終的に式 (44) は次のようになる．

$$E[\Delta_2^{\perp}\boldsymbol{\theta}]=-\frac{\sigma^2}{N}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(kl)}(\boldsymbol{e}_{\alpha}^{(k)},\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(l)}$$
$$+\frac{\sigma^2}{N^2}\bar{\boldsymbol{M}}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3}\bar{W}_{\alpha}^{(km)}\bar{W}_{\alpha}^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(l)},\bar{\boldsymbol{M}}^{-}V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_{\alpha}]\bar{\boldsymbol{\theta}})\bar{\boldsymbol{\xi}}_{\alpha}^{(k)} \tag{65}$$

7. 超精度補正

式 (65) を用いて解 $\boldsymbol{\theta}$ を補正するには未知の σ^2 を推定し，真値による表現を観測値による表現に置き換える必要がある．これを次のように行う．

(1) 最尤推定解 $\boldsymbol{\theta}$ とそれに対する式 (26) の行列 $\boldsymbol{M}$ から σ^2 を次のように推定する．ただし n はベクトル $\boldsymbol{\theta}$ の次元である．

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{M}\boldsymbol{\theta})}{r-(n-1)/N} \tag{66}$$

(2) 次のように補正項を計算する．

$$\Delta_c\boldsymbol{\theta} = -\frac{\hat{\sigma}^2}{N}\boldsymbol{M}_{n-1}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3}W_\alpha^{(kl)}(\boldsymbol{e}_\alpha^{(k)}, \boldsymbol{\theta})\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)} + \frac{\hat{\sigma}^2}{N^2}\boldsymbol{M}_{n-1}^{-}\sum_{\alpha=1}^{N}\sum_{k,l=1}^{3}W_\alpha^{(km)}W_\alpha^{(ln)}(\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(l)}, \boldsymbol{M}_{n-1}^{-}V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{\xi}_\alpha^{(k)} \tag{67}$$

ただし $\boldsymbol{M}_{n-1}^{-}$ は $\boldsymbol{M}$ のランク $n-1$ の（スペクトル分解において最小固有値を 0 に置き換えた）一般逆行列である．

(3) 最尤推定解 $\boldsymbol{\theta}$ を $\boldsymbol{\theta} \leftarrow \mathcal{N}[\boldsymbol{\theta} - \Delta_c\boldsymbol{\theta}]$ と補正する．ただし，$\mathcal{N}[\cdot]$ は単位ベクトルへの正規化作用素である ($\mathcal{N}[\boldsymbol{a}] \equiv \boldsymbol{a}/\|\boldsymbol{a}\|$).

式 (66) は，式 (21) の最小値を $\hat{J}$ とすると，$N\hat{J}/\sigma^2$ が自由度 $Nr-(n-1)$ の χ^2 分布に従い [5]，χ^2 分布の期待値はその自由度に等しいことに基づく．真値を観測値で代用すると $O(\sigma)$ の誤差が生じるが，ノイズの奇数次の項の期待値は $\boldsymbol{0}$ であり，式 (67) には σ^2 が掛かってかかっているので，式 (67) の受ける影響は期待値としては $O(\sigma^4)$ である．

式 (67) 中の $\boldsymbol{e}^{(k)}$ は楕円当てはめでは式 (21) より $\boldsymbol{e} = (1,0,1,0,0,0)^\top$ であるが，基礎行列の計算では式 (18) より $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{0}$ であり，射影変換の計算では式 (20) より $\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{0}$, $k = 1, 2, 3$ である．基礎行列や射影変換の他，コンピュータビジョンで用いられる複数画像間の多重線形拘束では，画像間のノイズを独立と仮定する限り $\boldsymbol{e}^{(k)}$ はすべて $\boldsymbol{0}$ となる．文献 [6], [7] ではこの $\boldsymbol{e}_\alpha^{(k)}$ を含む項が省略されているが，実験によればその影響は小さく，第 1 項は補正結果に実質的な差を生じないことが確認される（詳細省略）．

8. まとめ

本論文ではノイズのあるデータから幾何学的拘束を利用してパラメータを最適に計算する幾何学的推定法としてよく知られた最尤推定の精度をさらに高める「超精度補正」を再吟味した．従来は拘束が単一のスカラ方程式の場合が調べられていたが，本論文では拘束がベクトル方程式で与えられる複数拘束の場合に拡張し，精密な誤差解析を行い，従来は無視されていた項の存在を明らかにした．ただし，その項の解の精度に与える影響は小さく，実際問題では無視することができる．

謝辞: 本研究の一部は日本学術振興会科学研究費（挑戦的萌芽研究 24650086) の助成によった．

参考文献

[1] 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.

[2] R. Hartley and A. Zisserman, *Multiple View Geometry in Computer Vision*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 2004.

