幾何学的当てはめの高次誤差解析

金谷 健一
岡山大学大学院自然科学研究科

誤差のあるデータに拘束条件を当てはめる「幾何学的当てはめ」の代表的な解法を取り上げ，解の精度を 2 次の誤差項まで厳密に評価する．そして，手法間の精度の差が，従来信じられていたような 1 次の誤差項の差にあるのではなく，2 次の誤差項にあることを**初めて**明らかにする．さらに，これによって，最尤推定を改良する「超精度補正」の基礎を与える．そして，これを楕円当てはめの数値シミュレーションによって検証する．

High Order Error Analysis for Geometric Fitting

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

A rigorous accuracy analysis is conducted up to second order error terms for various "geometric fitting" techniques for fitting a constraint to noisy data. It is shown *for the first time* that the accuracy difference is attributed not to the first order error terms, as has widely been believed, but to the second order terms. This analysis also establishes a foundation of the "hyperaccuracy correction" of maximum likelihood estimation. Our results are confirmed by numerical simulation of ellipse fitting.

1. まえがき

幾何学的当てはめとは誤差のある m 次元ベクトルデータ $\boldsymbol{x}_\alpha$, $\alpha = 1, ..., N$ に拘束条件

$$F(\boldsymbol{x};\boldsymbol{u}) = 0 \tag{1}$$

を当てはめる問題である [6]．ここに $\boldsymbol{u}$ は未知の p 次元パラメータベクトル（$p > m$）である．本論文では変数変換 $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{x})$ によって式 (1) が次のように線形に表せる場合を考える．

$$(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{u}) = 0 \tag{2}$$

ただし，ベクトル $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ の内積を $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ と書く．写像 $\boldsymbol{\xi}(\cdot)$ は $\mathcal{R}^m$ から $\mathcal{R}^p$ への（一般に非線形の）埋め込みである．この形では未知ベクトル $\boldsymbol{u}$ に定数倍の不定性があるので，$\|\boldsymbol{u}\| = 1$ と正規化する．コンピュータビジョンによく現れる問題にはこのように線形化できるものが多い．

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

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

を当てはめる問題を考える．$\boldsymbol{\xi}$, $\boldsymbol{u}$ を

$$\boldsymbol{\xi} = (x^2 \;\; 2xy \;\; y^2 \;\; 2x \;\; 2y \;\; 1)^\top, \tag{4}$$
$$\boldsymbol{u} = (A \;\; B \;\; C \;\; D \;\; E \;\; F)^\top \tag{5}$$

と定義すると式 (3) は式 (2) の形になる．各点 (x_α, y_α) の x 座標，y 座標に独立な期待値 0，標準偏差 σ の正規分布に従う誤差が加わるとすると，変換した $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ の共分散行列は $O(\sigma^4)$ の項を除いて次のように書ける．

$$V[\boldsymbol{\xi}_\alpha] = 4\sigma^2 \begin{pmatrix} \bar{x}_\alpha^2 & \bar{x}_\alpha\bar{y}_\alpha & 0 & \bar{x}_\alpha & 0 & 0 \\ \bar{x}_\alpha\bar{y}_\alpha & \bar{x}_\alpha^2 + \bar{y}_\alpha^2 & \bar{x}_\alpha\bar{y}_\alpha & \bar{y}_\alpha & \bar{x}_\alpha & 0 \\ 0 & \bar{x}_\alpha\bar{y}_\alpha & \bar{y}_\alpha^2 & 0 & \bar{y}_\alpha & 0 \\ \bar{x}_\alpha & \bar{y}_\alpha & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{x}_\alpha & \bar{y}_\alpha & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

ただし，$(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha)$ は (x_α, y_α) の真の位置である．□

【例 2】 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**エピ極線方程式**

$$(\begin{pmatrix} x \\ y \\ 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{F}\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ 1 \end{pmatrix}) = 0. \tag{7}$$

を満たす [3]．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およびそれぞれの内部パラメータのみに依存する (シーンや各点の位置にはよない) ランク 2 の行列であり，**基礎行列**と呼ばれている．このとき，

$$\boldsymbol{\xi} = (xx' \;\; xy' \;\; x \;\; yx' \;\; yy' \;\; y \;\; x' \;\; y' \;\; 1)^\top,$$
$$\boldsymbol{u} = (F_{11} \;\; F_{12} \;\; F_{13} \;\; F_{21} \;\; F_{22} \;\; F_{23} \;\; F_{31} \;\; F_{32} \;\; F_{33})^\top \tag{8}$$

と定義すると式 (7) は式 (2) の形になる．各画像の各点の x 座標，y 座標に独立に期待値 0，標準偏差 σ の正規分布に従う誤差が加わるとすると，変換した $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ の共分散行列は $O(\sigma^4)$ の項を除いて次のように書ける．

$$V[\boldsymbol{\xi}_\alpha] = \sigma^2 \times$$

*700-8530 岡山市津島中 3–1–1, (086)251-8173
kanatani@suri.it.okayama-u.ac.jp

$$
\begin{pmatrix}
\bar{x}_\alpha^2+\bar{x}_\alpha'^2 & \bar{x}_\alpha'\bar{y}_\alpha' & \bar{x}_\alpha' & \bar{x}_\alpha\bar{y}_\alpha & 0 & 0 & \bar{x}_\alpha & 0 & 0\\
\bar{x}_\alpha'\bar{y}_\alpha' & \bar{x}_\alpha^2+\bar{y}_\alpha'^2 & \bar{y}_\alpha' & 0 & \bar{x}_\alpha\bar{y}_\alpha & 0 & 0 & \bar{x}_\alpha & 0\\
\bar{x}_\alpha' & \bar{y}_\alpha' & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
\bar{x}_\alpha\bar{y}_\alpha & 0 & 0 & \bar{y}_\alpha^2+\bar{x}_\alpha'^2 & \bar{x}_\alpha'\bar{y}_\alpha' & \bar{x}_\alpha' & \bar{y}_\alpha & 0 & 0\\
0 & \bar{x}_\alpha\bar{y}_\alpha & 0 & \bar{x}_\alpha'\bar{y}_\alpha' & \bar{y}_\alpha^2+\bar{y}_\alpha'^2 & \bar{y}_\alpha' & 0 & \bar{y}_\alpha & 0\\
0 & 0 & 0 & \bar{x}_\alpha' & \bar{y}_\alpha' & 1 & 0 & 0 & 0\\
\bar{x}_\alpha & 0 & 0 & \bar{y}_\alpha & 0 & 0 & 1 & 0 & 0\\
0 & \bar{x}_\alpha & 0 & 0 & \bar{y}_\alpha & 0 & 0 & 1 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
\tag{9}
$$