[3] K. Kanatani, Renormalization for unbiased estimation, *Pro. 4th Int. Conf. Comput. Vis. (ICCV'93)*, May 1993, Berlin, Germany, pp. 599–606.

[4] 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.

[5] K. Kanatani, *Statistical Optimization for Geometric Computation: Theory and Practice* Elsevier, Amsterdam, the Netherlands, 1996; reprinted, Dover, York, NY, U.S.A., 2005.

[6] K. Kanatani, Ellipse fitting with hyperaccuracy, *IEICE Trans. Inf. & Syst.*, **E89-D**-10 (2006-10), 2653–2660.

[7] K. Kanatani, Statistical optimization for geometric fitting: Theoretical accuracy analysis and high order error analysis, *Int. J. Comput. Vis.*, **80**-2 (2008-11), 167–188.

[8] 金谷健一, 幾何学的推定のための最適化手法：最小化を越えて，情報処理学会研究報告, 2011-CVIM-181-23 (2012-3), 1–18.

[9] 金谷健一, アリ・アルシャラドカー, ニコライ・チェルノフ, 菅谷保之, 超精度くりこみ法, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-180-23 (2012-1), 1–8.

[10] 金谷健一, アリ・アルシャラドカー, ニコライ・チェルノフ, 菅谷保之, 超精度くりこみ法：複数拘束, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-181-21 (2012-3), 1–8.

[11] K. Kanatani and P. Rangarajan, Hyper least squares fitting of circles and ellipses, *Comput. Stat. Data Anal.*, **55**-6 (2011-6), 2197–2208.

[12] K. Kanatani, P. Rangarajan, Y. Sugaya and H. Niitsuma, HyperLS and its applications, *IPSJ Trans. Comput. Vis. Appl.*, **3** (2011-10), 80–94.

[13] K. Kanatani and H. Niitsuma, Optimal two-view planar triangulation, *IPSJ Trans. Compt. Vis. Appl.*, **3** (2011-9), 67–79.

[14] 金谷健一, 菅谷保之, 高ノイズレベルにおける基礎行列の最尤推定, 情報処理学会研究報告, 2007-CVIM-160-9 (2007-9), 49–56.

[15] K. Kanatani and Y. Sugaya, Unified computation of strict maximum likelihood for geometric fitting, *J. Math. Imaging Vis.*, **38**-1 (2010-9), 1–13.

[16] 中川裕介, 金谷健一, 菅谷保之, 高ノイズレベルにおける最尤楕円当てはめ, 情報処理学会研究報告, 2008-CVIM-162-10 (2008-3), 53–60.

[17] 新妻 弘崇，金谷 健一，最適な射影変換の新しい計算アルゴリズム, 情報処理学会研究報告, 2009-CVIM-169-37 (2009-11), 1–8.

[18] T. Okatani and K. Deguchi, Toward a statistically optimal method for estimating geometric relations from noisy data: Cases of linear relations, *Proc. IEEE Conf. Computer Vision and Pattern Recognition*, June 2003, Madison, WI, U.S.A., Vol. 1, pp. 432–439.

[19] T. Okatani and K. Deguchi, On bias correction for geo-

metric parameter estimation in computer vision, *Proc. IEEE Conf. Computer Vision Pattern Recognition*, June 2009, Miami Beach, FL, U.S.A., pp. 959-966.

[20] T. Okatani and K. Deguchi, Improving accuracy of geometric parameter estimation using projected score method, *Proc. Int. Conf. Computer Vision*, September/October 2009, Kiyoto, Japan, pp. 1733-1740.

[21] P. Rangarajan and K. Kanatani, Improved algebraic methods for circle fitting, *Elec. J. Stat.*, **3** (2009-9), 1075–1082.

[22] 菅谷保之, 金谷健一, 基礎行列と射影変換の計算精度の比較最小二乗法から超精度くりこみ法まで, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-181-22 (2012-3), 1–8.

[23] 矢野直樹, 金谷健一, 平面シーンの最適三角測量, 情報処理学会研究報告, 2010-CVIM-171-4 (2010-3), 1–8.

[24] 横田健太, 村田和洋, 菅谷保之, 金谷健一, 楕円当てはめの精度比較：最小二乗法から超精度くりこみ法まで, 情報処理学会研究報告, 2012-CVIM-180-26 (2012-1), 1–8.