ただし，$(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha)$, $(\bar{x}'_\alpha, \bar{y}'_\alpha)$ はそれぞれ (x_α, y_α), (x'_α, y'_α) の真の位置である． □

式 (6), (9) からもわかるように，ほとんどの問題では共分散行列 $V[\boldsymbol{\xi}_\alpha]$ が

$$
V[\boldsymbol{\xi}_\alpha] = \varepsilon^2 V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha] \tag{10}
$$

のように誤差の大きさを示す定数 ε^2 とデータの真の位置のみに依存する行列 $V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]$ との積の形に表せる．以下ではこれを仮定し，ε を**ノイズレベル**，$V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]$ を**正規化共分散行列**と呼ぶ．実際の計算では，データの真の位置はデータの観測値で近似する．

以下，このような問題に対する代表的な解法を取り上げ，解の精度を 2 次の誤差項まで厳密に評価する．そして，手法間の精度の差が，従来信じられていたような 1 次の誤差項の差にあるのではなく，**2 次の誤差項にある**ことを初めて明らかにする．また，これによって最尤推定を改良する「超精度補正」の基礎を与える．そして，これを楕円当てはめの数値シミュレーションによって検証する．

2. KCR 下界

データに誤差がある限り，どのような推定を行っても，未知パラメータの推定値 $\hat{\boldsymbol{u}}$ の共分散行列 $V[\hat{\boldsymbol{u}}]$ には，下回ることのできない下界が存在する．ただし，推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ の共分散行列 $V[\hat{\boldsymbol{u}}]$ を次のように定義する．

$$
V[\hat{\boldsymbol{u}}] = E[(\boldsymbol{P}_{\mathbf{u}}\hat{\boldsymbol{u}})(\boldsymbol{P}_{\mathbf{u}}\hat{\boldsymbol{u}})^\top] \tag{11}
$$

$E[\cdot]$ は誤差分布に関する期待値であり，$\boldsymbol{P}_{\mathbf{u}}$ は次のように定義する射影行列である（$\boldsymbol{I}$ は単位ベクトル）．

$$
\boldsymbol{P}_{\mathbf{u}} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^\top \tag{12}
$$

これを作用させるのは，$\boldsymbol{u}$ が単位ベクトルに正規化されているため，その定義域が単位球面であり，これを真値 $\boldsymbol{u}$ における接平面に射影して，その接平面上で誤差を評価するという意味である（図 1）．

このとき，誤差 $\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha$ の分布を期待値 $\mathbf{0}$，共分散行列 $V[\boldsymbol{\xi}]$ の独立な正規分布とみなせば，$\hat{\boldsymbol{u}}$ の任意の不偏推定量に対して次の不等式が成り立つ [5, 6, 7]．

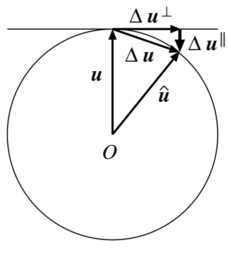

図 1: 推定値 $\hat{\boldsymbol{u}}$ の垂直誤差成分 $\Delta\boldsymbol{u}^\perp$ と平行誤差成分 $\Delta\boldsymbol{u}^\parallel$．推定の精度は垂直成分 $\Delta\boldsymbol{u}^\perp$ によって評価される．

$$
V[\hat{\boldsymbol{u}}] \succ \varepsilon^2 \Big(\sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^\top}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})} \Big)^- \tag{13}
$$

ただし，$\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha$ は $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ の真の値である．関係 $\succ$ 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し，$(\cdot)^-$ は Moore-Penrose の一般逆行列を表す．

後に，Chernov ら [1] は式 (13) の右辺を **KCR** (**Kanatani-Cramer-Rao**) **下界**と呼び，$\hat{\boldsymbol{u}}$ が不偏推定量でなくても，$\sigma \to 0$ で $\hat{\boldsymbol{u}} \to \boldsymbol{u}$ であれば $O(\sigma^4)$ を除いて式 (13) が成立することを示した．

ノルムの正規化 $\|\boldsymbol{u}\| = 1$ 以外の拘束条件があれば（例えば基礎行列 $\boldsymbol{F}$ の $\det \boldsymbol{F} = 0$），式 (13) の右辺にそれに相当する射影演算子を含む [6]．

3. 最小二乗法

素朴な方法はデータ $\boldsymbol{\xi}_\alpha$ を式 (2) に代入して，左辺の二乗和

$$
J = \sum_{\alpha=1}^{N} (\boldsymbol{\xi}_\alpha, \boldsymbol{u})^2 = \sum_{\alpha=1}^{N} (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\xi}_\alpha\boldsymbol{\xi}_\alpha^\top\boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u}) \tag{14}
$$

を最小にする $\boldsymbol{u}$ を求める**最小二乗法**である．ただし，行列 $\boldsymbol{M}_0$ を次のように定義した．

$$
\boldsymbol{M}_0 = \sum_{\alpha=1}^{N} \boldsymbol{\xi}_\alpha \boldsymbol{\xi}_\alpha^\top \tag{15}
$$

これは (一般に半正値) 対称行列である．よく知られているように，2 次形式 $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u})$ を最小にする単位ベクトル $\boldsymbol{u}$ は $\boldsymbol{M}_0$ の最小固有値 λ に対する単位固有ベクトル $\hat{\boldsymbol{u}}$ である．そこで

$$
\boldsymbol{M}_0\hat{\boldsymbol{u}} = \lambda\hat{\boldsymbol{u}} \tag{16}
$$

と置き，これに $\boldsymbol{\xi}_\alpha = \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha + \Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha$, $\hat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots$ を代入する．ただし，記号 Δ_1, Δ_2 はそれぞれ $\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha$ に関する 1 次および 2 次の項を表す．$\boldsymbol{M}_0$, λ についても同様に展開すると

$$
\begin{aligned}
&(\bar{\boldsymbol{M}}_0 + \Delta_1\boldsymbol{M}_0 + \Delta_2\boldsymbol{M}_0)(\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots)\\
&= (\Delta_1\lambda + \Delta_2\lambda + \cdots)(\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots)
\end{aligned} \tag{17}
$$

となる．ただし，$\bar{\boldsymbol{M}}_0$ は式 (16) の行列 $\boldsymbol{M}_0$ を真のデータ値 $\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha$ に対して計算したものであり，$\Delta_1\boldsymbol{M}_0$, $\Delta_2\boldsymbol{M}_0$ を次のように置いた．

$$\Delta_1\boldsymbol{M}_0 = \sum_{\alpha=1}^{N}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha^\top + \Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^\top), \tag{18}$$

$$\Delta_2\boldsymbol{M}_0 = \sum_{\alpha=1}^{N}\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha^\top \tag{19}$$

誤差がないときは $\lambda = 0$ であるから，λ の 0 次の項は存在しない．式 (17) を展開して誤差の 1 次，2 次の項をそれぞれ等置すると次式を得る．

$$\bar{\boldsymbol{M}}_0\Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} = \Delta_1\lambda\boldsymbol{u}, \tag{20}$$

$$\bar{\boldsymbol{M}}_0\Delta_2\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{M}_0\Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} = \Delta_2\lambda\boldsymbol{u} \tag{21}$$

式 (20) の両辺と $\boldsymbol{u}$ の内積をとると，$(\boldsymbol{u}, \bar{\boldsymbol{M}}_0\boldsymbol{u})$ と $(\boldsymbol{u}, \Delta\bar{\boldsymbol{M}}_0\boldsymbol{u})$ が恒等的に 0 であることから $\Delta_1\lambda = 0$ であることがわかる．式 (20) の両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}_0^-$ を掛けると，$\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{M}}_0 = \boldsymbol{P}_{\mathbf{u}}$ であり，$\|\boldsymbol{u}\| = 1$ より $\Delta_1\boldsymbol{u}$ が $\boldsymbol{u}$ に直交することから $\Delta_1\boldsymbol{u}$ が次のように得られる．

$$\Delta_1\boldsymbol{u} = -\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\Delta_1\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} \tag{22}$$

明らかに $E[\Delta_1\boldsymbol{u}] = \boldsymbol{0}$ である．2 次の誤差 $\Delta_2\boldsymbol{u}$ は，式 (21) に式 (22) を代入し，両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}_0^-$ に掛けて $\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_2\boldsymbol{u}$ $(\equiv \boldsymbol{P}_{\mathbf{u}}\Delta_2\boldsymbol{u})$ について解くと次のようになる．

$$\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp = \bar{\boldsymbol{M}}_0^-\Delta_1\boldsymbol{M}_0\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\Delta_1\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} - \bar{\boldsymbol{M}}_0^-\Delta_2\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} \tag{23}$$

ただし，$\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ $(\equiv \boldsymbol{P}_{\mathbf{u}}\Delta_2\boldsymbol{u})$ は $\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ の $\boldsymbol{u}$ に垂直な成分である．$\boldsymbol{u}$ に平行な成分 $\Delta_2\boldsymbol{u}^\parallel$ も存在するが，これは正規化 $\|\hat{\boldsymbol{u}}\| = 1$ から生じるものであり，誤差の大きさは $\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ のみで評価できる（図 1）．

2 次の誤差 $\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ の期待値はやや複雑な計算の後，次のようになる [8]．

$$\begin{aligned}E[\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp] = {}& \varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha \\ &+\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\sum_{\alpha=1}^{N}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u} \\ &-\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\boldsymbol{N}_0\boldsymbol{u}.\end{aligned} \tag{24}$$

ただし，行列 $\boldsymbol{N}_0$ を次のように置いた．

$$\boldsymbol{N}_0 = \sum_{\alpha=1}^{N}V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha] \tag{25}$$

4. Taubin 法

Taubin 法 [15] は式 (14) の代わりに次式を最小化するものである[1]．

$$J = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{\xi}_\alpha, \boldsymbol{u})^2}{\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})} = \frac{(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u})}{(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{N}_0\boldsymbol{u})}. \tag{26}$$

これはレイリー商であるから，これを最小にする $\boldsymbol{u}$ は一般固有値問題

$$\boldsymbol{M}_0\hat{\boldsymbol{u}} = \lambda\boldsymbol{N}_0\hat{\boldsymbol{u}} \tag{27}$$

の最小一般固有値に対する一般ベクトルである．多くの問題では行列 $\boldsymbol{N}_0$ が特異になるので直接的には解くことができないが，より低次元の問題に分解して解くことができる [14, 16]．

最小二乗法の場合と同様に，式 (27) を次のように展開する．

$$\begin{aligned}&(\bar{\boldsymbol{M}}_0 + \Delta_1\boldsymbol{M}_0 + \Delta_2\boldsymbol{M}_0)(\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots) \\ &= (\Delta_1\lambda + \Delta_2\lambda + \cdots)\boldsymbol{N}_0(\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots)\end{aligned} \tag{28}$$

両辺を展開して等しい次数の項を等値すると次式を得る．

$$\bar{\boldsymbol{M}}_0\Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} = \Delta_1\lambda\boldsymbol{N}_0\boldsymbol{u}, \tag{29}$$

$$\bar{\boldsymbol{M}}_0\Delta_2\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{M}_0\Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} = \Delta_2\lambda\boldsymbol{N}_0\boldsymbol{u} \tag{30}$$

式 (29) の両辺と $\boldsymbol{u}$ との内積をとると，最小二乗法と同様に $\Delta_1\lambda = 0$ であることがわかる．したがって，1 次の誤差 $\Delta_1\boldsymbol{u}$ は最小二乗法と同じ式 (29) である．