付 録

$W_\alpha^{(kl)}$ を (kl) 要素とする行列を $\boldsymbol{W}_\alpha$, $(\bar{\boldsymbol{\theta}}, V_0^{(kl)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}})$ を (kl) 要素とする行列を $\boldsymbol{V}_\alpha$ と置く．定義より $\boldsymbol{W}_\alpha = (\boldsymbol{V}_\alpha)_r^-$ であるから恒等式 $\boldsymbol{V}_\alpha\boldsymbol{W}_\alpha\boldsymbol{V}_\alpha = \boldsymbol{V}_\alpha$ が成り立つ．これを次のように展開する．

$$
\begin{aligned}
&(\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha + \Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha + \Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha + \cdots)(\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha + \Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha + \Delta_2\boldsymbol{W}_\alpha \\
&\quad + \cdots)(\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha + \Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha + \Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha + \cdots) \\
&= (\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha + \Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha + \Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha + \cdots)
\end{aligned} \tag{A.1}
$$

両辺の 1 次の誤差項を等値すると次式を得る．

$$
\begin{aligned}
&\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha + \bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha + \bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha \\
&= \Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha
\end{aligned} \tag{A.2}
$$

両辺に左右から $\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha$ を掛けると次のようになる．

$$
\begin{aligned}
&\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha + \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&+ \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha = \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha
\end{aligned} \tag{A.3}
$$

積 $\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha = \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha$ は $\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha$ と $\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha$ の共通の定義域への直交射影行列であり，誤差 $\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha$, $\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha$ はその定義域内で生じること，および $\boldsymbol{W}_\alpha = (\boldsymbol{V}_\alpha)_r^-$ より恒等式 $\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha = \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha$, $\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha = \bar{\boldsymbol{V}}_\alpha$ が成り立つことに注意すると，式 (A.3) から次式を得る．

$$
\begin{aligned}
&\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha + \Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha + \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&= \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha
\end{aligned} \tag{A.4}
$$

これから $\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha$ が次のように表せる．

$$
\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha = -\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \tag{A.5}
$$

この (kl) 要素は次のようになる．

$$
\begin{aligned}
\Delta_1 W_\alpha^{(kl)} &= -\sum_{m,n=1}^{L} \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{ln}\Delta_1 V_\alpha^{(mn)} \\
&= -2\sum_{m,n=1}^{L} \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}(\Delta_1\boldsymbol{\theta}, V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}}).
\end{aligned} \tag{A.6}
$$

ゆえに式 (35) が得られる．式 (A.1) の両辺の 2 次の誤差項を等値すると次式を得る．

$$
\begin{aligned}
&\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha + \bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha + \bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha \\
&+ \bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha + \Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha \\
&+ \Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha = \Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha
\end{aligned} \tag{A.7}
$$

両辺に左右から $\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha$ を掛けると次のようになる．

$$
\begin{aligned}
&\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha + \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&+ \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha + \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&+ \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&+ \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha = \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha
\end{aligned} \tag{A.8}
$$

これは次のように書き直せる．

$$
\begin{aligned}
&\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha + \Delta_2\boldsymbol{W}_\alpha + \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&+ \Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha(\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha)\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&+ \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha(\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha)\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&+ \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{V}_\alpha(\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha)\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha = \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha
\end{aligned} \tag{A.9}
$$

これに式 (A.5) を代入すると次のようになる．

$$
\begin{aligned}
&\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha + \Delta_2\boldsymbol{W}_\alpha + \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \\
&- \Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha + \Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha \\
&- \Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha = \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha
\end{aligned} \tag{A.10}
$$

ゆえに $\Delta_2\boldsymbol{W}_\alpha$ が次のように書ける．

$$
\Delta_2\boldsymbol{W}_\alpha = \Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha\bar{\boldsymbol{V}}_\alpha\Delta_1\boldsymbol{W}_\alpha - \bar{\boldsymbol{W}}_\alpha\Delta_2\boldsymbol{V}_\alpha\bar{\boldsymbol{W}}_\alpha \tag{A.11}
$$

この (kl) 要素は次のようになる．

$$
\begin{aligned}
\Delta_2 W_\alpha^{(kl)} &= \sum_{m,n=1}^{L} \Delta_1 W_\alpha^{(km)}\bar{V}_\alpha^{(mn)}\Delta_1 W_\alpha^{(nl)} \\
&\quad - \sum_{m,n=1}^{L} \bar{W}_\alpha^{(km)}\Delta_2 V_\alpha^{(mn)}\bar{W}_\alpha^{(nl)} \\
&= \sum_{m,n=1}^{L} \Delta_1 W_\alpha^{(km)}\Delta_1 W_\alpha^{(ln)}(\bar{\boldsymbol{\theta}}, V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}}) \\
&\quad - \sum_{m,n=1}^{L} \bar{W}_\alpha^{(km)}\bar{W}_\alpha^{(ln)}\Big((\Delta_1\boldsymbol{\theta}, V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\Delta_1\boldsymbol{\theta}) \\
&\quad + 2(\Delta_2\boldsymbol{\theta}, V_0^{(mn)}[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{\theta}})\Big)
\end{aligned} \tag{A.12}
$$

ゆえに式 (36) が得られる．