しかし，Taubin 法は最小二乗法に比べて非常に精度が高いことが知られている [14, 16]．その理由は 2 次の誤差項にある．式 (30) に式 (29) を代入し，両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}_0^-$ を掛けて $\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ $(\equiv \bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{M}}_0\Delta_2\boldsymbol{u})$ に関して解くと次のようになる．

$$\begin{aligned}\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp = {}& \bar{\boldsymbol{M}}_0^-\Delta_1\boldsymbol{M}_0\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\Delta_1\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} - \bar{\boldsymbol{M}}_0^-\Delta_2\boldsymbol{M}_0\boldsymbol{u} \\ &-\Delta_2\lambda\bar{\boldsymbol{M}}_0\boldsymbol{N}\boldsymbol{u}.\end{aligned} \tag{31}$$

最小二乗法の式 (23) と比較すると，異なるのは最後に付け加わった項 $-\Delta_2\lambda\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\boldsymbol{N}\boldsymbol{u}$ である．$\Delta_2\lambda$ の期待値を計算すると ε^2 となるので [8]，$\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ の期待値は次のようになる．

$$\begin{aligned}E[\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp] = {}& \varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha \\ &+\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\sum_{\alpha=1}^{N}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}\end{aligned} \tag{32}$$

[1]Taubin [15] は曲線当てはめを幾何学的な観点から解析したもので，期待値，共分散行列などは考慮していない．ここに示すのは統計的な観点からの再解釈である．

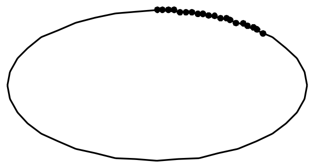

図 2: 楕円上の 20 点.

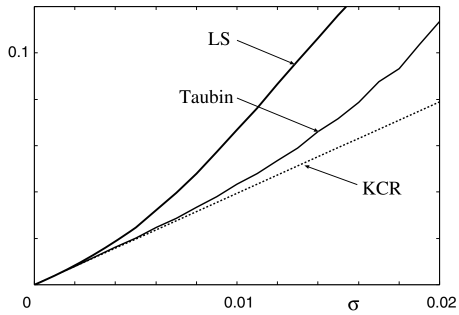

図 3: 図 2 の点列への楕円当てはめの平均平方二乗誤差. 横軸は加えた誤差の標準偏差. 太実線：最小二乗法. 細実線：Taubin 法. 点線：KCR 下界.

すなわち，最小二乗法の式 (16) の右辺を式 (27) とすることによって最小二乗法の式 (24) の最後の項が消去されている．これが Taubin 法が最小二乗法に比べて著しく高精度である理由である．

【例 3】 図 2 に楕円上にとった 20 点 $(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha)$ を示す．各点の x, y 座標に独立に期待値 0，標準偏差 σ の正規分布に従う誤差を加え，それに最小二乗法と Taubin で楕円を当てはめた．

図 3 は横軸に σ をとり，各 σ に対して 10,000 回の独立な試行に渡る垂直誤差 $\Delta\boldsymbol{u}^\perp$（図 1 参照）に平方二乗平均をプロットしたものである．太い実線が最小二乗法，細い実線が Taubin 法の結果である．点線は KCR 下界から導かれる平方二乗平均（式 (13) の右辺のトレースの平方根）である．

これから分かるように，Taubin 法は最小二乗法に比べて非常に精度が高く，KCR 下界にかなり近い．この違いは Taubin 法では最小二乗法の式 (24) の最後の項が消去されたためである． □

5. 最適最小二乗法

最小二乗法の素朴な拡張は式 (14) の各項に適切な重み W_α を入れ，次の形にすることである．

$$J = \sum_{\alpha=1}^{N} W_\alpha (\boldsymbol{\xi}_\alpha, \boldsymbol{u})^2 \tag{33}$$

これに伴い，式 (15) の行列 $\boldsymbol{M}_0$ を

$$\boldsymbol{M} = \sum_{\alpha=1}^{N} W_\alpha \boldsymbol{\xi}_\alpha \boldsymbol{\xi}_\alpha^\top \tag{34}$$

に変えれば，式 (33) を最小にする単位ベクトル $\boldsymbol{u}$ は行列 $\boldsymbol{M}$ の最小固有ベクトルに対する単位ベクトルで与えられる．

重み W_α は最適に，すなわち得られる解の共分散行列がなるべく KCR 下界に近づくように定める．そのためには次のように選べばよい [8].

$$W_\alpha = \frac{1}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})} \tag{35}$$

しかし，この重みは真のパラメータ値 $\boldsymbol{u}$ を含んでいるので計算できない．そこで反復を用いる．すなわち，まず $\boldsymbol{u}$ の適当な初期値を与えて W_α を計算し，これによる式 (34) の行列 $\boldsymbol{M}$ の最小固有値に対する単位固有ベクトル $\boldsymbol{u}$ を計算する．その値を用いて式 (35) の重み W_α を更新し，以下これを収束するまで反復する．

収束時に得られる推定値 $\hat{\boldsymbol{u}}$ は次式を満たす．

$$\hat{\boldsymbol{M}}\hat{\boldsymbol{u}} = \lambda \hat{\boldsymbol{u}} \tag{36}$$

ただし，次のように置いた．

$$\hat{\boldsymbol{M}} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\boldsymbol{\xi}_\alpha \boldsymbol{\xi}_\alpha^\top}{(\hat{\boldsymbol{u}}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\hat{\boldsymbol{u}})} \tag{37}$$

式 (36) に $\boldsymbol{\xi}_\alpha = \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha + \Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha$, $\hat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots$, $\lambda = \Delta_1\lambda + \Delta_2\lambda + \cdots$ を代入すると次のようになる．

$$\begin{aligned} &(\bar{\boldsymbol{M}} + \Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M} + \Delta_2\boldsymbol{M} + \Delta_2^*\boldsymbol{M}) \\ &(\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots) \\ &= (\Delta_1\lambda + \Delta_2\lambda + \cdots)(\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots) \end{aligned} \tag{38}$$

ただし $\bar{\boldsymbol{M}}$ は式 (34) の行列 $\boldsymbol{M}$ を真のデータ値 $\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha$ に対して計算したものであり，$\Delta\boldsymbol{M}$, $\Delta_1\boldsymbol{M}$, $\Delta_2\boldsymbol{M}$, $\Delta_1^*\boldsymbol{M}$, $\Delta_2^*\boldsymbol{M}$ を次のように定義した．

$$\Delta_1\boldsymbol{M} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^\top + \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha \Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha^\top}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})}, \tag{39}$$

$$\Delta_2\boldsymbol{M} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha \Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha^\top}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})}, \tag{40}$$

$$\Delta_1^*\boldsymbol{M} = -2\sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^\top}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}(\Delta_1\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}), \tag{41}$$

$$\begin{aligned} \Delta_2^*\boldsymbol{M} = &-2\sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^\top + \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha \Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha^\top}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}(\Delta_1\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}) \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha^\top}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})}\Big(-\frac{2(\Delta_2\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})} \\ &+ \frac{4(\Delta_1\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2} - \frac{(\Delta_1\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\Delta_1\boldsymbol{u})}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})}\Big) \end{aligned} \tag{42}$$

この $\Delta_1^*\boldsymbol{M}$, $\Delta_2^*\boldsymbol{M}$ はそれぞれ式 (37) の分母に $\hat{\boldsymbol{u}}$ を用いることから生じる $\boldsymbol{M}$ の 1 次，および 2 次の摂動項である．

式 (38) の両辺を展開して同じ次数の項を等値すると次式を得る．

$$\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_1\boldsymbol{u} + (\Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M})\boldsymbol{u} = \Delta_1\lambda\boldsymbol{u}, \tag{43}$$

$$\begin{aligned}&\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_2\boldsymbol{u} + (\Delta_1\boldsymbol{M}+\Delta_1^*\boldsymbol{M})\Delta_1\boldsymbol{u}+(\Delta_2\boldsymbol{M}+\Delta_2^*\boldsymbol{M})\boldsymbol{u}\\ &= \Delta_1\lambda\Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\lambda\boldsymbol{u}\end{aligned} \tag{44}$$

式 (43) の両辺と $\boldsymbol{u}$ の内積をとると，$(\boldsymbol{u}, \bar{\boldsymbol{M}}\boldsymbol{u})$, $(\boldsymbol{u}, \Delta_1\boldsymbol{M}\boldsymbol{u})$, $(\boldsymbol{u}, \Delta_1^*\boldsymbol{M}\boldsymbol{u})$ がすべて恒等的に 0 となるから，$\Delta_1\lambda = 0$ である．このことから，式 (43) の両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}^-$ を掛けて $\Delta_1\boldsymbol{u}$ について解くと，次のようになる．

$$\Delta_1\boldsymbol{u} = -\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\boldsymbol{u} \tag{45}$$

式 (44) にこれを代入し，両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}^-$ を掛けて $\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ ($\equiv \bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_2\boldsymbol{u}$) について解くと次のようになる．

$$\begin{aligned}\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp = &\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\boldsymbol{u}\\ &+\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\boldsymbol{u}\\ &-\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{M}\boldsymbol{u} - \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2^*\boldsymbol{M}\boldsymbol{u}\end{aligned} \tag{46}$$

この期待値はやや複雑な計算の結果，次のようになる [8]．

$$\begin{aligned}E[\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp] = &\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}\\ &+\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2} - \varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{N}}\boldsymbol{u}\end{aligned} \tag{47}$$

ただし，次のように置いた．

$$\bar{\boldsymbol{N}} = \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})} \tag{48}$$

6. くりこみ法

最適最小二乗法の式 (24) は最小二乗法の式 (22) において $\boldsymbol{M}_0$, $\boldsymbol{N}_0$ がそれぞれ $\boldsymbol{M}$, $\boldsymbol{N}$ に置き換わったものである．Taubin 法は固有値問題を一般固有値問題に置き換えて式 (22) の最後の項 $-\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0\bar{\boldsymbol{N}}_0\boldsymbol{u}$ を除去するものである．それなら同様に最適最小二乗法の固有値問題を一般固有値問題に置き換えて式 (24) の最後の項 $-\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}\bar{\boldsymbol{N}}\boldsymbol{u}$ を除去できないであろうか．

表 1: Taubin 法とくりこみ法の関係．

重み	固有値問題		一般固有値問題
なし	最小二乗法	→	Taubin 法
反復更新	最適最小二乗法	→	くりこみ法

ただし，重みが未知のため，反復が必要となる．これを行うのが**くりこみ法** [4, 6] である（表 1）．

行列 $\hat{\boldsymbol{N}}$ を次のように定義する．

$$\hat{\boldsymbol{N}} = \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]}{(\hat{\boldsymbol{u}}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\hat{\boldsymbol{u}})} \tag{49}$$

くりこみ法の具体的な手順は次のようになる．

1. 初期値 $\hat{\boldsymbol{u}}$ を与え，$c = 0$ と置く．
2. 固有値問題
$$(\hat{\boldsymbol{M}} - c\hat{\boldsymbol{N}})\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u} \tag{50}$$
を解き，0 に最も近い固有値 λ に対する単位固有ベクトル $\boldsymbol{u}$ を計算する．
3. $\lambda \approx 0$ であれば $\boldsymbol{u}$ を $\hat{\boldsymbol{u}}$ として返して終了する．そうでなければ
$$c \leftarrow c + \frac{\lambda}{(\boldsymbol{u}, \hat{\boldsymbol{N}}\boldsymbol{u})}, \quad \hat{\boldsymbol{u}} \leftarrow \boldsymbol{u} \tag{51}$$
と更新してステップ 2 に戻る．

この解 $\hat{\boldsymbol{u}}$ の精度を評価する．反復が終了した時点では次式が成り立っている．

$$(\hat{\boldsymbol{M}} - c\hat{\boldsymbol{N}})\hat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{0} \tag{52}$$

前節までと同様に次のように摂動展開する．

$$\begin{aligned}&\Big(\bar{\boldsymbol{M}} + (\Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M}) + (\Delta_2\boldsymbol{M} + \Delta_2^*\boldsymbol{M}) + \cdots\\ &-(\Delta_1 c + \Delta_2 c + \cdots)(\bar{\boldsymbol{N}} + \Delta_1^*\boldsymbol{N} + \cdots)\Big)(\boldsymbol{u} + \Delta_1\boldsymbol{u}\\ &+\Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots) = \boldsymbol{0}\end{aligned} \tag{53}$$

ただし，次のように置いた．

$$\Delta_1^*\boldsymbol{N} = -2\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\Delta_1\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})} \tag{54}$$

式 (53) の両辺を展開して同じ次数の項を等値すると次式を得る．

$$\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_1\boldsymbol{u} + (\Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M} - \Delta_1 c\bar{\boldsymbol{N}})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}, \tag{55}$$

$$\begin{aligned}&\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_2\boldsymbol{u} + (\Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M} - \Delta_1 c\bar{\boldsymbol{N}})\Delta_1\boldsymbol{u}\\ &+(\Delta_2\boldsymbol{M}+\Delta_2^*\boldsymbol{M}-\Delta_1 c\Delta_1^*\boldsymbol{N}-\Delta_2 c\bar{\boldsymbol{N}})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}\end{aligned} \tag{56}$$

式 (55) の両辺と $\boldsymbol{u}$ の内積をとると，前節と同様に $\Delta_1 c = 0$ であることがわかる．このことから，式

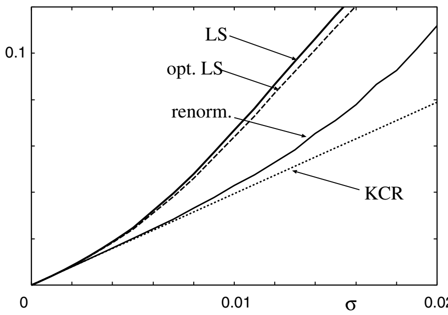

図 4: 図 2 の点列への楕円当てはめの平均平方二乗誤差. 横軸は加えた誤差の標準偏差. 太実線：最小二乗法. 破線：最適最小二乗法. 細実線：くりこみ法. 点線：KCR 下界.

(55) の両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}^-$ を掛けて $\Delta_1\boldsymbol{u}$ について解くと式 (45) を得る．すなわち，最適最小二乗法とくりこみ法は 1 次の誤差に関しては等しい.

式 (45) を式 (56) に代入し，両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}^-$ を掛けて $\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ ($\equiv \bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_2\boldsymbol{u}$) について解くと次のようになる.

$$\begin{aligned}\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp = {} & \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\boldsymbol{u} \\ & +\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\boldsymbol{u} - \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{M}\boldsymbol{u} \\ & -\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2^*\boldsymbol{M}\boldsymbol{u} + \Delta_2 c\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{N}}\boldsymbol{u}\end{aligned} \tag{57}$$

最適最小二乗法の式 (46) と比較すると，異なるのは最後に付け加わった項 $\Delta_2 c\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{N}}\boldsymbol{u}$ である．$\Delta_2 c$ の期待値を計算すると $(1-(p-1)/N)\varepsilon^2$ となり [8], $\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ の期待値は次のようになる.

$$\begin{aligned}E[\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp] = {} & \varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2} \\ & +\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2} \\ & -\frac{p-1}{N}\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{N}}\boldsymbol{u}\end{aligned} \tag{58}$$

実際的な問題の多くはデータ点数 N がかなり大きいので，式 (58) の最後の項は非常に小さくなる．くりこみ法は非常によい精度であることが知られているが，これがその理由である [9, 10].

【例 4】 図 4 は図 2 の点列に当てはめた楕円の平均平方二乗誤差を示す．横軸は加えた誤差の標準偏差であり，太い実線は最小二乗法，破線は最適最小二乗法，細い実線はくりこみ法の結果を示す．点線は KCR 下界である．これからわかるように，最適最小二乗法による精度の向上は最小二乗法に比べて極めてわずかである．一方，くりこみ法の精度は非常に高く，KCR 下界にかなり近い．この違いは最小二乗法と Taubin 法との関係と同じであり（表 1），最適最小二乗法の式 (47) の最後の項が減少したためである. □

7. 最尤推定

式 (2) の**最尤推定**は，誤差 $\Delta\boldsymbol{\xi}_\alpha$ の分布を期待値 $\boldsymbol{0}$, 共分散行列 $\varepsilon^2 V_0[\boldsymbol{\xi}]$ の独立な正規分布とみなすと，拘束条件 $(\boldsymbol{u}, \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha) = 0$, $\alpha = 1, ..., N$ のもとで**マハラノビス距離**の二乗和

$$J = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{\xi}_\alpha - \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]^-(\boldsymbol{\xi}_\alpha - \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)) \tag{59}$$

を最小にする $\boldsymbol{u}, \bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha$ を計算することである．ラグランジュ乗数を導入して拘束条件を除去すれば，式 (59) は次式となる [6].

$$J = \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\boldsymbol{\xi}_\alpha, \boldsymbol{u})^2}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})}. \tag{60}$$

両辺を $\boldsymbol{u}$ に関して微分すると次のようになる.

$$\nabla_{\mathbf{u}}J = \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{2(\boldsymbol{\xi}_\alpha, \boldsymbol{u})\boldsymbol{\xi}_\alpha}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})} - \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{2(\boldsymbol{\xi}_\alpha, \boldsymbol{u})^2 V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2} \tag{61}$$

これを $\boldsymbol{0}$ にすればよいから，最尤推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ は次式の解である.

$$\hat{\boldsymbol{M}}\hat{\boldsymbol{u}} = \hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{u}} \tag{62}$$

ただし，行列 $\hat{\boldsymbol{M}}$ を次のように置いた.

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\boldsymbol{\xi}_\alpha, \hat{\boldsymbol{u}})^2 V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]}{(\hat{\boldsymbol{u}}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\hat{\boldsymbol{u}})^2} \tag{63}$$

式 (62) を数値的に解く代表的な方法は Chojnacki ら [2] の **FNS 法**，Leedan ら [11] の **HEIV 法**，および直接的な**ガウス・ニュートン法** [14, 16] がある．いずれかの方法で式 (62) を満たす解 $\hat{\boldsymbol{u}}$ が得られたとし，前節までと同様に式 (62) を次のように摂動展開する.

$$\begin{aligned}& (\bar{\boldsymbol{M}} + \Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M} + \Delta_2\boldsymbol{M} + \Delta_2^*\boldsymbol{M} + \cdots \\ & -\Delta_2\boldsymbol{L} - \Delta_2^*\boldsymbol{L})(\bar{\boldsymbol{u}} + \Delta_1\boldsymbol{u} + \Delta_2\boldsymbol{u} + \cdots) = \boldsymbol{0}\end{aligned} \tag{64}$$

ただし，次のように置いた.

$$\begin{aligned}\Delta_2\boldsymbol{L} &= \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\Delta\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \bar{\boldsymbol{u}})^2 V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]}{(\bar{\boldsymbol{u}}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{u}})^2}, \\ \Delta_2^*\boldsymbol{L} &= \sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \Delta_1\boldsymbol{u})^2 V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]}{(\bar{\boldsymbol{u}}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{u}})^2} \\ & \quad +2\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \Delta_1\boldsymbol{u})(\Delta\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, \bar{\boldsymbol{u}})V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]}{(\bar{\boldsymbol{u}}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{u}})^2}\end{aligned} \tag{65}$$

式 (63) の行列 $\boldsymbol{L}$ の真値はデータの誤差がなければ真値 $\bar{\boldsymbol{L}}$ は $\boldsymbol{O}$ であり，また 1 次の誤差項 $\Delta_1\boldsymbol{L}$, $\Delta_1^*\boldsymbol{L}$, も $\boldsymbol{O}$ である.

式 (65) の両辺を展開して同じ次数の項を等値すると次式を得る．

$$\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_1\boldsymbol{u} + (\Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M})\bar{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{0}, \tag{66}$$

$$\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_2\boldsymbol{u} + (\Delta_1\boldsymbol{M} + \Delta_1^*\boldsymbol{M})\Delta_1\boldsymbol{u} + (\Delta_2\boldsymbol{M} + \Delta_2^*\boldsymbol{M} \\ -\Delta_2\boldsymbol{L} - \Delta_2^*\boldsymbol{L})\bar{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{0} \tag{67}$$

式 (66) の両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}^-$ を掛けて $\Delta_1\boldsymbol{u}$ について解くと式 (45) を得る．すなわち，最尤推定は 1 次の誤差に関しては最適最小二乗法，およびくりこみ法と同等である．

式 (45) を式 (67) に代入し，両辺に $\bar{\boldsymbol{M}}^-$ を掛けて $\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp$ ($\equiv \bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{M}}\Delta_2\boldsymbol{u}$) について解くと次のようになる．

$$\begin{aligned}\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp = {} & \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{u}} \\ & +\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_1\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{u}} \\ & -\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{u}} - \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2^*\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{u}} \\ & +\bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2\boldsymbol{L}\bar{\boldsymbol{u}} + \bar{\boldsymbol{M}}^-\Delta_2^*\boldsymbol{L}\bar{\boldsymbol{u}}\end{aligned} \tag{68}$$

この期待値はやや複雑な計算の結果，次のようになる [8]．

$$E[\Delta_2\boldsymbol{u}^\perp] = \varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha}{(\boldsymbol{u}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2} \tag{69}$$

式 (47), (58) と比較すると，最後の 2 項が除去されていることがわかる．

8. 超精度補正

データ点数 N が ∞ の極限を考えるセミパラメトリックモデル [12, 13] を除けば，従来から最尤推定が最も高精度であると思われていた．しかし，式 (69) によって最尤推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ の偏差が評価されたので，これを $\hat{\boldsymbol{u}}$ から差し引くことよって精度がより改良されると期待される．これを**超精度補正**と呼ぶ．

もちろん式 (69) は真の値 $\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha$, $\boldsymbol{u}$ や未知のノイズレベル ε を含んでいるのでそのまま計算できない．そこでそれらを推定する．まず，真の値 $\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha$, $\boldsymbol{u}$ はそれぞれデータ $\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha$ および最尤推定量 $\hat{\boldsymbol{u}}$ によって近似する．ノイズレベル ε は当てはめの残差から次のように推定する [6]．

$$\hat{\varepsilon}^2 = \frac{(\hat{\boldsymbol{u}}, \hat{\boldsymbol{M}}\hat{\boldsymbol{u}})}{N-(p-1)} \tag{70}$$

以上より，超精度補正の式は次のようになる．

$$\tilde{\boldsymbol{u}} = N[\hat{\boldsymbol{u}} - \hat{\varepsilon}^2\hat{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\hat{\boldsymbol{M}}^-\boldsymbol{\xi}_\alpha, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\hat{\boldsymbol{u}})\boldsymbol{\xi}_\alpha}{(\hat{\boldsymbol{u}}, V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\hat{\boldsymbol{u}})^2}] \tag{71}$$

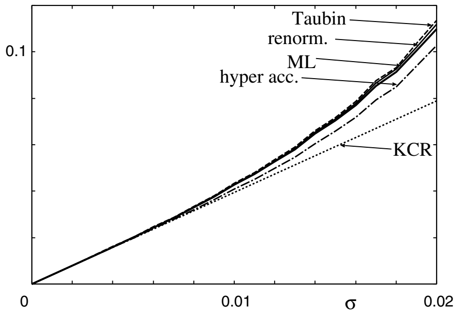

図 5: 図 2 の点列への楕円当てはめの平方平均二乗誤差．横軸は加えた誤差の標準偏差．破線 : Taubin 法．細実線 : くりこみ法．太実線 : 最尤推定．鎖線 : 超精度補正．点線 : KCR 下界．

表 2: 各手法の誤差の KCR 下界に対する比の平均．

最小二乗法	1.636
最適最小二乗法	1.575
Taubin 法	1.144
くりこみ法	1.133
最尤推定	1.125
超精度補正	1.007
KCR 下界	1.000

ただし，$N[\cdot]$ は単位ベクトルへの正規化を表す（図 1 参照）．

【例 5】 図 5 は図 2 のデータへの楕円当てはめの平均平方二乗誤差を示す．横軸は加えた誤差の標準偏差であり，破線は Taubin 法，細い実線はくりこみ法，太い実線は最尤推定の結果である．最尤推定の計算には Chojnacki ら [2] の FNS 法を用いた．点線は KCR 下界である．図からわかるように Taubin 法，くりこみ法，および最尤推定はほぼ同等の精度があり，いずれも誤差が小さいと KCR 下界にほぼ一致している．しかし，誤差が増加すると KCR 下界からやや離れる．これに対して，鎖線は最尤推定量に超精度補正を施したものであり，KCR 下界にかなり近づいていることがわかる[2]．表 2 はすべての方法の平方平均二乗誤差の対応する KCR 下界に対する比をすべての誤差の範囲に渡って平均したものである． □

9. まとめ

本論文では誤差のあるデータに拘束条件を当てはめる「幾何学的当てはめ」の代表的な解法を取り上げ，解の精度を 2 次の誤差項まで厳密に評価した．そして，手法間の精度の差が従来信じられていたような 1 次の誤差項に差ではなく，**2 次の誤差項**にあることを初めて明らかにした．表 3 に 2 次の誤差項の

[2]超精度補正は山田ら [16] が初めて示したが，$\Delta_2^*\boldsymbol{L}$ の項は考慮していなかった．

表 3: 2 次の偏差項のまとめ.

手法	2 次の偏差
最小二乗法	$\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{u},V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha+\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\sum_{\alpha=1}^{N}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha,\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}-\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\boldsymbol{N}_0\boldsymbol{u}$
Taubin 法	$\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{u},V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha+\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\sum_{\alpha=1}^{N}(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha,\bar{\boldsymbol{M}}_0^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}$
最適最小二乗法	$\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha,V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha}{(\boldsymbol{u},V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}+\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha,\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}}{(\boldsymbol{u},V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}-\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{N}}\boldsymbol{u}$
くりこみ法	$\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha,V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha}{(\boldsymbol{u},V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}+\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha,\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha)V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u}}{(\boldsymbol{u},V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}-\frac{p-1}{N}\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{N}}\boldsymbol{u}$
最尤推定	$\varepsilon^2\bar{\boldsymbol{M}}^-\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(\bar{\boldsymbol{M}}^-\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha,V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})\bar{\boldsymbol{\xi}}_\alpha}{(\boldsymbol{u},V_0[\boldsymbol{\xi}_\alpha]\boldsymbol{u})^2}$

期待値（偏差）をまとめる．そして，楕円当てはめの数値シミュレーションによって次の事実を示した．

1. 最小二乗法と Taubin 法は 1 次の誤差が同じであるにもかかわらず，後者が圧倒的に高精度である．これは最小二乗法の主要な 2 次の偏差項が除去されるためである．
2. 最適最小二乗法は 1 次の誤差の共分散行列が KCR 下界を達成するにもかかわらず，通常の最小二乗法に対する精度の向上はごくわずかである．これは精度の決定要因が 2 次の誤差項にあるためである．
3. くりこみ法は最適最小二乗法と 1 次の誤差が同じであるにもかかわらず，後者に比べて圧倒的に高精度である．これは主要な 2 次の偏差項が除去されるためである．
4. 最尤推定の 2 次の偏差項はくりこみ法よりもさらに小さい．しかし，精度の向上はごくわずかである．
5. 最尤推定の 2 次の偏差項を推定して最尤推定解から差し引く「超精度補正」によって精度はさらに向上する．

謝辞. 本研究の一部は文部科学省科学研究費基盤研究 C (No. 17500112) の助成によった．有益な討論を行って頂いた米国 Alabama 大学の Nikolai Chernov 博士，およびオーストラリア Adelaide 大学の Wojciech Chojnacki 博士に感謝する．また数値実験を行った豊橋技術科学大学の菅谷保之講師および岡山大学大学院の山田純平氏に感謝する．

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, 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.

[3] R. Hartley and A. Zisserman, *Multiple View Geometry in Computer Vision*, Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 2000.

[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] 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.

[6] K. Kanatani, *Statistical Optimization for Geometric Computation: Theory and Practice*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1996; Reprinted by Dover, New York, U.S.A., 2005.

[7] 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.

[8] K. Kanatani, Hyperaccuracy for geometric fitting, 4th Int. Workshop on Total Least Squares and Errors-in-Variables Modelling, Leuven, Belgium, August, 2006.

[9] 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: コンピュータビジョンとイメージメディア, **42**-SIG 6 (2001-6), 1–8.

[10] K. Kanatani, N. Ohta and Y. Kanazawa, Optimal homography computation with a reliability measure, *IEICE Trans. Inf. & Sys.*, **E83-D**-7 (2000-7), 1369–1374.

[11] Y. Leedan and P. Meer, Heteroscedastic regression in computer vision: Problems with bilinear constraint, *Int. J. Comput. Vision.*, **37**-2 (2000), 127–150.

[12] 太田直哉, 栗原祐介, かく乱母数を含まないオプティカルフローからの運動パラメータ推定, 電子情報通信学会論文誌 A, **J86A**-7, (2003-7), 772–780.

[13] 岡谷貴之, 出口光一郎, 画像からのカメラの姿勢・3 次元形状復元における推定精度の限界について, 第 6 回画像の認識・理解シンポジウム講演論文集, 2002 年 7–8 月，名古屋, pp. 335–340.

[14] 菅谷保之, 金谷健一, 基礎行列の高精度計算法とその性能比較, 情報処理学会研究報告, 2006-CVIM-153-32 (2006-3), 207–214.

[15] G. Taubin, “Estimation of planar curves, surfaces, and non-planar space curves defined by implicit equations with applications to edge and rage image segmentation,” IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell., **13**-11 (1991-11), 1115–1138.

[16] 山田純平, 金谷健一, 菅谷保之, 楕円当てはめの高精度計算法とその性能比較, 情報処理学会研究報告, 2006-CVIM-154-36 (2006-5), 339–346.